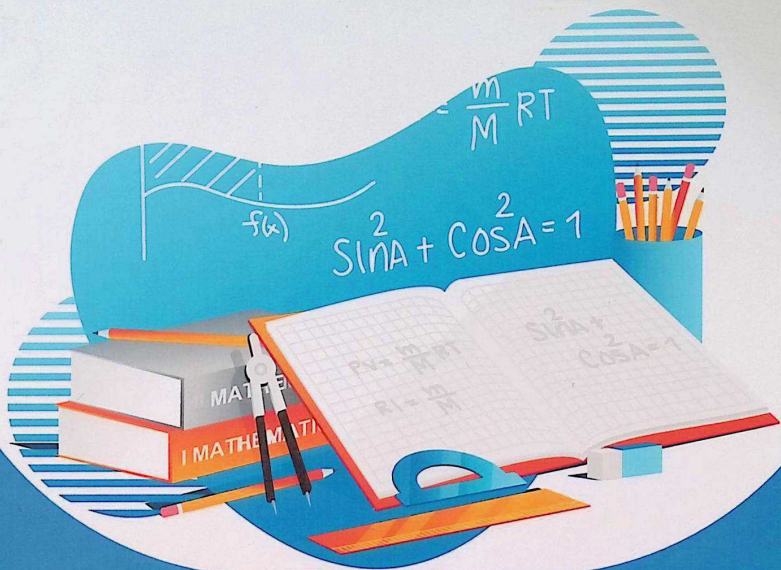


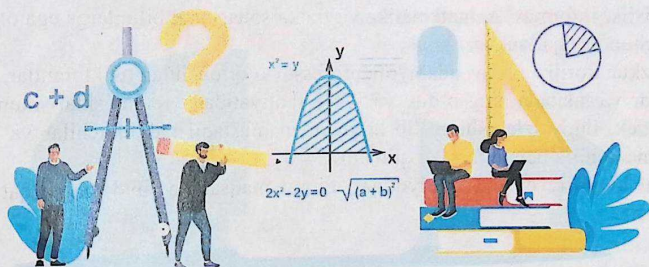


J. TINSLEY ODEN

MATEMATIK MODELLASHTIRISHGA KIRISH: MEXANIKA KURSI

J. TINSLEY ODEN

MATEMATIK MODELLASHTIRISHGA KIRISH: MEXANIKA KURSI



Toshkent – «Donishmand ziyosi» – 2025

UO'K 519.87:531

KBK 22.311

O-28

519
0-28

**O'zbekiston Respublikasi Oliy ta'lim, fan va innovatsiyalar vazirligi
huzuridagi Oliy ta'limni rivojlantirish tadqiqotlari markazining
buyurtmasiga asosan nashrga tayyorlandi va chop etildi**

Ingliz tilidan A.B. Axmedov va A.A. Xoljigitovlar tarjimai

J. Tinsley Oden.

Matematik modellash tirishga kirish: mexanika kursi [Matn]: qo'llanma /
J. Tinsley Oden. – Toshkent: Donishmand ziyosi, 2025. – 256 b.

Matematik nazariya va hisoblash mexanikasi bo'yicha dunyo miqyosidagi mutaxassis tomonidan yozilgan bu kitob tutash muhitlar mexanikasi, elektromagnit maydon nazariyasi, kvant mexanikasi va statistik mexanika haqida turli muhandislik, informatika, matematika va fizika sohasidagi bilimlarga ega o'quvchilar uchun mo'ljallangan.

Mazkur xorijiy o'quv adabiyoti professor-o'qituvchilar, doktorantlar, magistrantlar va talabalarning o'quv va ilmiy faoliyatida foydalanishlari mumkin. Shuningdek, ilmiy izlanishlar olib borayotgan mustaqil tadqiqotchilar va keng ilmiy jamoatchilik uchun tavsiya qilinadi.

Ushbu xorijiy o'quv adabiyotidan tijorat maqsadida foydalanish qat'iyan man etiladi.



ISBN 978-9910-715-64-8

© J. Tinsley Oden, 2025

© «Donishmand ziyosi», 2025

«Matematik modellashirishga kirish: Mexanika kursi» zamonaviy fan asoslarini tashkil etuvchi matematik modellarni o'rganishga mo'ljallangan va eng muvaffaqiyatli modellar qanday qilib zamonaviy va klassik matematik fizika asosiy tamoyillaridan kelib chiqishini ko'rsatuvchi misollarni o'z ichiga oladi.

Mavzu uchta aniq tashkil etilgan bo'limda keng qamrovli tushunishni ta'minlaydi:

- Noan'anaviy tutash muhitlar mexanikasi deformatsiyalanadigan jismlarda kinematika, kuch va kuchlanish, massa va impuls; chiziqli va burchak impuls muvozanati; energiya saqlanishi va konstitutiv tenglamalar bilan tanishtiradi.

- Elektromagnit maydon nazariyasi va kvant mexanikasi elektromagnit to'liq nazariyasi va Maxwell tenglamalari hamda kvant mexanikasi va qo'llanmalari, jumladan, ab initio usullar, Spin va Pauli tamoyillari haqida batafsil ma'lumot beradi.

- Statistik mexanika termodinamik muvozanatda bo'lgan tizimlarning statistik mexanikasi bilan bir qatorda uzluksiz muhitlar mexanikasi, kvant mexanikasi va molekulyar dinamikaga kirish qismidir.

Kitobning har bir qismi o'quvchilarga taqdim etilgan materialni tushunishni tekshirishga imkon beruvchi mashqlar to'plamlari bilan yakunlanadi. Asosiy teorema va fundamental tenglamalar davomida yoritilgan bo'lib, keyingi o'rganish uchun keng bibliografiyani o'z ichiga oladi.

Ommaviy sinovlardan o'tgan holda, «An Introduction to Mathematical Modeling» matematik modellashirish va statistik mexanika kurslari uchun yuqori bakalavriat va magistratura darajasida ajoyib kitobdir. Kitob, shuningdek, modelashirish va simulyatsiya, fizika va hisoblash muhandisligi sohalarida ishlayotgan mutaxassislar uchun qimmatli ma'lumotnoma bo'lib xizmat qiladi.

Tarjimonlar sizlarga havola etilayotgan kitobning formulalarini terishda katta mas'uliyat bilan yondashgan O'zbekiston milliy universiteti o'qituvchilari M. Ruzmatov, kitob matnini rasmiylashtirishda o'z hissalarini qo'shgan N. Xolmanov va O. Tilovov, rasmlarni ustalik bilan tasvirlagan doktorant D. Yoqubjonovlarga o'zlarining samimiy minnatdorchiliklarini bildiradilar.

KIRISH

Ushbu matn matematik modellashtirishga kirish kursi uchun yozilgan bo'lib, ilm-fan, matematika va muhandislik sohasida turli xil bilimlarga ega bo'lgan va hisoblash texnikasi, muhandislik va matematika dasturiga kirayotgan talabalarni qanday qurishni o'rgatishga bag'ishlanmagan. Bu kurs zamonaviy fan va muhandislikning asosini tashkil etuvchi klassik matematik modellarning umumiy ko'rinishini talabalarning bakalavr darajasini tamomlayotgan yoki hisoblash fanlaridagi magistratura dasturiga kirayotgan bosqichda tushunarli darajada yoritishga qaratilgan. Ushbu jarayonda men bugungi kunda keng qo'llanilayotgan eng muvaffaqiyatli modellar qanday qilib asosiy prinsiplardan va zamonaviy hamda klassik matematikadan kelib chiqqanini misollar orqali ko'rsataman. Talabalardan chiziqli algebra, matritsa nazariyasi, vektor analiz va qisman differensial tenglamalarning kirish kurslari haqida ma'lum bir bilimga ega bo'lishi kutiladi, ammo ushbu shartlarning hammasiga ega bo'lmaganlar topshiriqlarni bajarish orqali bo'shliqni to'ldira olishlari kerak.

Men bu kitobni mexanika bo'yicha darslik deb atadim, chunki u uzluksiz muhit mexanikasi, elektromexanika, kvant mexanikasi va statistik mexanikaga kirishni qamrab oladi. Agar mexanika jismlar harakati, ularning deformatsiyasi va harorat o'zgarishlarini, kuch ta'sirida tasvirlashga bag'ishlangan fizika va matematik fan sohasi bo'lsa va agar bunga to'liqlarning tarqalishi va fizik tizimlarda energiyaning o'zgarishini o'rganish ham qo'shilsa, unda mexanika atamasi bu yerda qamrab olingan barcha narsalarga mos keladi.

Kurs uch qismga bo'lingan. 1-qism tutash muhit mexanikasining chiziqsiz modeli bo'yicha qisqa kursdan iborat; 2-qism elektromagnit to'liqlar nazariyasi va Maxwell tenglamalari haqida qisqacha ma'lumot beradi hamda bakalavr darajasiga mo'ljallangan, ammo fizikada yoki muhandislikda o'qiydigan ko'pchilik talabalardan biroz ko'proq matematik tayyorgarlik talab qiluvchi kvant mexanikasiga kirish bilan to'ldiriladi; 3-qism esa termodinamik muvozanatda bo'lgan tizimlarning statistik mexanikasiga qisqacha kirishni taqdim etadi.

Mazkur ishning tarkibiy qismlari bo'yicha mening tushunchalarimni shakllantirishga va ularni bu yerda bayon qilishga ilhom bergan ko'plab yaxshi asarlar mavjud. Gurtin, Kiarlet va Batra tomonidan yozilgan kitoblar uzluksiz muhit mexanikasini tushunarli darajada yoritgan ajoyib asarlardir, Griffithsning kvant mexanikasiga kirish bo'yicha yozilgan kitobi esa yaxshi yozilgan. Statistik mexa-

nika bo'yicha Weiner va McQuarrie kabi mualliflarning kitoblari ushbu mavzuni ajoyib kirish qismi bilan taqdim etadi. Umid qilamanki, ushbu kitobdagi qisqa tanishtiruv talabalarni ushbu mavzularni chuqurroq o'rganishga ilhomlantiradi va ularni ilg'or matnlarda yoritilgan chuqurroq tadqiqotlar uchun zarur bo'lgan vositalar bilan ta'minlaydi.

Kitobda bitilganlarning yillar davomida rivojlanishi bir qator hamkasblarning fikr-mulohazalari tufayli yuz berdi. Men Serge Prudhommedan dastlabki versiyalarni tahrirlab, yaxshilash bo'yicha foydali takliflar bergani uchun minnatdorman. Alex Demkovga esa 2-qismni o'qib, sharhlar bergani uchun rahmat aytaman.

Albert Romkesga dastlabki loyihalarda, Ludovic Chamoinga kvant mexanikasiga oid materiallarning dastlabki loyihalarini tuzishda va yozishda yordam bergani uchun, shuningdek, Kris van der Zeega qo'lyozmaning bir versiyasini tuzib, tahrirlash va mashqlar bilan yordam berishga ko'p vaqt ajratgani uchun samimiy minnatdorchilik bildiraman.

Shuningdek, 2- va 3-qismni yaxshilash bo'yicha ko'plab takliflar bildirgani va yakuniy qo'lyozmani tayyorlashda yordam bergani uchun Pablo Selesondan minnatdorman.

Muallif

I QISM. NOCHIZIQLI TUTASH MUHITLAR MEXANIKASI

1-BOB. DEFORMATSIYALANUVCHI QATTIQ JISMLAR KINEMATIKASI

Tutash muhitlar mexanikasi fizik olamni «deformatsiyalanuvchi jismlar» to'plami sifatida modellashtiradi. Bu tushuncha kundalik hayotimizda kuzatiladigan hodisalardan kelib chiqqan holda oson qabul qilinadi. Deformatsiyalanuvchi jismlar uch o'lchamli Yevklid fazosi $\mathcal{E}$ dagi sohani egallaydi. Berilgan jism turli vaqtlar ichida turli sohalarni egallaydi. Jism B tomonidan $\mathcal{E}$ da egallangan qism to'plam uning **konfiguratsiyasi** deb ataladi. Jismlarning geometriyasi va fizik holatini aniqlash uchun har doim biror konfiguratsiyani tanlash va uni **asosiy konfiguratsiya** sifatida qarash qulaydir; keyin boshqa konfiguratsiyalarni asosiy konfiguratsiya bilan taqqoslash orqali tavsiflash mumkin (bu tushunchalar keyin batafsilroq qaraladi).

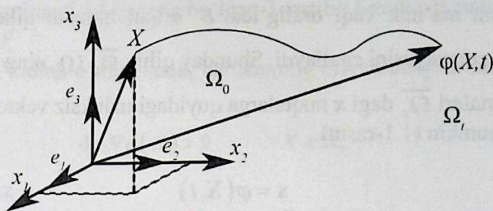
Faraz qilaylik, berilgan jism uchun qaralayotgan asosiy konfiguratsiya R^3 fazoda aniqlangan ochiq, chegaralangan, bir bog'lamli silliq $\partial\Omega_0$ chegarali Ω_0 qism to'plamdan iborat bo'lsin. Ma'lumki, jism moddiy nuqtalar deb ataladigan fizik nuqtalardan iborat. Ushbu moddiy nuqtalarni aniqlash uchun Dekart koordinata sistemasiga OX vektorini kiritamiz va uning koordinatalarini moddiy nuqta egallagan nuqtaning koordinatalari sifatida qaraymiz.

B jismni son-sanoqsiz material nuqtalardan tashkil topgan X to'plam sifatida tushunish muhimdir. Bu muhit mexanikasining asosiy farazidir: Materiya diskret emas, u R^3 fazo qism to'plami va moddiy nuqtalar orasida uzluksiz bir-qiyimatli moslik asosida hosil qilingan. Shunday qilib jismlar «tutash muhit» sifatida qabul qilinadi. X ning komponentlarini biror bazisga nisbatan haqiqiy sonlar sifatida qarash mumkin. Simvolik ravishda quyidagicha yozishimiz mumkin:

$$B = \{\mathbf{X}\} \quad \{\mathbf{X} = X_i \mathbf{e}_i \in \overline{\Omega_0}\}$$

Bu yerda $\{e_1, e_2, e_3\}$ ortonormal bazis va 0 uch o'lchovli Yevklid R^3 fazosidagi boshlang'ich nuqta. Bundan keyin, takroriy indekslar bo'yicha yig'indi bor deb hisoblaymiz, ya'ni «yig'indi konvensiyasi»ni qabul qilamiz.

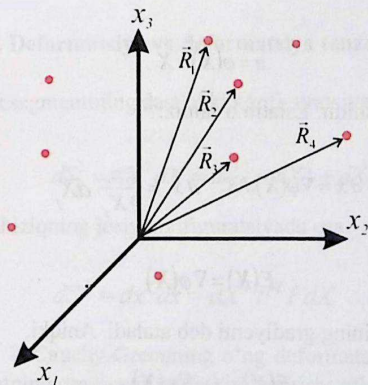
Kinematikada jismlar harakati, uni yuzaga keltiruvchi sabablari inobatga olmagan holda o'rganiladi. Bu tutash muhit mexanikasining farazlari asoslangan aniq fan bo'lib, uni sof geometrik masala deb qarash kerak.



1.1-rasm. Asosiy Ω_0 konfiguratsiyadan keyingi Ω_1 konfiguratsiyaga o'tish.

1.1. Harakat

Biz $\mathbb{R}^3$ da 0 nuqtani $e_i, i = 1, 2, 3$ ortonormal vektorlari bilan aniqlangan $(x_1, x_2, x_3) = x$ koordinatalar sistemasining boshi sifatida tanlaymiz. (x_1, x_2, x_3) sistema fazoviy koordinatalar sistemasi deb ataladi. B fizik jism o'zining Ω_0 asosiy konfiguratsiyasini egallaganda, aytaylik, $t=0$ vaqtda, X moddiy nuqtaning holatini $X = X_i e_i$ vektori bilan belgilaylik. X ning fazoviy koordinatalari (X_1, X_2, X_3) moddiy nuqtaning holatini aniqlaydi. X_i koordinatalar ba'zan moddiy X_i koordinatalar deb ham ataladi (1.1-rasmga qarang).



1.2-rasm. Moddiy zarrachalarning diskret to'plami

Izoh. Agar molekulyar yoki atom dinamikasi modellaridagi kabi diskret moddiy nuqtalarning soni sanoqli bo'lsa, 1.2-rasmga ko'rsatilganidek, $n \in \mathbb{N}$ natural sonlari yordamida belgilash mumkin. Ammo tutash muhitdagi zarrachalarni (moddiy nuqtalar) soni cheksiz, shuning uchun har bir nuqtani, asosiy konfiguratsiyada uchta haqiqiy mos sonlar bilan ($t = 0$ da) ta belgilash tabiiyroq ko'rinadi.

Qattiq jism ma'lum vaqt oralig'ida $\mathcal{E}$ orqali harakat qiladi va t vaqtida $\partial\Omega, \subset R^3$ konfiguratsiyasini egallaydi. Shunday qilib, $\overline{\Omega_0}$ (Ω_0 ning qoplamasi) dagi X moddiy nuqtalari $\overline{\Omega_t}$ dagi x nuqtalarga quyidagi uzluksiz vektor funksiya bilan akslantirish mumkin (1.1-rasm).

$$x = \varphi(X, t) \quad (1.1)$$

Shunday qilib, $\varphi(X, t)$ – X moddiy nuqtaning t vaqtdagi fazodagi holatidir. Holatlarning bir parametrliligi $\{\varphi(X, t)\}$ oilasi X ning trayektoriyasi deb ham ataladi. Biz φ ni differensiallanuvchi, bir qiymatli va yo'nalishni saqlaydigan funksiya bo'lishini talab qilamiz. U holda φ jismning harakati deyiladi:

1. Ω_t jismning joriy konfiguratsiyasi deyiladi.

2. φ bir qiymatli (ehtimol Ω_0 ning $\partial\Omega_0$ chegarasidan tashqari).

3. φ – oriyehtatsiyani saqlovchi (bu materialning o'z-o'ziga kira olmasligini yoki material koordinatalar yo'nalishini teskari tomonga o'zgartira olmasligini anglatadi, ya'ni $(\det \nabla \varphi(X, t) > 0)$).

Bundan tashqari, biz φ va boshqa miqdorlarning t vaqtga bog'liqligini aniq ko'rsatmaymiz, agar bunga zarurat bo'lmasa; bu vaqtga bog'liqlik keyinroq muhokama qilinadi.

Vektor maydon

$$u = \varphi(X) - X \quad (1.2)$$

X nuqtaning ko'chishidir. Eslatib o'tamiz:

$$dx = \nabla \varphi(X) dX \quad dx_j = \frac{\partial \varphi_j}{\partial X_i} dX_i$$

Tenzor

$$F(X) = \nabla \varphi(X) \quad (1.3)$$

deformatsiya tenzorining gradiyenti deb ataladi. Aniqki,

$$F(X) = I + \nabla u(X) \quad (1.4)$$

bu yerda, I – birlik tenzor va ∇u – ko'chish gradiyenti.

Ba'zi ta'riflar

Agar $F = C$ = doimiy bo'lsa, deformatsiya bir jinsli deyiladi.

Harakat qat'iy hisoblanadi, agar u a ko'chish va Q aylanishlarning yig'indisidan tashkil topgan bo'lsa:

$$\phi(X) = a + QX$$

bu yerda O_+^3 determinanti +1 ga teng bo'lgan 3-tartibli ortogonal matritsalar to'plami, $\alpha \in R^3, Q \in O_+^3$

• Yuqorida ta'kidlab o'tilganidek, harakatning oriyentatsiyani saqlashi quyidagini anglatadi:

$$\det \nabla \varphi(X) > 0 \quad \forall X \in \bar{\Omega}_0$$

Eslatib o'tamiz

Cof $\mathbf{F}$ = ning kofaktor matritsasi (tenzori). $\mathbf{F} = \det \mathbf{F}^{-T}$

Har qanday n tartibli $A = [A_{ij}]$ matritsasi va har bir i satr va j ustun uchun A ning i qatori va j ustunini o'chirish natijasida olingan $(n-1)$ tartibli matritsa A_{ij} bo'lsin. $d_{ij} = (-1)^{i+j} \det A_{ij}$, bo'lsin.

U holda matritsa

$$\text{Cof } A = [d_{ij}]$$

A ning kofaktor matritsasi va d_{ij} A ning (i, j) kofaktori bo'ladi. Quyidagilarni e'tiborga olamiz:

$$A(\text{Cof } A)^T = (\text{Cof } A)^T A = (\det A)I \quad (1.5)$$

1.2. Deformatsiya va deformatsiya tenzorlari

Material chizig'i segmentining dastlabki konfiguratsiyasidagi differensial quyi-
yidagicha bo'ladi:

$$dS_0^2 = d\mathbf{X}^T d\mathbf{X} = dX_1^2 + dX_2^2 + dX_3^2$$

xuddi shu material chiziqning joriy konfiguratsiyada esa

$$dS^2 = dx^T dx = d\mathbf{X}^T \mathbf{F}^T \mathbf{F} d\mathbf{X}$$

Tenzor $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$ – Cauchy-Greenning o'ng deformatsiya tenzori bo'lib, dS_0^2 ning harakat (harakatning gradiyenti) tufayli o'zgarishi o'lchamini ifodalaydi:

$$dS^2 - dS_0^2 = d\mathbf{X}^T \mathbf{C} d\mathbf{X} - d\mathbf{X}^T d\mathbf{X}$$

$\mathbf{C}$ simmetrik, musbat aniqlangan matritsadir. Boshqa deformatsiya o'lchovi oddiy

$$dS^2 - dS_0^2 = d\mathbf{X}^T (2\mathbf{E}) d\mathbf{X}$$

bu yerda

$$E = \frac{1}{2}(C - I) = \text{Green-St. Venant deformatsiya tenzori} \quad (1.6)$$

$F = I + \nabla u$ va $C = FF^T$ larni inobatga olib quyidagi ifodaga ega bo'lamiz.

$$E = \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla u^T + \nabla u^T \nabla u) \quad (1.7)$$

Tenzor $B = FF^T$ – Cauchy-Greenning chap deformatsiya tenzori, bo'lib, u simmetrik va musbat aniqlangan va biz uni quyidagicha aniqlashimiz mumkin.

$$dS^2 - dS_0^2 = dX^T F^T (2\hat{A}) F dX = dx^T (2\hat{A}) dx$$

Bu yerda

$$\hat{A} = \frac{1}{2}(I - B^{-1}) \quad \text{Almansi-Hamel deformatsiya tenzori} \quad (1.8)$$

yoki

$$\hat{A} = \frac{1}{2}(\text{grad } u + \text{grad } u^T - \text{grad } u \text{ grad } u^T) \quad (1.9)$$

bu yerda $\text{grad } u$ – fazoviy gradiyent bo'lib, $\text{grad } u = \partial u / \partial x$, ya'ni $(\text{grad } u)_{ij} = \partial u_i(X(x), t) / \partial x_j$ (1.3 bo'limda ham ko'rishimiz mumkin).

E ni talqin qilish uchun $dS_0^2 = dX_1$ qaraymiz (ya'ni, $dX = (dX_1, 0, 0)^T$) ni olamiz. U holda

$$dS^2 - dS_0^2 = dS^2 - dX_1^2 = (I + 2E_{11}) dX_1^2$$

shunday qilib

$$E_{11} = \frac{1}{2} \left(\left(\frac{ds}{dX_1} \right)^2 - 1 \right) = \begin{cases} \dot{U}_0 \text{dagi chiziqlarning} \\ \text{cho'zilish o'lchovi } X_1 \\ \text{yo'nalishida yo'naltirilgan} \end{cases}$$

X da X_1 yo'nalishidagi cho'zilishni e_1 deb belgilaymiz (bu bir o'lchov uzunligining o'zgarish o'lchovini ifodalaydi)

$$e_1 = \frac{dS - dX_1}{dX_1} = \sqrt{I + 2E_{11}} - 1$$

yoki

$$2E_1 = (1 + e_1)^2 - 1$$

Shunga o'xshash ta'riflar E_{22} va E_{33} uchun ham qo'llaniladi.

Endi $dX = (dX_1, dX_2, 0)^T$ ni olamiz va

$$\cos \theta = \frac{dx_1 \times dx_2}{\|dx_1\| \|dx_2\|} = \frac{C_{12}}{\sqrt{1 + 2E_{11}} \sqrt{1 + 2E_{22}}}$$

X_1 - X_2 tekisligidagi siljish (yoki buralish deformatsiyasi) burchakning o'zgarishi bilan aniqlanadi (1.3-rasmga qarang):

$$\gamma_{12}^{\text{def}} = \frac{\pi}{2} - \theta$$

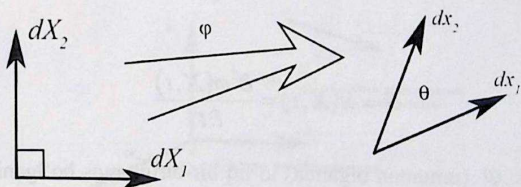
Shuning uchun

$$\sin \gamma_{12} = \frac{2E_{12}}{\sqrt{1 + 2E_{11}} \sqrt{1 + 2E_{22}}} \quad (1.10)$$

Shunday qilib, E_{12} (xuddi shunday, E_{13} va E_{23} uchun ham) X_1 - X_2 tekisligidagi (yoki X_1 - X_3 va X_2 - X_3 tekisliklaridagi) siljishni o'lchash uchun ishlatiladi.

Kichik deformatsiyalar. Bu tenzor

$$e = \frac{1}{2} (\nabla u + \nabla u^T) \quad (1.11)$$



1.3-rasm. φ harakat paytidagi burchak o'zgarishi

Cheksiz kichik yoki muhandislik deformatsiyasi deb ataladi. Ma'lumki,

$$E = e + \frac{1}{2} \nabla u^T \nabla u \quad (1.12)$$

Eslatib o'tamiz, agar E «kichik» (ya'ni $E_{ij} \ll 1$) bo'lsa, unda biz quyidagini olamiz:

$$e_1 = (1 + 2E_1)^{1/2} - 1 = 1 + E_1 - 1 + 0(E_1^2) \approx E_1 = e_1$$

ya'ni

$$e_{11} = e_1 = \frac{dS - dX_1}{dX_1} \quad \text{va h.k.}$$

va

$$2e_{12} = \sin \gamma_{12} \approx \gamma_{12} \quad \text{va h.k.}$$

Shunday qilib, kichik deformatsiyalarning klassik talqini quyidagicha izohlanishi mumkin: e_{ij} – bir birlik uzunlikdagi kesma uzunlikning o'zgarishini va e_{12} – X_1 va X_2 yo'nalishlaridagi material chiziqlar orasidagi to'g'ri burchakning o'zgarishini ifodalaydi. Kichik deformatsiyalar holatida Green–St. Venant deformatsiya tenzori va Almansi–Hamel deformatsiya tenzorlari bir-biridan farqlanmaydi.

1.3. Harakat tezligi

Agar $\varphi(X, t)$ (X ning t vaqtda) harakati bo'lsa, ya'ni

$$x = \varphi(X, t)$$

u holda

$$\dot{x} = \dot{x}(X, t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \varphi(X, t)}{\partial t} \quad (1.13)$$

tezlik va

$$\ddot{x} = \ddot{x}(X, t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial^2 \varphi(X, t)}{\partial t^2} \quad (1.14)$$

esa tezlanishdir. φ (umuman olganda) to'liq bir-biriga mos bo'lgani uchun, biz tezlikni R^3 da x koordinata va t vaqt funksiyasi sifatida ham tasvirlashimiz mumkin:

$$v = v(x, t) = \dot{x}(\varphi^{-1}(x, t), t)$$

Bu tezlikning fazoviy tavsifi deb ataladi.

Bu tutash muhit harakat tezligini talqin qilishning ikki xil usuliga olib keladi:

- Moddiy tavsifi (funksiyalar, R^3 dagi nuqtalarga mos ravishda, B jismning X moddiy nuqtalari orqali aniqlanadi);

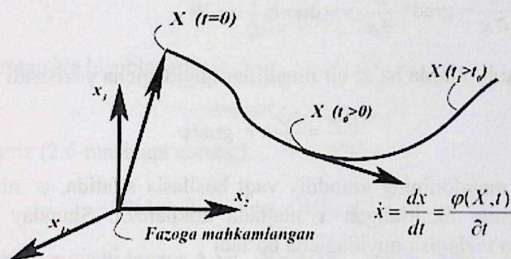
- Fazoviy tavsif (funksiyalar R^3 dagi x (fazoviy) koordinatalar bilan aniqlanadi)

Tutash muhitlar mexanikasi tenglamalari moddiy tavsif nuqtayi nazaridan yozilsa, birgalikdagi tenglamalar odatda tenglamalarning Lagrangian koordinatalari (formulasi) deb ataladi (1.4-rasmga qarang). Fazoviy tavsifdan foydalanilganda, Eulerian koordinatalari (formulyatsiya) atamasi qo'llaniladi (1.5-rasmga qarang).

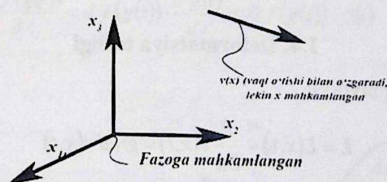
Lagrang va Euler koordinatalarida tezlik o'zgarishida farqlar mavjud. Mexanikaning asosiy qonunlari Lagrang shaklida ifodalangan. Lagrang formulasi quyidagicha:

- Lagrangian koordinatalarida: $\psi_m = \psi_m(X, t)$ maydoni berilgan (m indeksining bizga ψ ning material koordinatalariga bog'liq funksiya ekanligini ko'rsatadi).

$$\frac{d\psi_m(X, t)}{dt} = \frac{\partial\psi_m(X, t)}{\partial t} + \frac{\partial\psi_m(X, t)}{\partial X} \cdot \frac{\partial X}{\partial t}$$



1.4-rasm. Lagrang (material) koordinatalari bo'yicha tezlik. Material nuqtasining tezligi – nuqtaning joylashuvi vaqt o'tishi bilan o'zgarishi, ya'ni R^3 bo'ylab harakatlanish yo'lida (trayektoriyasida) harakatlanayotgandagi tezlik



1.5-rasm. Euler (fazoviy) koordinatalari bo'yicha tezlik. R^3 da berilgan fiksirlangan x dagi tezlik – bu t vaqtidagi x nuqta orqali oqayotgan zarrachalarning tezligi va yo'nalishidir

Ammo $\partial X / \partial t = 0$, chunki X shunchaki oddiy moddiy nuqtadir. Shuning uchun,

$$\frac{d\psi_m(X, t)}{dt} = \frac{\partial\psi_m(X, t)}{\partial t} \quad (1.15)$$

Eulerian koordinatalar sistemasida: $\psi = \psi(x, t)$ maydoni berilgan,

$$\frac{d\psi(x, t)}{dt} = \left. \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} \right|_{x \text{ fiksirlangan}} + \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial t}$$

lekin $\partial x / \partial t = v(x, t)$ – bu x nuqta va t vaqtdagi tezlikdir. Shunday qilib,

$$\frac{d\psi(x, t)}{dt} = \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} + v(x, t) \cdot \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \quad (1.16)$$

Eslatma. Lagrang va Euler koordinatalarida maydonlarning gradiyenti va divergensiyasini quyidagicha ajratamiz:

$$\text{Lagrang: } \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} = \nabla = \text{Grad}, \quad \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} \cdot \varphi = \nabla \cdot \varphi = \text{Div} \varphi;$$

$$\text{Euler: } \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} = \text{grad}, \quad \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} = \text{div} \mathbf{v}.$$

Klassik adabiyotlarda ba'zi bir mualliflar quyidagicha yozishadi

$$\frac{D\psi}{Dt} = \frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \text{grad} \psi \quad (1.17)$$

ψ skalyar maydonining «moddiy vaqt hosilasi» sifatida, ψ ning o'zgarish tezligini t vaqtida fiksirlangan x nuqtada aniqlanadi. Shunday qilib, Euler koordinatalarida tezlanish quyidagicha bo'ladi

$$\mathbf{a} = \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \text{grad}) \mathbf{v}$$

bu yerda $\mathbf{v}$ – tezlik.

1.4. Deformatsiya tezligi

Fazoviy (Euler) maydoni

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}(x, t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{v}(x, t) = \text{grad} \mathbf{v}(x, t) \quad (1.18)$$

tezlik gradiyentidir. Deformatsiya gradiyentining $\mathbf{F}$ vaqt bo'yicha o'zgarish:

$$\dot{\mathbf{F}} \equiv \frac{\partial}{\partial t} \nabla \varphi(\mathbf{X}, t) = \nabla \frac{\partial \varphi}{\partial t}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} \mathbf{v}(x, t) = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \mathbf{X}} = \text{grad} \mathbf{v} \mathbf{F}$$

yoki

$$\dot{\mathbf{F}} = \text{grad} \mathbf{v} \mathbf{F} = \mathbf{L}_m \mathbf{F} \quad (1.19)$$

bu yerda $L_m = L$ moddiy koordinatalarda yoziladi, shuning uchun

$$L_m = \dot{F}F^{-1} \quad (1.20)$$

L ni simmetrik va anti-simmetrik qismlarga ko'ra yozish odatiy amaliyotdir:

$$= + \quad (1.21)$$

Bu yerda:

$$D = \frac{1}{2}(L + L^T) \text{ deformatsiya tezligi tenzoridir.}$$

$$W = \frac{1}{2}(L - L^T) \text{ buralish tenzoridir.} \quad (1.22)$$

Osonlik bilan ko'rsatishimiz mumkinki, agar v tezlik maydoni bo'lsa,

$$Wv = \frac{1}{2}\omega \times v \quad (1.23)$$

bu yerda ω – rotatsiya hisoblanadi va

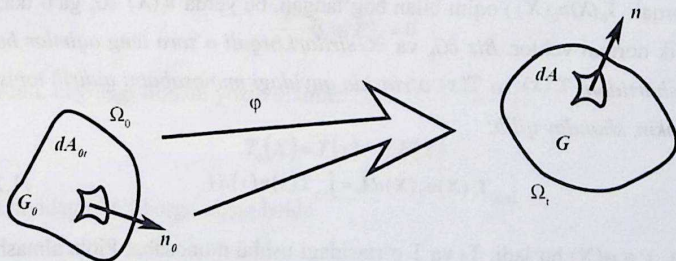
$$\omega = \text{curl } v \quad (1.24)$$

Eslab o'tamiz (2.6-mashqqa qarang).

$$D(\det A): V = (\det A)V^T: A^{-1},$$

har qanday teskarilανuvchi tenzor A va $V \subset L(V, V)$ uchun. Agar $f(g(t)) = f \circ g(t)$ funksiya f va g dekompozitsiyasini ifodalasa, unda differensiallash qoidasi quyidagicha bo'ladi:

$$\frac{d f(g(t))}{d t} = d f(g(t)) \cdot \frac{d g(t)}{d t} = D f(g(t)) : \dot{g}(t)$$



1.6-rasm. Dastlabki konfiguratsiyani joriy konfiguratsiyaga akslantirish

Ushbu ifodalarni birlashtirib, biz quyidagini olamiz:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \det \mathbf{F}}{\partial t} &= D(\det \mathbf{F}) : \dot{\mathbf{F}} = \det \mathbf{F} \dot{\mathbf{F}}^T : \mathbf{F}^{-1} \\ &= \det \mathbf{F} \operatorname{tr} \mathbf{L}_m = \det \mathbf{F} \operatorname{div} \mathbf{v}\end{aligned}$$

(chunki $\dot{\mathbf{F}}^T : \mathbf{F}^{-1} = \operatorname{tr} \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} = \operatorname{tr} \mathbf{L}_m$ bu yerda $\operatorname{tr} \mathbf{L} = \operatorname{tr} \operatorname{grad} \mathbf{v} = \operatorname{div} \mathbf{v}$).

Yig'ish natijasida:

$$\frac{\partial \det \mathbf{F}}{\partial t} = \det \mathbf{F} \operatorname{div} \mathbf{v} \quad (1.25)$$

(1.25) ni olishning boshqa bir konstruksiyaviy usuli mavjud bo'lib, bu $\mathbf{F}$ ning determinant va kofaktorlarining ta'riflaridan foydalanishni o'z ichiga oladi (1.2-bo'limdagi 4-mashqqa qarang).

1.5. Piola almashtirishi

Vaziyat quyidagicha: Jismning dastlabki konfiguratsiyasidagi $G_0 \subset \dot{U}_0$ ichki sohasi, ∂G_0 chegarasi va sirt elementiga normal bo'lgan birlik tashqi vektor $\mathbf{n}_0$ bilan birga, φ akslantirish orqali joriy konfiguratsiyadagi $G = \varphi(G_0) \subset \dot{U}_t$ ichki sohasiga o'tadi, bu yerda ∂G chegarasi va deformatsiyalangan yuzaning elementiga normal bo'lgan tashqi birlik vektor $\mathbf{n}$ bilan ifodalanadi. Shu bilan birga, dA_0 – dastlabki konfiguratsiyadagi G_0 yuzasining elementidir va φ orqali bu deformatsiyaga uchragan dA yuzasiga o'tadi (1.6-rasmga qarang).

$\mathbf{T} = \mathbf{T}(\mathbf{x}) = \mathbf{T}(\varphi(\mathbf{X}))$, G yuzasida berilgan tenzor maydoni bo'lsin va $\mathbf{T}(\mathbf{x})\mathbf{n}(\mathbf{x})$ ∂G chegara bo'yicha $\mathbf{T}$ oqimi va $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ ∂G ga o'tkazilgan birlik normal vektor bo'lsin. Bu yerda $\dot{U}_t$ fiksirlangan bo'lgani uchun t o'zgarmas va ko'rsatilmaydi. $\mathbf{T}$ ga mos ravishda G_0 yuzasida $\mathbf{T}_0 = \mathbf{T}_0(\mathbf{x})$ tenzor maydoni mavjud bo'lib, u ∂G_0 chegaradagi orqali $\mathbf{T}_0(\mathbf{X})\mathbf{n}_0(\mathbf{X})$ oqim bilan bog'langan, bu yerda $\mathbf{n}_0(\mathbf{X})$ ∂G_0 ga o'tkazilgan birlik normal vektor. Biz ∂G_0 va ∂G sirtlari orqali o'zaro teng oqimlar hosil bo'lish shartidan, $\mathbf{T}_0(\mathbf{x})$ va $\mathbf{T}(\mathbf{x})$ o'rtasida quyidagi munosabatni qidirib topishimiz mumkin, shunday qilib:

$$\int_{\partial G_0} \mathbf{T}_0(\mathbf{X})\mathbf{n}_0(\mathbf{X}) dA_0 = \int_{\partial G} \mathbf{T}(\mathbf{x})\mathbf{n}(\mathbf{x}) dA \quad (1.26)$$

bu yerda $\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{X})$ bo'ladi. $\mathbf{T}_0$ va $\mathbf{T}$ o'rtasidagi ushbu munosabat Piola almashtirishi deb ataladi.

1.1-tasdiq (Piola almashtirishi). Agar quyidagi o'rinli bo'lsa

$$T_0(X) = \det F(X) T(x) F(X)^{-T} = T(x) \text{Cof } F(X) \quad (1.27)$$

yuqoridagi munosabat o'rinli bo'ladi,

Isbot. (Bu natija Ciarletning ishlariga asoslanadi [2]). Biz Green formula-sidan foydalanamiz:

$$\int_{G_0} \text{Div } T_0 \, dX = \int_{\partial G_0} T_0 n_0 \, dA_0$$

va

$$\int_G \text{div } T \, dx = \int_{\partial G} T n \, dA$$

bu yerda

$$\text{Div } T_0 = \nabla \cdot T_0 = \frac{\partial (T_0)_i}{\partial X_j} e_i,$$

$$\text{div } T = \frac{\partial T_i}{\partial x_j} e_i,$$

$$dx = dx_1 dx_2 dx_3 = \det F \, dX = \det F \, dX_1 dX_2 dX_3,$$

Shuningdek, bizga quyidagi fakt kerak bo'ladi:

$$\frac{\partial}{\partial X_j} (\text{Cof } \nabla \varphi)_i = 0$$

Buni ko'rsatish uchun, avval quyidagi tenglikni bevosita hisoblash orqali tekshiramiz:

$$(\text{Cof } F)_i = (\text{Cof } \nabla \varphi)_i = \left(\frac{\partial}{\partial X_{j+1}} \varphi_{i+1} \right) \left(\frac{\partial}{\partial X_{j+2}} \varphi_{i+2} \right) - \left(\frac{\partial}{\partial X_{j+2}} \varphi_{i+1} \right) \left(\frac{\partial}{\partial X_{j+1}} \varphi_{i+2} \right)$$

bu yerda yig'ish ishlatilmagan. Shundan so'ng to'g'ridan to'g'ri hisoblash shuni ko'rsatadi:

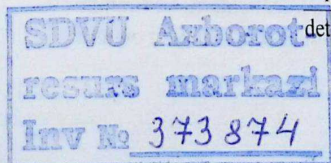
$$\frac{\partial}{\partial X_j} (\text{Cof } F)_i = 0$$

Endi, quyidagi ifodani yozib olamiz:

$$T_0(X) = T(x) \text{Cof } F(X)$$

Quyidagini e'tiborga olgan holda

$$\frac{1}{\det F} (\text{Cof } F)^T = F^{-1}$$



va

$$\frac{\partial x_i}{\partial X_m} \cdot \frac{\partial X_m}{\partial x_j} = \frac{\partial x_i}{\partial x_j} = \delta_j$$

topamiz:

$$(\text{Cof } F)_j = \det F (F^{-1})_j = \det F \frac{\partial X_j}{\partial x_i}$$

Shunday qilib,

$$\begin{aligned} \text{Div } T_0 &= \frac{\partial}{\partial X_k} (T_{0k})_j = \frac{\partial}{\partial X_j} (T_{0j})_j \\ &= \frac{\partial}{\partial X_j} (T(x) \text{Cof } F(X))_j e_j \\ &= \frac{\partial T_m(x)}{\partial x_r} \cdot \frac{\partial x_r}{\partial X_j} \cdot \text{Cof } F(X)_m e_j \\ &\quad + T_m \frac{\partial}{\partial X_j} \text{Cof } F(X)_m e_j \\ &= \frac{\partial T_m}{\partial x_r} \cdot \frac{\partial x_r}{\partial X_j} \det F \frac{\partial X_j}{\partial x_m} e_j \\ &= \frac{\partial T_r}{\partial x_r} e_r \det F \\ &= \text{div } T \det F, \end{aligned}$$

Oxirgi tenglik shuni ko'rsatadi:

$$\text{Div } T_0 = \det F \text{div } T \quad (1.28)$$

Shunday qilib, yuqorida ko'rsatilganidek:

$$\begin{aligned} \int_{G_0} \text{Div } T_0 dX &= \int_{G_0} \det F \text{div } T dX = \int_{G_0} T_0 n_0 dA_0 \\ \int_{G_0} T_0 n_0 dA_0 &= \int_{G_0} \text{div } T \det F dX = \int_G \text{div } T dx = \int_G T n dA \end{aligned}$$

Xulosa va kuzatishlar. Piola transformatsiyasi joriy konfiguratsiyada dastlabki konfiguratsiyadagi yuzaning tasvirlanishi nuqtayi nazaridan material yuzasi orqali maydon oqimini tavsiflash vositasini taqdim etadi. Shuningdek, u dastlabki va joriy konfiguratsiyalarda differensial yuzalar orasidagi asosiy munosabatlarni taqdim etadi. Biz bu yerda bir nechta xulosalarni va kuzatishlarni keltiramiz:

G_0 ixtiyoriy (ramziy ravishda) bo'lganligi uchun, biz quyidagini olamiz:

$$\mathbf{T}_0 \mathbf{n}_0 dA_0 = \mathbf{T} \mathbf{n} dA \quad (1.29)$$

$\mathbf{T} = \mathbf{I}$ ayniyat o‘rinli bo‘lsa, u holda:

$$\det \mathbf{F} \mathbf{F}^{-T} n_0 dA_0 = n dA \quad (1.30)$$

Shuningdek, $n = \frac{dA_0}{dA} \cdot (\det \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-T} n_0$ va $\|\mathbf{n}\| = 1$ bo‘lsa, quyidagiga ega bo‘lamiz:

$$dA = \det \mathbf{F} \|\mathbf{F}^{-T} n_0\| dA_0 \quad (\text{Nanson formulasi}) \quad (1.31)$$

bu yerda $\|\cdot\|$ bilan norma belgilangan. Shunday qilib:

$$n = \frac{\text{Cof } \mathbf{F} n_0}{\|\text{Cof } \mathbf{F} n_0\|} \quad (1.32)$$

1.6. Qutbiy dekompozitsiya teoremasi

Teorema 1.A (Qutbiy dekompozitsiya) *Teskarisi mavjud bo‘lgan haqiqiy matritsa $\mathbf{F}$ yagona ravishda quyidagicha ko‘paytma ko‘rinishida ifodalanishi mumkin:*

$$\mathbf{F} = \mathbf{R} \mathbf{U} = \mathbf{V} \mathbf{R} \quad (1.33)$$

bu yerda $\mathbf{R}$ ortogonal matritsa va $\mathbf{U}$ hamda $\mathbf{V}$ simmetrik musbat aniqlangan matritsalar.

Isbot. (Quyidagi lemmadan foydalanamiz: Har qanday simmetrik musbat aniqlangan $\mathbf{A}$ matritsasi uchun shunday yagona simmetrik musbat aniqlangan $\mathbf{B}$ matritsasi mavjudki, $\mathbf{B}^2 = \mathbf{A}$ bo‘ladi.) Keling, birinchi bo‘lib matritsalar $\mathbf{U}$ va $\mathbf{V}$ ning mavjudligini ko‘rsataylik. Yuqoridagi lemma asosida $\mathbf{U}$ ni quyidagicha yozib olamiz:

$$\mathbf{U}^2 = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \mathbf{C}$$

va quyidagi ifodani qaraymiz:

$$\mathbf{R} = \mathbf{F} \mathbf{U}^{-1}$$

u holda

$$\mathbf{R}^T \mathbf{R} = \mathbf{U}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{F} \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^{-1} \mathbf{U} \mathbf{U} \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{I}$$

Bu yerda $\mathbf{R}$ aylanishni ifodalaydi. Shunday qilib, biz $\mathbf{U}$ ning mavjudligini va $\mathbf{F} = \mathbf{R} \mathbf{U}$ ekanligini ko‘rsatdik.

Keyingi, $\mathbf{V}$ ni quyidagicha aniqlaymiz:

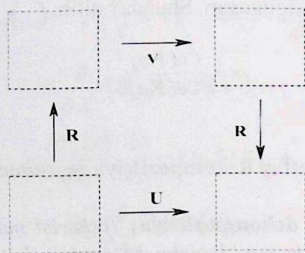
$$\mathbf{V} = \mathbf{R} \mathbf{U} \mathbf{R}^T$$

Shundan keyin:

$$VR = RUR^T R = RU = F$$

buni yuqorida ko'rsatilganidek topishimiz mumkin.

U va V larning yagona ekanligini ko'rsatish uchun $F = RU$ deb olamiz, R esa aylanish matritsasi bo'lsin. Shunday qilib, $F^T F = U^T R^T R U = U^2$, bu U ning yuqoridagi lemma asosida yagonaligini bildiradi. $R = F U^{-1}$ dan R ning yagonaligi kelib chiqadi. Nihoyat, agar $F = VR$ bo'lsa, $F^T F = B = V^2$ bo'ladi, lemma asosida V yagonadir.



1.7-rasm. Qutb dekompozitsiya teoremasi: $F = RU = VR$

Xulosa qilib aytganda, agar $C = F^T F$ va $B = F F^T$ bo'lsa, ular mos ravishda o'ng va chap Cauchy–Green deformatsiya tenzorlari hisoblanadi va

$$F = RU \quad ? \quad RU = VR,$$

u holda,

$$C = U^T R^T R U = U^T U = U^2,$$

$$B = V R R^T V = V^T V = V^2, \quad (1.34)$$

bu yerda U va V mos ravishda o'ng va chap cho'zilish tenzorlari hisoblanadi.

Ko'rinib turibdiki, qutbiy dekompozitsiya teoremasi deformatsiya gradiyenti F distorsiya tufayli yuzaga cho'zilish va aylanish orqali hosil bo'lishi (yoki ko'rinishi) mumkinligini tasdiqlaydi (1.7-rasmga qarang).

1.7. Deformatsiyaning bosh yo'nalishlari va invariantlari

Berilgan deformatsiya tenzori $C(X)$ va $E(X)$ (X nuqtada), $dX^T C dX = 2dX^T E dX - dX^T dX$ joriy konfiguratsiyadagi o'lchamli chiziq segmentining (ds^2) kvadratini beradi. Material chizig'i $dX = m dS_0$ orqali dastlabki konfiguratsiyada o'rnatilgan birlik vektor m yo'nalishida yo'naltirilgan. Shunday qilib, cho'zilish yoki siqilishning o'lchami m orqali aniqlanadi:

$$\Delta(m) = dS^2 / dS_0^2 = m^T C m,$$

$$m \cdot m = m^T m = 1. \quad (1.35)$$

Kimdir so'rashi mumkin: X ning barcha mumkin bo'lgan yo'nalishlaridan m uchun, $\Delta(m)$ ning eng katta (yoki eng kichik) qiymati qaysi yo'nalishda bo'ladi?

Bu cheklangan maksimal va minimal muammo: $m = m_{\max}$ (yoki $m_{\min}$) ni aniqlang, shunda $\Delta(m)$ maksimal (yoki minimal) bo'ladi va $m^T m = 1$ chekloviga amal qilishi kerak. Ushbu muammoni hal qilish uchun Lagrang ko'paytuvchilari usulidan foydalanamiz. $L(m, \lambda) = \Delta(m) - \lambda(m^T m - 1)$ ni quyidagicha belgilaymiz: bu yerda λ Lagrang ko'paytuvchilari maksimal yoki minimal nuqtalarda, L ni qanoatlantiradi:

$$\frac{\partial L(m, \lambda)}{\partial m} = 0 = 2(Cm - \lambda m)$$

Shunday qilib, maksimal yoki minimal qiymatlarni olish uchun vektorlar $\Delta(m)$ lar λ ko'paytuvchilari bilan bog'langan va quyidagi tenglamani qanoatlantiradi:

$$Cm = \lambda m, \quad m^T m = 1. \quad (1.36)$$

Ya'ni, (m, λ) deformatsiya tenzori C ning bosh vektorlari va bosh qiymatlari juftligi bo'lib, m normallashtirilgan ($\|m\|$ yoki $m^T m = 1$).

Quyidagi xossalar yuqoridagi bosh qiymatlar teoremasidan keltirib chiqarilishi mumkin:

1. $C(X)$ ning uchta haqiqiy bosh qiymatlar va uchta bosh vektorlari mavjud bo'ladi. Biz $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3$ tartibini qabul qilamiz.

2. Agar $\lambda_i \neq \lambda_j$ bo'lsa, tegishli bosh vektorlar bir-biriga ortogonaldir $m_i^T m_j = \delta_{ij}$. Shuning uchun, (m_i, λ_i) va (m_j, λ_j) tengliklarini quyidagicha ko'rish mumkin:

$$m_i^T (\lambda_j m_j) = m_i^T C m_j = m_j^T C m_i = m_j^T (\lambda_i m_i)$$

Ushbu xususiyatlar C ning bosh qiymatlari va bosh vektorlarining xossalarini to'liq tavsiflaydi.

Shunday qilib:

$$(\lambda_i - \lambda_j) m_i^T m_j = 0$$

ya'ni

$$\lambda_i \neq \lambda_j, \quad m_i^T m_j = \delta_{ij}, \quad 1 \leq i, j \leq 3$$

(agar $\vec{e}_i = \vec{e}_j$ bo'lsa, har doim m_i ni m_j ga ortogonal bo'lishi uchun tuzishimiz mumkin).

3. Tenglama (1.36) quyidagicha yozilishi mumkin:

$$(C - \lambda I)m = 0 \quad (1.37)$$

Ushbu tenglama $C - \lambda I$ determinant Nolldan farqli bo'lmasa, trivial bo'lmagan yechimlarga ega bo'lishi mumkin. Bu aynan C ning xarakteristik polinomidir:

$$\det(C - \lambda I) = -\lambda^3 + I(C)\lambda^2 - I(C)\lambda + III(C), \quad (1.38)$$

bu yerda $I, II, III - C$ ning asosiy invariantlaridir:

$$I(C) = \text{trace } C \equiv \text{tr } C = C_{11} + C_{22} + C_{33}$$

$$I(C) = \frac{1}{2}(\text{tr } C)^2 - \frac{1}{2}\text{tr } C^2 = \text{tr Cof } C \quad (1.39)$$

$$III(C) = \det C = \frac{1}{6}((\text{tr } C)^3 - 3\text{tr } C \text{tr } C^2 + 2\text{tr } C^3)$$

(Haqiqiy matritsaning invarianti C ning real qiymatli funksiyasidir, $\mu(C)$ A uchun $\mu(C) = \mu(A^{-1}CA)$ har qanday teskari matritsa.)

4. Bosh vektorlarining barchasi musbat bo'lganligi sababli λ_i o'rniga λ_i^2 bilan yozish odat tusiga kiradi. Keyin $\mu(C) = \mu(A^{-1}CA)$ bo'ladi. N bosh vektorlarni qator sifatida o'z ichiga oladigan matritsa bo'lsin.

Shunday qilib:

$$N^T C N = \begin{bmatrix} \lambda_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^2 \end{bmatrix} = \text{diag}\{\lambda_i^2, i = 1, 2, 3\} \quad (1.40)$$

O'zaro ortogonal bosh vektorlarning to'plami orqali aniqlangan koordinata tizimi X dagi C ning asosiy yo'nalishlarini va qiymatlarini beradi. Ushbu bazis tanlovi uchun biz quyidagini olamiz:

$$C = \sum_{i=1}^3 \lambda_i^2 m_i \otimes m_i \quad (1.41)$$

Agar $\lambda_1^2 \geq \lambda_2^2 \geq \lambda_3^2$ bo'lsa, λ_1^2 maksimal qiymatga, λ_3^2 minimal qiymatga va λ_2^2 «minimal-maksimal» C yoki $\Delta(n)$ ga to'g'ri keladi.

Misol uchun, aytaylik, m_1 shundayki, $(m_1^T C m_1)^{1/2} = \lambda_1$ va boshqalar.

Shuningdek,

$$C = U^2 = \begin{bmatrix} \lambda_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^2 \end{bmatrix} \quad (1.42)$$

Asosiy invariantlar shunday bo'ladi:

$$\begin{aligned} I(C) &= \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2, \\ I(C) &= \lambda_1^2 \lambda_2^2 + \lambda_1^2 \lambda_3^2 + \lambda_2^2 \lambda_3^2, \\ III(C) &= \lambda_1^2 \lambda_2^2 \lambda_3^2. \end{aligned} \quad (1.43)$$

1.8. Reynoldsning transport teoremasi

Biz ko'pincha maydon, zichlik yoki konsentratsiya o'lchovining umumiy vaqt bo'yicha o'zgarishini baholash zaruriyati bilan duch kelamiz, bu $\omega \subset \Omega_t$ hajmida aniqlangan. Masalan, agar $\Psi = \Psi(x, t)$ fazoviy maydon bo'lsa, u skalyar yoki vektor qiymatli bo'lishi mumkin. Biz $d(\int \Psi dx) / dt$ ni hisoblashimiz kerak bo'lsa, quyidagi integrallash o'zgaruvchilari o'zgarishi bunday hisoblashni osonlashtiradi. ω_0 ni Ω_0 dastlabki konfiguratsiyadagi material tomonidan egallangan qism deb qabul qilamiz.

Dastlabki konfiguratsiyada, ω ni Ω_0 ichida egallab olganda, shunday bo'ladi:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\omega} \Psi dx &= \frac{d}{dt} \int_{\omega_0} \Psi_m \det F dX \\ &= \int_{\omega_0} \frac{d}{dt} (\Psi_m \det F) dX = \int_{\omega_0} \left(\frac{\partial \Psi_m}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \text{grad } \Psi_m \right) \det F dX \\ &\quad + \int_{\omega_0} \Psi_m \overline{\det F} \det F dX = \int_{\omega} \frac{\partial \Psi_m}{\partial t} dx + \int_{\omega} \text{div} (\Psi \mathbf{v}) dx. \end{aligned}$$

Shunday qilib,

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \Psi dx = \int_{\omega} \frac{\partial \Psi_m}{\partial t} dx + \int_{\partial \omega} \Psi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA \quad (1.44)$$

Ushbu oxirgi natija Reynolds transport teoremasi deb nomlanadi.

2-BOB. MASSA VA IMPULS

Massaning lug'atdagi umumiy ta'rif quyidagicha:

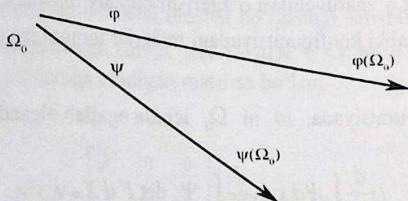
Massa – jismning modda miqdorini o'lchash vositasi bo'lib, uning tarkibidagi modda miqdorini ko'rsatadi va gravitatsiya maydonida vaznga ega bo'lishiga sabab bo'ladi.

Kontinuum mexanikasida jismning massasi uning hajmi bo'ylab uzluksiz taqsimlanadi va $\rho: \bar{\Omega}_0 \rightarrow \mathbb{R}^+$ deb ataladigan zichlik maydonining integrali orqali aniqlanadi, bu zichlik maydoni massaviy zichlik deb ataladi. Jismning umumiy massasi $M(B)$ harakat φ ga bog'liq emas, lekin massaviy zichlik $\tilde{n}$, albatta, harakat davomida jismning hajmi o'zgarishiga qarab o'zgarishi mumkin. Simvolik ravishda:

$$M(B) = \int_{\Omega_t} \rho \, dx \quad (2.1)$$

bu yerda $dx = -$ jismning joriy konfiguratsiyasi Ω_t dagi hajm elementi.

Ikkita φ va ψ harakat berilgan (2.1-rasmga qarang), ρ_φ va ρ_ψ mos ravishda $\varphi(\Omega_0)$ va $\psi(\Omega_0)$ konfiguratsiyalardagi massa zichligini bildirsin.



2.1-rasm. Ikkita harakat φ va ψ

Jami massa harakatdan mustaqil bo'lgani uchun,

$$M(B) = \int_{\varphi(\Omega_0)} \rho_\varphi \, dx = \int_{\psi(\Omega_0)} \rho_\psi \, dx \quad (2.2)$$

Bu fakt massani saqlanish qonunini ifodalaydi. Jismning B massasi shuning uchun invariant xususiyat bo'lib, B jismdagi modda miqdorini o'lchash bilan aniqlanadi; B jismning vazni $gM(B)$ ko'rinishida, bu yerda g – gravitatsiya maydonining doimiy qiymati. Shunday qilib, tananing vazni turli gravitatsiya maydonlarida (masalan, Yerdagi gravitatsiya bilan Oydagi gravitatsiyani solishtirganda) turlicha bo'lishi mumkin, lekin uning massasi bir xil bo'lib qoladi.

2.1. Massaning saqlanish prinsipining mahalliy shakllari

$\rho_0 = \rho_0(\mathbf{X})$ jismning mos ravishda dastlabki konfiguratsiyasidagi massa zichligi va $\rho = \rho(x, t)$ joriy konfiguratsiyadagi Ω_t massasi zichligi bo'lsin.

$$\int_{\Omega_0} \rho_0(\mathbf{X}) d\mathbf{X} = \int_{\Omega_t} \rho(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

(Bu holatda, materialning ρ zichligi t harakatidan mustaqilligini e'tiborga olish mumkin). Bunday holatda, $\mathbf{F}(\mathbf{X})$ matritsasining determinantini, $d\mathbf{x} = \det \mathbf{F}(\mathbf{X}) d\mathbf{X}$ ni hisobga olamiz, shunday qilib:

$$\int_{\Omega_0} [\rho_0(\mathbf{X}) - \rho(\varphi(\mathbf{X})) \det \mathbf{F}(\mathbf{X})] d\mathbf{X} = 0,$$

va shuning uchun

$$\rho_0(\mathbf{X}) = \rho(\mathbf{x}) \det \mathbf{F}(\mathbf{X}) \quad (2.3)$$

Bu massa saqlanishining material tavsifi (yoki Lagrang ifodasi). Keyin, umumiy massa hajmi o'zgarmasligini hisobga olgan holda, massaning umumiy saqlanishini fazoviy tavsif (yoki Euler bo'yicha)da yozish mumkin:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \rho(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = 0$$

Material koordinatalarni o'zgartirishni o'ylab ko'raylik, natijada:

$$0 = \frac{d}{dt} \int_{\Omega_0} \rho(\mathbf{x}, t) \det \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) d\mathbf{X} = \int_{\Omega_0} (\rho \overline{\det \mathbf{F}} + \dot{\rho} \det \mathbf{F}) d\mathbf{X}$$

bu yerda $\dot{(\cdot)} = d(\cdot) / dt$. $\overline{\det \mathbf{F}} = \det \mathbf{F} \operatorname{div} \mathbf{\bar{\theta}}$ determinantini hisobga olsak:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Omega_0} \det \mathbf{F} \left(\rho \operatorname{div} \mathbf{\bar{\theta}} + \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} \rho \right) d\mathbf{X} \\ &= \int_{\Omega_0} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) \right) \det \mathbf{F} d\mathbf{X} \\ &= \int_{\Omega_t} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) \right) d\mathbf{x}, \end{aligned}$$

shundan quyidagi xulosa chiqarish mumkin:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.4)$$

2.2. Moment-harakat miqdori

Material jismning harakat miqdori uning massasi va tezligi tufayli hosil bo'lgan xususiyatdir. Jism B ning harakati φ va massasi zichligi ρ bo'lgan holda, jism B ning t vaqtdagi chiziqli momenti $I(B, t)$ va jismning burchak impulsi $H(B, t)$, fazoviy koordinatalar sistemasining O nuqtasidagi boshlang'ich nuqtasi atrofida quyidagicha aniqlanadi:

$$\begin{aligned} I(B, t) &= \int_{\Omega_t} \rho v dx, \\ H(B, t) &= \int_{\Omega_t} x \times \rho v dx \end{aligned} \quad (2.5)$$

Bu yerda $dx (= dx_1, dx_2, dx_3)$ – bu Ω_t ichidagi hajm elementi hisoblanadi.

Harakat miqdorining o'zgarish tezligi (ya'ni I va H uchun) muhim ahamiyatga ega. O'zgarish tezliklarini hisoblash uchun, avvalo har qanday silliq maydon $w = w(x, t)$ uchun quyidagi natijaga e'tibor bering:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} w \rho dx &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega_0} w(\varphi(X, t), t) \rho(x, t) \det F(X, t) dX \\ &= \int_{\Omega_0} \frac{dw}{dt} \rho_0 dX = \int_{\Omega_t} \frac{dw}{dt} \rho dx \end{aligned} \quad (2.6)$$

Shunday qilib:

$$\frac{dI(B, t)}{dt} = \int_{\Omega_t} \rho \frac{dv}{dt} dx, \quad (2.7)$$

$$\frac{dH(B, t)}{dt} = \int_{\Omega_t} x \times \rho \frac{dv}{dt} dx$$

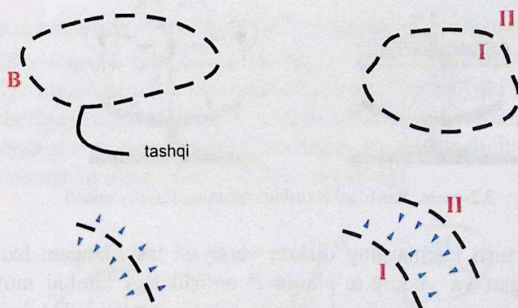
3-BOB. DEFORMATSIYALANUVCHAN JISMLARDA KUCH VA KUCHLANISH

Kuch tushunchasi material jismning harakati bilan uning atrof-muhit o'rtasidagi o'zaro ta'sirni tavsiflash uchun ishlatiladi. Umumiyroq qilib aytganda, kuch jismning impulsidagi o'zgarishni keltirib chiqaradigan agentlar bilan jismning o'zaro ta'sirlarini tavsiflashdir. An'anaviy mexanikada asosan ikkita kuch turi mavjud: (1) aloqa kuchlari, ya'ni jismning chegaraviy yuzalarining tashqi muhit bilan aloqa qilishini ifodalaydi yoki jismning ichki qismlarining aloqa qilishini ifodalaydi. Jismning sirtlari (2) jismga uning atrof-muhiti tomonidan ta'sir qiluvchi jismga tegishli kuchlar.

Hajmiy kuchlar.

Jism kuchlariga misollar tortishish kuchi yoki tashqi magnit maydon ta'sirida bir birlik hajmga ta'sir qiluvchi kuchlar. Jism kuchlari tashqi kuchlar turiga kiradi, odatda vektor qiymatli maydon f bilan ifodalanadi, u birlik hajmga jismga ta'sir qiluvchi kuch zichligi deb ataladi. Umumiy jism kuchi quyidagicha ifodalanadi:

$$\int_{\Omega_i} f(x, t) dx$$



3.1-rasm. Tashqi kontakt kuchlar (chapda pastda) va ichki kontakt kuchlar (o'ngda pastda)

Yoki biz jismga ta'sir qiluvchi kuchni birlik massa uchun zichlik b bilan o'lchashimiz mumkin: $f = \rho b$. Keyin:

$$\int_{\Omega_i} f dx = \int_{\Omega_i} \rho b dx \quad (3.1)$$

Sirt kuchlari

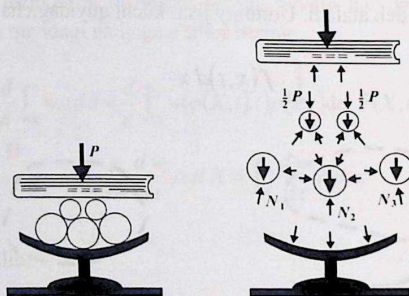
Jism ikkinchisi bilan yoki uning atrof-muhiti bilan bog'lanish material yuzasi bo'ylab bo'lishi kerak. Bog'lanish kuchlari ikkita toifaga bo'linadi (3.1-rasmga qarang):

– Tashqi bog'lanish kuchlari jismning tashqi yuzasining atrof-muhit bilan aloqa qilishini ifodalaydi va ichki bog'lanish kuchlari jismning o'zaro chegaraviy yuzalarida bir-biriga ta'sir qiluvchi qismlarining aloqa qilishini ifodalaydi.

Kuchlanish tushunchasi

Kuchlanishning strukturasi. Tashqi yoki ichki bog'lanish kuchlarining o'zaro ta'sirini ifodalashda hech qanday farq yo'q; ular faqat qanday ta'sir qilishi bilan farqlanadi.

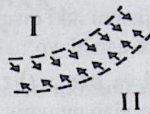
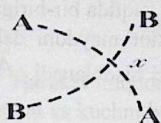
Bu jismni atrof-muhitdan ajratadigan chegara sifatida talqin etiladi. 3.1-rasmdagi bo'lingan jismning I qismi B jism sifatida belgilanishi mumkin va II qismi esa tashqi muhitning bir qismi bo'ladi.



3.2-rasm. Kuchlanish tushunchasining tasviriy misoli

3.2-rasmda turli kuchlarning diskret versiyasi tasvirlangan: har biri qattiq idishda joylashgan va yuqori to'plarda P og'irlikdagi kitobni muvozanatlash orqali pastga itarilayotgan qattiq sharsimon to'plar to'plami. To'plar to'plamini, ko'rsatilgandek, erkin jismlarga bo'ling. Beshta to'p B jismni tashkil etadi. Tashqi muhit bilan tashqi bog'lanish kuchi $1/2 P$ bilan ifodalanadi va to'plarining idishga va idishning to'plarga teng va qarama-qarshi bosim kuchlarini ifodalovchi N aloqa kuchlari bilan tasvirlangan. Keyin $\frac{1}{2}P(2x), N_1, N_2$ va N_3 tashqi aloqa kuchlari

hisoblanadi. W og'irliklar jismning kuchlari hisoblanadi. Ichki qismda to'plar har bir to'pning tashqi yuzasida bir-biriga tegadi. Bitta to'pning boshqa to'pga ta'siri boshqalarning bu to'pga ta'siriga teng va qarama-qarshidir. Ushbu aloqa kuchlari ichki hisoblanadi. To'plar butun B tanasiga yig'ilganda ular bir-birini muvozanatlashtiradi.



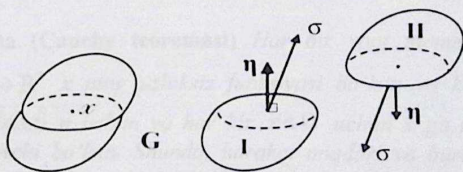
3.3-rasm. Cauchy farazi

Uzluksiz jism holatida, xuddi shu g'oya qo'llaniladi, faqat jismning bir qismi (I qism deb atayman) qo'shimcha (II qism) bilan aloqa qilishda uzluksizdir (hozirda aloqa yuzasida material zarralarining uzluksizligi mavjud) va bu aloqa kuchlarining tabiati jismning qanday bo'linishiga bog'liq. Shunday qilib, agar biz B ni (nazariy jihatdan) I va II qismlarga ajratsak va AA sirtini n birlik vektor bilan berilgan yo'nalish bilan belgilasak, x nuqtasida sirt bo'ylab aloqa kuchlarining taqsimoti, jismning boshqa bir sirt BB bilan aniqlangan boshqa bo'linishidan hosil bo'lganidan ancha farq qiladi (3.3-rasmga qarang).

Bu turli xil imkoniyatlar shunday deb ataladigan Cauchyning farazi bilan ifodalanadi: vektor qiymatli yuza (aloqa) kuch zichligi

$$\sigma(n, x, t)$$

mavjud bo'lib, x nuqtasidan o'tuvchi n birlik normal bilan t vaqtda yo'naltirilgan sirt $\tilde{A}$ da birlik yuzaga bo'lgan kuchni ifodalaydi. Qoidaga ko'ra, $\sigma(n, x, t)$ materialning «manfiy» tomonidagi (ya'ni n tashqariga qarab turgan yoki tashqi normal) birlik yuzaga bo'lgan kuchni ifodalaydi, u materialning qarshi tomonidagiga (shuningdek, II jismdagi σ ning yo'nalishi I jismdagiga qarshi ekanligini) ta'sir qiladi, chunki tashqi normallar qarshisidir (3.4-rasmga qarang).



3.4-rasm. Kuchlanish vektori σ

Shunday qilib, agar $\sigma(n, x, t)$ vektor maydoni ma'lum bo'lsa, t vaqtda jismning ixtiyoriy nuqtasida (yoki ekvivalent ravishda, hozirgi konfiguratsiyadagi Q da) bir nuqtani tanlab, x orqali sirtni o'tkazish mumkin, bu sirt n birlik normal bilan berilgan yo'nalishga ega bo'ladi. $\sigma(n, x, t)$ vektori bu nuqtada t vaqtda ushbu sirt bo'ylab bir birlik yuzaga ta'sir ko'rsatadigan kuchni ifodalaydi. x orqali

sirt Γ jismni ikki qismga ajratadi: $\sigma(\mathbf{n}, \mathbf{x}, t)$ vektori bu nuqtada t vaqtida bir-biriga qarama-qarshi yo'nalishda bo'ladi. σ maydoni charchoq vektor maydoni deb ataladi va $\sigma(\mathbf{n}, \mathbf{x}, t)$ t va $\mathbf{x}$ da yo'nalish uchun charchoq vektori hisoblanadi. $\tilde{A}$ sirti bo'ylab umumiy kuch quyidagicha aniqlanadi:

$$\int_{\Gamma} \sigma(\mathbf{n}, \mathbf{x}, t) dA$$

dA – sirt maydoni elementi.

B jismga ta'sir qilayotgan umumiy kuch va O boshlang'ich nuqtaga nisbatan aylanish momenti, vaqt t da jism hozirgi Ω konfiguratsiyasida joylashganda, mos ravishda quyidagicha bo'ladi:

$$F(B, t) = \int_{\Omega} \mathbf{f} d\mathbf{x} + \int_{\Gamma\Omega} \sigma(\mathbf{n}) dA, \quad (3.2)$$

$$M(B, t) = \int_{\Omega} \mathbf{x} \times \mathbf{f} d\mathbf{x} + \int_{\Gamma\Omega} \mathbf{x} \times \sigma(\mathbf{n}) dA$$

Bu yerda biz $\mathbf{f}$ va σ ning $\mathbf{x}$ va t ga bog'liqligini e'tibordan qoldirdik.

4-BOB. HARAKAT MIQDORI VA BURCHAK IMPULSINING SAQLANISH QONUNI

Harakat miqdori va burchak impulsining saqlanish qonunlari mexanikaning harakat va kuchni bog'lovchi asosiy aksiomalaridir:

Harakat miqdorining saqlanish qonuni *Jismning* $I(B, t)$ *to'g'ri chiziqli impulsining o'zgarish tezligi vaqt* t *dagi jismning umumiy kuchi* $F(B, t)$ *ga teng (yoki muvozanatda) bo'ladi:*

$$\frac{dI(B, t)}{dt} = F(B, t) \quad (4.1)$$

Burchak impulsining saqlanish qonuni. *Jismning* $H(B, t)$ *burma impulsining o'zgarish tezligi vaqt* t *dagi jismning umumiy momenti* $M(B, t)$ *ga teng (yoki muvozanatda) bo'ladi:*

$$\frac{dH(B, t)}{dt} = M(B, t) \quad (4.2)$$

Shunday qilib, uzluksiz muhitda quyidagicha yoziladi:

$$\int_{\Omega} \rho \frac{dv}{dt} dx = \int_{\Omega} f dx + \int_{\Gamma_{\Omega}} \sigma(n) dA, \quad (4.3)$$

$$\int_{\Omega} x \times \rho \frac{dv}{dt} dx = \int_{\Omega} x \times f dx + \int_{\Gamma_{\Omega}} x \times \sigma(n) dA$$

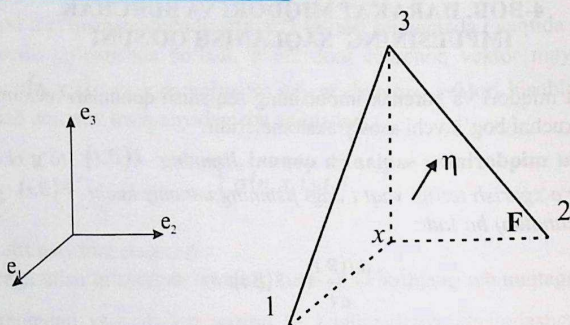
4.1. Cauchy teoremasi: Cauchy kuchlanish tenzori

4.A-teorema (Cauchy teoremasi) *Har bir vaqt momentida* t , *kuchlar zichligi* $f: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ *x ning uzluksiz funksiyasi bo'lsin va kuchlanish vektor maydoni* $\sigma = \sigma(n, x, t)$ *n uchun va har bir* $x \in \Omega$ *uchun* x *ga nisbatan uzluksiz differensiallanuvchi bo'lsin. Shunda, harakat miqdori va burchak impulsining saqlanish qonunlari shuni talab qiladiki, uzluksiz differensiallanadigan tenzor maydoni* $T: \overline{\Omega} \rightarrow M^3$ *(uchinchi tartibli kvadrat matritsalar to'plami) mavjud bo'lib, quyidagilar bajariladi:*

$$\sigma(n, x, t) = T(x, t)n, \quad \forall x \in \overline{\Omega}, \forall n \quad (4.4)$$

va

$$T(x, t) = T(x, t)^T, \quad \forall x \in \overline{\Omega}. \quad (4.5)$$



4.1-rasm. Cauchy teoremasini isbotlash uchun tetraedr $\hat{\sigma}$

Isbot. Klassik isbot. $x \in \Omega$ ni tanlaymiz. Ω ochiq bo'lganligi sababli, uchlari x bo'lgan va uchta yuzi x_i -koordinata tekisliklariga parallel bo'lgan tetraedr τ ni yasashimiz mumkin. Shuningdek, tashqi yuz F uchun birlik normal $n = n_i e_i$, $n_i > 0$ mavjud (4.1-rasmga qarang). Tetraedr τ ning 1, 2, 3 uchlari qarama-qarshi bo'lgan qirralari F_i deb belgilanadi va yuza $(F_i) = n_i$ yuza (F_i) . Chiziqli impulsning balans prinsipiga ko'ra, biz quyidagini olamiz:

$$\int_{\tau} f dx + \int_{\partial\tau} \sigma(n) dA - \int_{\tau} \rho \frac{dv}{dt} dx = 0$$

Keling, $f = f_i \varepsilon_i$, $\sigma(v) = \sigma_i(v) \varepsilon_i$, $v = v_i \varepsilon_i$ deb belgilaymiz. Shunda, yuqoridagi tenglamadagi sirt integrallarining har bir komponenti uchun va o'rtacha qiymat teoremasidan foydalangan holda quyidagini olamiz:

$$\begin{aligned} \int_{\partial\tau} \sigma_i(n, x) dA &= \int_{F_i = F} \sigma_i(-e_j, x) dA + \int_F \sigma_i(n, x) dA \\ &= \sigma_i(-e_j, x_j^*) n_j \text{area}(F) + \sigma_i(n, \hat{x}) \text{area}(F), \end{aligned}$$

har bir $x_j^* \in F_j$ uchun va $\hat{x} \in F$ uchun. Shuning uchun

$$\int_{\partial\tau} \sigma_i(n, x) dA = \int_{\tau} \left(\rho \frac{dv_i(x)}{dt} - f_i(x) \right) dx, \quad i = 1, 2, 3$$

Shunday qilib, hajmi $(\tau) = C$ yuza $(F)^{3/2}$, bu yerda C – biror o'zgarmas va $i = 1, 2, 3$. Demak,

$$|n_j \sigma_i(-e_j, x_j^*) + \sigma_i(n, \hat{x})| \text{area}(F) \leq C \sup_{x \in \tau} \left| \rho(x) \frac{dv_i(x)}{dt} - f_i(x) \right| \text{area}(F)^{3/2}$$

n ni o'zgarmas holda ushlab turib, tetraedr τ ni uchlarini x nuqtaga yig'ib (ya'ni $(F) \rightarrow 0$), x ning uchiga qisqartiramiz va quyidagini hosil qilamiz:

$$\sigma_i(n, x) = -n_j \sigma_i(-e_j, x), \quad 1 \leq i, j \leq 3,$$

Yoki, $\sigma_i(n, x) = T_j(x) n_j$ dan quyidagini olamiz:

$$\sigma(n, x) = -n_j \sigma(-e_j, x) \quad (4.6)$$

Endi, har bir $\sigma(e_j, x)$ vektor uchun $T_j(x)$ funksiyalarini quyidagicha aniqlaymiz:

$$T_j(x) = -\sigma_i(-e_j, x)$$

Shunda $\sigma(e_j, x) = T_j(x) e_j$, yoki

$$\sigma_i(n, x) = T_j(x) n_j, \text{ yoki } \sigma(n, x) = T(x) n \quad (4.7)$$

ko'rsatilgandek (uzluksizlik tufayli, bu har bir $x \in \bar{\Omega}$ uchun to'g'ri keladi). T tenzori bu albatta Cauchy kuchlanish tenzori. Biz T -ning simmetrik ekanligini Burchak impulsining saqlanish qonuni orqali (mashq sifatida) keyinroq isbotlaymiz.

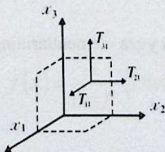
Cauchy kuchlanish tenzori kuchlanish vektorining komponentlarini ifodalash uchun qulay hisob-kitob sxemasini ta'minlaydi. $n = (1, 0, 0)$ deb olaylik. Shunda

$\sigma(n) = (T_{11}, T_{21}, T_{31}) = \sigma_i x_i$ - yo'nalishiga normal tekislikda ta'sir qiluvchi vektor bo'ladi va uning komponentlari T_{11} , 4.2-rasmda ko'rsatilganidek bo'ladi. Shunga o'xshash, T_{21} va T_{31} komponentlari mos ravishda x_2 va x_3 tekisliklariga normal kuchlanish vektorining komponentlari hisoblanadi.

4.2. Harakat tenglamalari (Chiziqli impuls)

Divergensiya teoremasiga ko'ra, quyidagi tenglamalarni yozib chiqish mumkin:

$$\int_{\Omega} T n dA = \int_{\Omega} \operatorname{div} T dx$$



4.2-rasm. Kuchlanish vektori $\sigma_1 = (T_{11}, T_{21}, T_{31})$ tasviri

Shunday qilib,

$$\int_{\partial\Omega_t} \sigma(n) dA = \int_{\partial\Omega_t} T n dA = \int_{\Omega_t} \operatorname{div} T dx$$

Bunda, chiziqli momentning muvozanat tamoyilidan foydalanib, quyidagi yozuv amalga oshirilishi mumkin:

$$\int_{\Omega_t} \rho \frac{dv}{dt} dx = \int_{\Omega_t} (f + \operatorname{div} T) dx$$

bu yerda T – Cauchy kuchlanish tenzori. Shunday qilib,

$$\int_{\Omega_t} \left(\operatorname{div} T + f - \rho \frac{dv}{dt} \right) dx = 0$$

Bu tenglik $G \subset \Omega_t$ istalgan ichki sohada ham to'g'ri bo'lishi kerak. Demak,

$$\operatorname{div} T + f = \rho \frac{dv}{dt}, \quad (4.8)$$

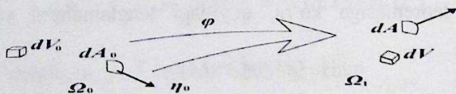
yoki

$$\operatorname{div} T(x, t) + f(x, t) = \rho(x, t) \frac{dv}{dt}(x, t)$$

Cauchyning teoremasining isbotiga o'tib, tetraedr uchun burchak momentning muvozanati tamoyilidan foydalanamiz va $\operatorname{div} T - f - \rho dv/dt = 0$ faktidan kelib chiqamiz. Bu

$$T^T = T$$

deb xulosaga olib keladi. Batafsil ma'lumotlar mashq sifatida qoldirilgan (1.4-bo'limga qarang).



4.3-rasm. Hajm va yuza elementlarining xaritalanishi

4.3. Boshlang'ich konfiguratsiyaga nisbatan harakat tenglamalari: Piola–Kirchhoffning kuchlanish tenzorlari

Joriy konfiguratsiyada bizda quyidagilar mavjud:

$$\operatorname{div} \mathbf{T}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t) \left(\frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \cdot \operatorname{grad} \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \right) \quad (4.9)$$

Bunda, div va $\operatorname{grad} \mathbf{x}$ ga nisbatan aniqlanadi; ya'ni, bog'liq o'zgaruvchilar fazoviy pozitsiyaning $\mathbf{x}$ va vaqt t funksiyalari sifatida ko'rib chiqiladi. Biz endi maydonlarni asosiy konfiguratsiyaga nisbatan ko'rib chiqamiz (4.3-rasmga qarang):

$$\begin{aligned} f_0(\mathbf{X}) &= f(\mathbf{x}) \det \mathbf{F}(\mathbf{X}) \quad (\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{X})), \\ \rho_0(\mathbf{X}) &= \rho(\mathbf{x}) \det \mathbf{F}(\mathbf{X}), \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\mathbf{X}) &= \det \mathbf{F}(\mathbf{X}) \mathbf{T}(\mathbf{x}) \mathbf{F}(\mathbf{X})^{-T} \\ &= \mathbf{T}(\mathbf{x}) \operatorname{Cof} \mathbf{F}(\mathbf{X}) \end{aligned}$$

bu yerda $\mathbf{P}(\mathbf{X})$ tenzor Piola–Kirchhoffning birinchi kuchlanish tenzori deb ataladi. Bu yerda $\mathbf{P}$ simmetrik emas; lekin $\mathbf{P}\mathbf{F}^T = \mathbf{F}\mathbf{T}^T$ bo'lganligi sababli $\mathbf{T}$ simmetrik.

Oldingi isbotda bizda quyidagilar bor edi:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial X_j} P_{ij} &= \frac{\partial}{\partial X_j} (\operatorname{TCof}(\mathbf{F})) = \det \mathbf{F} \frac{\partial}{\partial X_i} T_{ik} \cdot \frac{\partial X_i}{\partial X_j} \cdot F_{kj}^{-T} \\ + T_{ik} \frac{\partial}{\partial X_j} ((\operatorname{Cof} \mathbf{F})_{kj}) &= \det \mathbf{F} \frac{\partial}{\partial X_k} T_{ik} = \det \mathbf{F} \operatorname{div} \mathbf{T}, \end{aligned}$$

ya'ni

$$\operatorname{Div} \mathbf{P} = \det \mathbf{F} \operatorname{div} \mathbf{T}, \quad (4.11)$$

shunday qilib,

$$\operatorname{div} \mathbf{T}(\mathbf{x}) + \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\det \mathbf{F}} (\operatorname{Div} \mathbf{P} + \mathbf{f}_0)(\mathbf{X})$$

$$= \rho \frac{d \mathbf{v}}{dt}(\mathbf{x}) = \rho_0 \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2}(\mathbf{x}) \frac{1}{\det \mathbf{F}}.$$

Shu tariqa, asosiy konfiguratsiyaga nisbatan muvozanatli (chiziqli va burchakli moment) tenglamalarga kelimiz:

$$\begin{aligned} \operatorname{Div} \mathbf{P}(\mathbf{X}) + \mathbf{f}_0(\mathbf{X}) &= \rho_0(\mathbf{X}) \ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{X}), \\ \mathbf{P}(\mathbf{X}) \mathbf{F}^T(\mathbf{X}) &= \mathbf{F}(\mathbf{X}) \mathbf{P}^T(\mathbf{X}) \end{aligned} \quad (4.12)$$

Matnda aytilishicha, quyidagi fizik kattaliklarning vaqt t ga bog'liqligi soddalik uchun ko'rsatilmagan: $\mathbf{P}$, $\mathbf{f}_0$, $\ddot{\mathbf{u}}$ va $\mathbf{F}$. Lekin ρ_0 vaqtga bog'liq emasligini eslatib o'tish kerak. Shu bilan birga, ushbu tenglamalarni simmetrik tenzor yordamida yozish mumkin.

$$\mathbf{S}(\mathbf{X}) = \mathbf{S}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{F}(\mathbf{X})^{-1} \mathbf{P}(\mathbf{X}) = \det \mathbf{F}^{-1} \mathbf{F}^{-T} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{T} \operatorname{Cof} \mathbf{F} \quad (4.13)$$

Tenzor $\mathbf{S}$ ikkinchi Piola–Kirchhoff kuchlanish tenzori deb nomlanadi. Keyin,

$$\begin{aligned} \operatorname{Div} \mathbf{F}(\mathbf{X}) \mathbf{S}(\mathbf{X}) + \mathbf{f}_0(\mathbf{X}) &= \rho_0(\mathbf{X}) \ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{X}) \\ \mathbf{S}(\mathbf{X}) &= \mathbf{S}(\mathbf{X})^T \end{aligned} \quad (4.14)$$

Qisqacha xulosa:

Cauchy kuchlanish tenzori: $\mathbf{T} = (\det \mathbf{F})^{-1} \mathbf{P} \mathbf{F}^T = (\det \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F} \mathbf{S} \mathbf{F}^T$

Birinchi Piola–Kirchhoff kuchlanish tenzori: $\mathbf{P} = (\det \mathbf{F}) \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T} = \mathbf{F} \mathbf{S} \quad (4.15)$

Ikkinchi Piola–Kirchhoff kuchlanish tenzori: $\mathbf{S} = (\det \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{P}$.

4.4. Quvvat

Harakatdagi jismga ta'sir qiluvchi kuchlarning asosiy xususiyati quvvatdir. Bu birlik vaqt ichida rivojlanadigan ishdir. Ish «kuch va masofa ko'paytmasi», quvvat esa «kuch va tezlik ko'paytmasi»dir. Tutash muhit mexanikasida, quvvat – bu $\mathcal{P} = \mathcal{P}(t)$ funksiyasi bilan aniqlanadigan quvvatdir:

$$\mathcal{P} = \int_{\Omega_t} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega_t} \hat{\sigma}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} \, dA \quad (4.16)$$

bu yerda $\mathbf{v}$ – tezlik. Chunki

$$\int_{\partial\Omega_t} \hat{\sigma}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} \, dA = \int_{\partial\Omega_t} \mathbf{T} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, dA = \int_{\Omega_t} (\mathbf{v} \cdot \operatorname{div} \mathbf{T} + \mathbf{T} : \operatorname{grad} \mathbf{v}) \, d\mathbf{x}$$

bizda quyidagi holat mavjud:

$$\mathcal{P} = \int_{\Omega_t} \mathbf{v} \cdot (\operatorname{div} \mathbf{T} + \mathbf{f}) \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega_t} \mathbf{T} : \mathbf{D} \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega_t} \mathbf{v} \cdot \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega_t} \mathbf{T} : \mathbf{D} \, d\mathbf{x} =$$

$$= \frac{1}{2} \left(\int_{\Omega_t} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} dx \right) + \int_{\Omega_t} \mathbf{T} : \mathbf{D} dx = \frac{d\kappa}{dt} + \int_{\Omega_t} \mathbf{T} : \mathbf{D} dx, \quad (4.17)$$

bu yerda κ – kinetik energiya.

$$\kappa = \frac{1}{2} \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} dx \quad (4.18)$$

va

$$\mathbf{D} = (\text{grad } \mathbf{v})_{\text{sym}} = \frac{1}{2} (\text{grad } \mathbf{v} + \text{grad } \mathbf{v}^T)$$

Shuni esda tutingki, $\mathbf{T} : \text{grad } \mathbf{v} = \mathbf{T} : (\mathbf{D} + \mathbf{W}) = \mathbf{T} : \mathbf{D}$ va $\mathbf{T} : \mathbf{D}$ kuchlanish quvvati deb ataladi.

Umuman olganda, harakatdagi jismning umumiy quvvati uning kinetik energiyasi o'zgarish tezligi umumiy kuchlanish quvvati yig'indisidir:

$$\mathcal{P} = \frac{d\kappa}{dt} + \int_{\Omega_t} \mathbf{T} : \mathbf{D} dx \quad (4.19)$$

Shuningdek,

$$\int_{\Omega_t} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} dx + \int_{\partial\Omega_t} \mathbf{T} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dA = \frac{d\kappa}{dt} + \int_{\Omega_t} \mathbf{T} : \mathbf{D} dx \quad (4.20)$$

Asosiy konfiguratsiyaga o'tganda, bizda quyidagilar mavjud:

$$\int_{\Omega_0} \mathbf{f}_0 \cdot \dot{\mathbf{u}} dX + \int_{\partial\Omega_0} \mathbf{P} \mathbf{n}_0 \cdot \dot{\mathbf{u}} dA_0 = \int_{\Omega_0} \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} dX + \frac{d}{dt} \frac{1}{2} \int_{\Omega_0} \rho_0 \dot{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} dX$$

Ikkinchi Piola–Kirchhoff kuchlanish tenzori yordamida, kuchlanish quvvati:

$$\int_{\Omega_t} \mathbf{T} : \mathbf{D} dx = \int_{\Omega_0} \mathbf{T}_0 : \text{grad } \mathbf{v} \det \mathbf{F} dX$$

Lekin,

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_0 : \text{grad } \mathbf{v} \det \mathbf{F} &= T_j \frac{\partial}{\partial X_k} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} \right) \cdot \frac{\partial X_k}{\partial x_j} \det \mathbf{F} = \\ &= T_j \dot{F}_k F_k^{-1} \det \mathbf{F} = \dot{F}_k (T_j \det \mathbf{F} F_k^{-1}) = \\ &= \dot{F}_k P_k = \mathbf{F}^T \dot{\mathbf{F}} : \mathbf{S} \end{aligned}$$

va

$$\mathbf{F}^T \dot{\mathbf{F}} : \mathbf{S} = \left[\frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \dot{\mathbf{F}} + \dot{\mathbf{F}}^T \mathbf{F}) + \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \dot{\mathbf{F}} - \dot{\mathbf{F}}^T \mathbf{F}) \right] : \mathbf{S} =$$

$$= \dot{\mathbf{E}} : \mathbf{S} + 0 = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}},$$

Shunday qilib,

$$\int_{\Omega_t} \mathbf{T} : \mathbf{D} \, dX = \int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} \, dX, \quad (4.21)$$

va nihoyat

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^T \dot{\mathbf{F}} : \mathbf{S} = & \left[\frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \dot{\mathbf{F}} + \dot{\mathbf{F}}^T \mathbf{F}) + \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \dot{\mathbf{F}} - \dot{\mathbf{F}}^T \mathbf{F}) \right] : \mathbf{S} = \\ & + \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \int_{\Omega_0} \rho_0 \dot{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} \, dX \right). \end{aligned} \quad (4.22)$$

5-BOB. ENERGIYANING SAQLANISH QONUNI

5.1. Energiya va energiyaning saqlanish qonuni

Energiya jismoniy tizimning (masalan, deformatsiyanuvchi jism) xususiyatidir; u jismning ish qilish qobiliyatini o'ldiradi: tizim energiya sarflaydi va vaqt ichida o'zgarishlar sodir bo'lganda ish bajaradi. Energiya o'zgarishi jismning ishlab chiqaradigan ish miqdori, ya'ni quvvatni keltirib chiqaradi. Shunday qilib, jismning umumiy energiyasining o'zgarish tezligi uning kinetik energiyasi va ichki jarayonlar (harorat o'zgarishsiz) tufayli rivojlanadigan mexanik quvvat yig'indisiga tengdir.

Umumiy energiya: $= \kappa + U$

Ichki energiya deformatsiya, harorat gradiyenti va boshqa moddiy elementlarga bog'liq. Bu bog'liqlikning aniq shakli jismning «fizik tuzilishi»ga bog'liq. Tutash muhitlar mexanikasida ichki energiya zichligi (birlik massasi uchun energiya zichligi) mavjud bo'lib, u quyidagicha ifodalanadi:

$$U = \int_{\Omega_0} \rho_0 e_0(X, t) dX = \int_{\Omega} \rho e(x, t) dx$$

Eslatib o'tamiz, kinetik energiya quyidagicha berilgan:

$$\kappa = \frac{1}{2} \int_{\Omega_0} \rho_0 \dot{u} \cdot \dot{u} dX = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho v \cdot v dx$$

va quvvat $\mathcal{P}$:

$$\mathcal{P} = \frac{d\kappa}{dt} = \int_{\Omega} T : D dx = \frac{dU}{dt} = \int_{\Omega} S : \dot{E} dx. \quad (5.1)$$

Jismning umumiy energiyasining vaqt birligida o'zgarishi (umumiy energiyaning vaqt tezligida o'zgarishi) quyidagicha quvvat va tananing isitilishiga olib keladi:

$$\dot{Q} = \int_{\partial\Omega_t} -q \cdot n dA + \int_{\Omega_t} r dx = \int_{\partial\Omega_0} -q_0 \cdot n_0 dA_0 + \int_{\Omega_0} r_0 dx \quad (5.2)$$

bu yerda q issiqlik oqimi hisoblanib, bu tanaga birlik vaqt ichida hosil bo'ladigan issiqlik miqdorini anglatadi.

$$q \cdot \det F F^{-T} n_0 = q \cdot \text{Cof } F n_0 = (\text{Cof } F)^T q \cdot n_0 = q_0 \cdot n_0, \\ r \det F = r_0.$$

Biz endi Energiyaning saqlanish qonuniga keldik: umumiy energiyani o'zgartirish quvvatni va jismning isitilishini tenglashtiradi:

$$\frac{d}{dt}(\kappa + U) = \mathcal{P} + \dot{Q} \quad (5.3)$$

Energiyaning saqlanish prinsipi, shuningdek, termodinamikaning birinchi qonuni sifatida ham tanilgan bo'lib, uni III qismda ko'rib chiqamiz.

5.2. Energiya saqlanishi qonunining lokal formalari

Energiyaning saqlanish prinsipining mahalliy shakllarini tushuntirish uchun κ , U , $\mathcal{P}$ va $\dot{Q}$ tushunchalarini eslaylik:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} dx + \int_{\Omega_t} \rho e dx \right) = \int_{\Omega_t} \mathbf{T} : \mathbf{D} dx + \frac{d\kappa}{dt} -$$

$$V = V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) - \int_{\partial\Omega_t} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dA + \int_{\Omega_t} r dx.$$

shunday qilib,

$$\int_{\Omega_t} \left(\rho \frac{de}{dt} - \mathbf{T} : \mathbf{D} + \operatorname{div} \mathbf{q} - r \right) dx = 0$$

yoki

$$\rho \frac{de}{dt} = \mathbf{T} : \mathbf{D} - \operatorname{div} \mathbf{q} + r \quad (5.4)$$

Ma'lumotni dastlabki konfiguratsiyasiga nisbatan ko'rib chiqqanda, teng natijalarga erishamiz:

$$\frac{d}{dt} \left(\kappa + \int_{\Omega_0} \rho_0 e_0 dX \right) = \int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} dX + \frac{d\kappa}{dt} - \int_{\partial\Omega_0} \mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{n}_0 dA_0 + \int_{\Omega_0} r_0 dX,$$

yoki

$$\int_{\Omega_0} (\rho_0 \dot{e}_0 - \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} + \operatorname{Div} \mathbf{q}_0 - r_0) dX = 0$$

Shunday qilib, mahalliy ravishda,

$$\rho_0 \dot{e}_0 = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} - \operatorname{Div} \mathbf{q}_0 + r_0 \quad (5.5)$$

6-BOB. TUTASH MUHITLAR TERMODINAMIKASI VA IKKINCHI QONUN

Fizik olamning issiqlik va mexanik xatti-harakatlarini tahlil qilishda termomexanik tizimlarni S uch o'ldiruvchi Yevklid fazosining ma'lum bir qismi sifatida tasavvur qilish qulaydir, bunda ehtimol bir yoki undan ko'p deformatsiyalangan jismlar joylashgan bo'lishi mumkin. Bunday tizim, agar u S ning to'ldiruvchisi bilan modda almashmasa, yopiq deb ataladi. S ning tashqi qismi deb ataladigan to'ldiruvchisi bilan S o'rtasida tashqi kuchlar tomonidan bajarilgan ish va S dan tashqariga issiqlik uzatilishi (yoki sovitilishi) orqali energiya almashinuvi yuz berishi mumkin. Agar tizimning tashqi qismi bilan faqat energiya almashinuvi bo'lib, bu issiqlik almashinuvi va S ga ta'sir qiluvchi jismning va kontakt kuchlarining bajargan ishi orqali amalga oshsa, bunday tizim termodinamik tizim deb ataladi. Tizim S ning termodinamik holati shunday deb ataladigan termodinamik holat o'zgaruvchilarining qiymatlari, masalan, harorat, massaviy zichlik va hokazolar bilan tavsiflanadi, ular tizimning mexanik va termik holatini aks ettiradi; biz $T(S, t)$ ni tizim S ning termodinamik holati vaqt t da deb yozishimiz mumkin. Agar termodinamik tizim vaqt davomida o'zgarmasa, u termodinamik muvozanatda bo'ladi. Bir holatdan boshqa holatga o'tish termodinamik jarayon deb ataladi.

Shunday qilib, biz tizimning termodinamik holatini tizimni tavsiflash uchun zarur bo'lgan barcha ma'lumotlarni taqdim etuvchi ma'lum maydonlar qiymatlari sifatida ko'rib chiqishimiz mumkin: kuchlanish, deformatsiya, tezlik va hokazo hamda tizimning issiqlik yoki sovuqligini o'lchaydigan va bu kattaliklarning o'zgarish tezligini aniqlaydigan kattaliklar. Absolyut harorat $\theta \in \mathbb{R}$, $\theta > 0$, tizimning issiqlik darajasini va termal holatini tavsiflaydi. Ikki yopiq tizim S_1 va S_2 bir-biriga termodinamik muvozanatda bo'ladi (uchinchi tizim S_3 bilan ham), agar ular bir xil τ qiymatiga ega bo'lsalar. Shunday qilib, τ holat o'zgaruvchisi hisoblanadi. Tizimning termodinamik holatini aniqlash uchun zarur bo'lgan ikkinchi kattalik entropiya bo'lib, bu tizim berilgan harorat τ da olishi mumkin bo'lgan issiqlik miqdorini cheklaydi.

Uzluksiz mexanikada jismning umumiy entropiyasi S ma'lum bir entropiya zichligining η (massaga nisbatan entropiya zichligi) integrali sifatida aniqlanadi:

$$S = \int_{\Omega} \rho \eta(x, t) dx$$

An'anaviy termodinamikada, ikki holat o'rtasidagi entropiya o'zgarishi $T(S, t_1)$ va $T(S, t_2)$ issiqlik almashinuvini harorat birligi uchun o'lchaydi. Agar ϵ doimiy bo'lsa, klassik shart:

$$S(s, t_2) - S(s, t_1) - \frac{\dot{Q}}{\theta} = 0$$

teskari jarayonlar uchun va

$$S(s, t_2) - S(s, t_1) - \frac{\dot{Q}}{\theta} \geq 0$$

barcha jarayonlar uchun amal qiladi, bu yerda $S(s, t)$ bu S sistemasining vaqt t dagi umumiy entropiyasi va $\dot{Q}$ bu issiqlikdir.

$$\frac{dS}{dt} + \int_{\partial\Omega} \frac{1}{\theta} q \cdot n dA - \int_{\Omega} \frac{r}{\theta} dx \geq 0 \quad (6.1)$$

Bu termodinamikaning ikkinchi qonuni deb ataladi. Umumiy entropiya ishlab chiqarish har doim ≥ 0 . Mahalliy sharoitda, bizda:

$$\int_{\Omega} \left(\rho \frac{d\eta}{dt} + \operatorname{div} \frac{q}{\theta} - \frac{r}{\theta} \right) dx \geq 0$$

yoki

$$\rho \frac{d\eta}{dt} + \operatorname{div} \frac{q}{\theta} - \frac{r}{\theta} \geq 0. \quad (6.2)$$

Moddiy tavsifda, bizda:

$$\rho \dot{\eta}_0 - \operatorname{Div} \frac{q_0}{\theta} - \frac{r_0}{\theta} \geq 0. \quad (6.3)$$

Bu munosabat Clausius–Duhem tengsizligi deb ataladi.

Biz (6.1) ning umumiyroq shaklini, entropiya oqimi h va entropiya taʼminoti s mavjudligini faraz qilish orqali olishimiz mumkin, shundayki:

$$\frac{dS}{dt} - \int_{\Omega} s dx + \int_{\partial\Omega} h \cdot n dA \geq 0 \quad (6.4)$$

yoki (6.2) oʻrnida,

$$\rho \frac{d\eta}{dt} + \operatorname{div} h - s \geq 0. \quad (6.5)$$

Bu sharoitda, bu natija (6.2) ga kelib chiqadi, qachonki $\mathbf{h} = \mathbf{q} / \theta$ va $s = r / \theta$ bo'lsa.

(Lagrangian)	(Eulerian)
$\rho_0 = \rho \det \mathbf{F}$	$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0$
$\operatorname{Div} \mathbf{F} \mathbf{S} + \mathbf{f}_0 = \rho_0 \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2}$	$\operatorname{div} \mathbf{T} + \mathbf{f} = \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} \mathbf{v} \right)$
$\mathbf{S} = \mathbf{S}^T$	$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T$
$\rho_0 \dot{e}_0 = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} - \operatorname{Div} \mathbf{q}_0 + r_0$	$\rho \frac{\partial e}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} e = \mathbf{T} : \mathbf{D} - \operatorname{div} \mathbf{q} + r$
$\rho_0 \dot{\eta}_0 + \operatorname{Div} \frac{\mathbf{q}_0}{\theta} - \frac{r_0}{\theta} \geq 0$	$\rho \frac{d\eta}{dt} + \rho \mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} \eta + \operatorname{div} \frac{\mathbf{q}}{\theta} - \frac{r}{\theta} \geq 0$

7-BOB. HOLAT TENGLAMALARI

Boshlang'ich ma'lumotlar (ya'ni, B jismni va uning termodinamik holatini S vaqt $t = 0$ da o'zining ma'lumot konfiguratsiyasini egallab turgan paytda tasvirlash uchun kerak bo'lgan barcha ma'lumotlar berilgan):

$$(\Omega_0, \partial\Omega_0, \mathbf{f}_0(\mathbf{X}, t), t \in [0, T], \mathbf{v}_0 = \dot{\mathbf{u}}(\mathbf{X}, 0), \theta_0(\mathbf{X}) = \theta(\mathbf{X}, 0), \dots)$$

biz uzluksiz mexanika tenglamalaridan (massa, energiya saqlanishi, chiziqli va burchak momentining muvozanati, termodinamikaning ikkinchi qonuni) jism harakatini (harakat, deformatsiya, harorat, kuchlanish, issiqlik oqimi, entropiya va boshqalar) har bir $\mathbf{X} \in \overline{\Omega_0}$ uchun biror interval $t \in [0, T]$ bo'lganda belgilash uchun foydalanamiz. Afsuski, bizda bu muammoni hal qilish uchun yetarli ma'lumot yo'q.

Muvozanat qonunlari barcha materiallarga tatbiq etiladi va biz bilamizki, ularning tuzilishiga bog'liq ravishda har xil materiallar bir xil stimullarga turli xil javob beradi. Muammoni yakunlash (ya'ni, tenglamalar tizimini «yopish») uchun biz ushbu tenglamalarni tavsiflovchi materiallarga xos bo'lgan holat tenglamalari bilan qo'shimcha ravishda ta'minlashimiz kerak. Shunday qilib, holat tenglamalari materiallarning har xil stimullarga (kuchlar, issiqlik va hokazo) nisbatan qanday munosabatda bo'lishi mumkinligini belgilovchi cheklovlarni o'z ichiga oladi. Qaysi biri «mustaqil» ekanligini aniqlashda, biz asosiy (holat) o'zgaruvchilar sifatida javobning tabiiy ravishda kuzatilgan xususiyatlarini tanlaymiz – bizning jismoniy sezgilarimiz orqali: harakat (yoki joy almashish), harakat tezligi, deformatsiya yoki deformatsiya tezligi, issiqlik yoki sovuqlik (temperatura) yoki uning gradiyentlari va hokazo.

Agar biz bilsak, masalan, kuchlanish, issiqlik oqimi, ichki energiya va entropiya qanday qilib ma'lum bir material uchun holat o'zgaruvchilariga bog'liq bo'lsa, biz jismni turli stimullarning (yuklar, issiqlik va hokazo) ta'siri ostida qanday tutishini to'liq tavsiflash uchun yetarli ma'lumotga ega bo'lishni umid qilamiz. Shunday qilib, biz quyidagi turdagi konstitutiv tenglamalarni izlaymiz:

$$\begin{aligned} T &= \mathcal{T}(\mathbf{x}, t, \Lambda), \\ q &= \mathcal{Q}(\mathbf{x}, t, \Lambda), \\ e &= \xi(\mathbf{x}, t, \Lambda), \\ \eta &= \mathcal{H}(\mathbf{x}, t, \Lambda), \end{aligned} \tag{7.1}$$

bu yerda, vaqtinchalik, Λ biz kutgan har bir narsani bildiradi: kuchlanish, issiq-

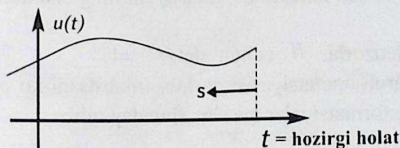
lik oqimi, ichki energiya va entropiya biror nuqtada $x \in \Omega$ da va vaqt t da (masalan, $\Lambda = (F, C, \theta, \nabla \theta, L, D, \dots)$). Funktsiyalar τ, Q, ε, H holat tenglamalarini aniqlash uchun javob funksiyalari deb ataladi.

7.1. Holat tenglamalari uchun qoidalar va tamoyillar

Haqiqiy materiallar uchun javob funksiyalarining shakllarini qanday qoidalar yoki hatto asosiy tamoyillar boshqaradi? Biz eng muhim qoidalar va tamoyillarni sanab o'tamiz:

1. Determinant tamoyil.

Biror materialning t vaqtidagi x nuqtada joylashgan X holati uning dastlabki o'zgaruvchilar Λ tarixiga bog'liq holda aniqlanadi.



7.1-rasm. Vaqt tarixi

Boshqacha aytganda, (x, t) nuqtadagi sharoitlar Λ to'plamining o'tmishdagi holatlariga bog'liq (kelajakdagi holatlariga emas). Umuman olganda, $u = u(x, t)$ funksiyasining t vaqtidagi «tarixi» to'plam sifatida belgilanadi.

$$u'(s) = \{u(x, t-s) \mid s \geq 0\}$$

Ishora konfiguratsiyasidan kelib chiqqan «tarix» $u(x, t-s), t, s \geq 0$ ko'rinishida ifodalanadi (7.1-rasmga qarang). Shundan keyin, umumiy holda, Λ ni $\Lambda'(s)$ bilan almashtirishimiz kerak, agar holat tenglamalarida (materialning tuzilishida) javobning faqat joriy vaqtidagi qiymatlarga bog'liq bo'lishini ko'rsatuvchi shartlar mavjud bo'lmasa.

2. Invariantlik tamoyili.

Holat tenglamalarning shakli dastlabki tizimidagi o'zgarishlarga nisbatan invariant bo'lishi kerak: ular kuzatuvchiga bog'liq bo'lmasligi kerak. Masalan, agar biz x koordinatalar sistemasini x^* sistemasiga aylantirsak (va boshlang'ich nuqtani ko'chirsak):

$$\left. \begin{aligned} x^* &= Q(t)x + c(t) \\ Q'(t) &= Q^{-1}(t) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \quad (7.2)$$

va vaqtni o'zgartirsak: $t^* = t - a$, holat funksiyalari invariant bo'lishi kerak. Masalan: agar $T = T(x, t)$, u holda $T^* = T(x^*, t^*)$.

Bu yerda T har ikkala tenglamada ham bir xil funksiya bo'lib,

$$T^* = Q(t)TQ(t)^T \quad (7.3)$$

3. Fizik moslik tamoyili.

Holat tenglamalar mexanikaning fizik tamoyillariga zid kelmasligi yoki ularni buzmasligi kerak (massa, energiya, momentning saqlanish qonunlari yoki Clausius–Duhem tengsizligi).

4. Material simmetriyasi tamoyili.

Har bir material uchun, material koordinatalarining bir turdagi unimodulyar transformatsiyalari guruhi G mavjud bo'lib, u materialning izotropiya guruhi deb ataladi va bu guruh ostida konstitutiv funksiyalarning shakllari invariant bo'lib qoladi.

– Unimodulyar tenzorlar H uchun $\det H = \pm 1$.

– G guruhi – guruh operatsiyasi = tarkibi (matritsani ko'paytirish) bilan bir modulli chiziqli transformatsiyalar guruhi. Shunday qilib

$$1. A, B \in G \Rightarrow AB \in G;$$

$$2. A(BC) = (BC)C;$$

$$3. \exists I \in G \quad A \cdot I = A;$$

$$4. \forall A, B \in G, \exists A^{-1} \in G, AA^{-1} = I.$$

– O^+ guruhini aylanishlar guruhi deb ataladi (ortogonal guruhning mos jufti).

Agar X nuqtasidagi material X da, simmetriya guruhi G ga teng bo'lsa O^+ , unda material $\bar{X}$ da izotropdir; aks holda, u anizotropdir.

5. Mahalliy harakat tamoyili

X nuqtadagi bog'liq (asosiy) holat o'zgaruvchilar X dan uzoq masofadagi nuqtalardagi mustaqil o'zgaruvchilarga (masalan (T, q, e, η)) ta'sir qilmaydi.

Boshqa qoida ham mavjud. Masalan:

• **O'lovlar bo'yicha moslik:** Albatta, holat tenglamalardagi terminlar o'lvcham jihatidan mos bo'lishi kerak (bu 3-tamoyilning natijasi sifatida talqin qilinishi mumkin). Bundan tashqari, o'lovlar tahlilini konstitutiv o'zgaruvchilar haqida ma'lumot olish uchun ishlatilishi mumkin.

• **Mavjudlik va to'g'ri qo'yilganlik:** Konstitutiv tenglamalar shunday bo'lishi kerakki, ular chegaraviy shartlari va boshlang'ich qiymatlar masalalariga to'g'ri qo'yilgan yechimlarni taqdim etsin. Bu yechimlar uzluksiz mexanika tenglamalarini qo'llash natijasida olinadi.

▪ **Ekvivalentlik:** Materialning javob funksiyalarini tavsiflashni boshlaganin-gizda, $\wedge$ -dagi bog'liq o'zgaruvchilar «bir xil darajada mavjudligiga» ishonch ho-sil qiling. Boshqacha aytganda, boshqa bir manba aksini ko'rsatmaguncha, barcha konstitutiv funksiyalar (T, q, e, η) ning bir xil to'liq o'zgaruvchilar ro'yxatiga $\wedge$ bog'liq ekanligini faraz qiling

7.2. INVARIANTLIK PRINSIPLARI

7.2.1. Deformatsiyanuvchan qattiq jism

Kuzatuvchining «o'zgarishini» ko'rib chiqing:

$$\begin{aligned} \dot{x}^*(t) &= Q(t)x(t) + c(t), \\ Q(t)^{-1} &= Q(t)^T, \end{aligned} \quad (7.4)$$

bu yerda $x^*(t) = \varphi(X, t)$. Shubhasiz, $F^* = \nabla x^*$ va $F = \nabla x$, shunday qilib:

$$F^* = QF \quad \text{va} \quad \det F^* = \det F. \quad (7.5)$$

Agar $n^* = Qn$ va $\dot{o}^*(n^*) = Q\dot{o}(n)$, bo'lsa, unda

$$T^* n^* = QTQ^T n^* \Rightarrow T^* = QTQ^T. \quad (7.6)$$

Faraz qiling:

$$T = T(F)$$

(Mahalliy harakat $\Rightarrow T \nabla \varphi$, emas φ).

Shunda,

$$T^* = T(F^*)$$

Shunday qilib, materialning javob funksiyasi kuzatuvchiga bog'liq emas.

Agar, $\forall Q(t), Q(t)^T = Q(t)^{-1}$ bizda

$$\mathcal{T}(QF) = QT(F)Q^T. \quad (7.7)$$

Misol: Agar $\mathcal{T}(F) = T$ bo'lsa, unda $\mathcal{T}(F) = RT(U)R^T$, chunki $\mathcal{T}(R^T F) = RT(R^T R U)R^T = RT(U)R^T$. Bu shuni ko'rsatadiki, biz T -ni U -ning funk-siyasi sifatida ifodalashimiz mumkin, chunki $U^2 = C$, bu esa C yoki E -ga teng; ya'ni $T = \mathcal{T}(F) = RT(U)R^T = FU^{-1}\mathcal{T}(C^{1/2})U^{-1}F^T = F\hat{\mathcal{T}}(C)F^T$.

Umuman olganda, holat tenglamalari materialning jismdagi ma'lum bir nuqtada (material zarrasi) holat o'zgaruvchilariga (deformatsiya, harorat, tezlik gra-diyentlari va hokazo) bo'lgan javobini tavsiflaydi. Yuqorida ko'rib chiqilgan prin-siplardan endi bizga javob mos o'zgaruvchilarining butun tarixiga bog'liq bo'li-shi mumkinligi haqida xulosaga olib keladi. Agar materialning holat funksiyalari (T, q, e, η) faqat hozirgi vaqtdagi $\mathbf{F}, \theta$ va $\nabla\theta$ ning qiymatlariga bog'liq bo'lsa, bunday material termoplastik deyiladi. Agar jismning barcha moddiy nuqtalari bir xil materialdan tashkil topgan bo'lsa, jism gomogen deyiladi; aks holda, u gomogen bo'lmagan hisoblanadi. Biz keyingi bobda termoplastik qattiq jismlar uchun konstitutiv tenglamalarning misollarini keltiramiz.

$$\psi_0(\mathbf{OF}) = \psi_0(\mathbf{F}, \theta) \quad \text{va} \quad \mathbf{Q}(\mathbf{OF}, \theta, \mathbf{G}) = \mathbf{Q}(\mathbf{F}, \theta, \mathbf{G}).$$

Xususan, agar, qutbiy dekompozitsiya teoremasiga ko'ra, $\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U}$, bo'lsa, $\mathbf{O}$ ni $\mathbf{R}$ bilan almashtirish shuni ko'rsatadiki, $\psi_0(\mathbf{F}, \theta) = \psi_0(\mathbf{U}, \theta)$ va $\mathbf{Q}(\mathbf{F}, \theta, \mathbf{G}) = \mathbf{Q}(\mathbf{U}, \theta, \mathbf{G})$.

7.2.2. Suyuqliklar

Agar materialning joriy konfiguratsiyasidan termomexanik deformatsiyalar-dagi har qanday o'zgarishlar unimodulli transformatsiyalar tufayli mos yozuvlar konfiguratsiyasidagi o'zgarishlarga ta'sir qilmasa, u odatda suyuqlik deb ataladi. Ideal suyuqlik – bu barcha harakatlar izoxorik bo'lgan (ya'ni hajmi saqlanadigan) va zichlik doimiy bo'lgan materialdir. Bunday suyuqliklar siqilmaydigan bo'lishi kerak. Biz $\frac{\dot{\cdot}}{\det \mathbf{F}} = 0$ deb taxmin qilamiz, lekin $\frac{\dot{\cdot}}{\det \mathbf{F}} = \det \mathbf{F} \operatorname{div} \mathbf{v}$ va barcha siqil-mas suyuqliklar bu cheklovni qanoatlantiradi, shuning uchun

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0$$

Bunday suyuqliklarda Cauchy kuchlanish tenzori oddiygina

$$\mathbf{T} = -p \mathbf{I}, \quad (7.8)$$

bu yerda $p = p(x, t, i)$ gidrostatik bosim deb ataladi. Aniqki, ushbu holat tenglamasi dastlabki sistemadagi o'zgarishlarga nisbatan invariantdir, u material koordinata sistemasi befarqlik prinsipiga bo'ysunadi.

Suyuqliklarning yanada umumiy sinfi quyidagi tenglamalar bilan tavsiflanadi:

$$\mathbf{T} = \mathbf{F}(\mathbf{L}), \quad (7.9)$$

bu yerda $\mathbf{F} = -p\mathbf{I}$, p bu esa gidrostatik bosimga teng. Agar biz siqilmaydigan bo'lishni taxmin qilsak:

$$\operatorname{tr} \mathbf{L} = \operatorname{div} \mathbf{v} = 0,$$

shunda

$$T = -p \mathbf{I} + \mathcal{F}_0(\mathbf{D}), \quad (7.10)$$

$\mathcal{F}_0(0) = 0$. Agar $\mathcal{F}_0$ $\mathbf{D}$ da chiziqli bo'lsa, unda kuzatuvchini o'zgartirish ostida $\mathcal{F}_0(\mathbf{D})$ ning invariant bo'lishi uchun zarur va yetarli shart shundaki, doimiy (yoki skalyar) $\mu = \mu(t) > 0$ mavjud bo'lib, $\mathcal{F}_0 = 2\mu \mathbf{D}$. Shunda

$$T = -p \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{D} \quad (7.11)$$

Bu Newton suyuqligidagi (qovushqoq siqilmaydigan suyuqlik) Cauchy kuchlanishining klassik konstitutsiyaviy tenglamasidir, bu yerda μ – suyuqlikning yopishqoqligi. Newton suyuqliklari sifatida modellashirilgan suyuqliklarning eng muhim misoli suvdur.

Albatta, suyuqliklar uchun yana ko'plab umumiy tavsiflar mavjud. Tenglama:

$$T = -p \mathbf{I} + f_1 \mathbf{D} + f_2 \mathbf{D}^2 + f_3 \mathbf{g} \otimes \mathbf{g} + f_4 (\mathbf{g} \otimes \mathbf{D} \mathbf{g}) + f_5 (\mathbf{g} \otimes \mathbf{D}^2 \mathbf{g}) \quad (7.12)$$

bu yerda $\mathbf{g} = \nabla \theta$, $\mathbf{g} = \nabla \theta$, Newton bo'lmagan suyuqliklar sinfini tavsiflaydi. $f_1, f_2, \dots, f_5$ koeffitsiyentlari (7.12) da $\mathbf{D}$ va $\mathbf{g}$, $\mathbf{DI}$ invariantlarining funksiyalari sifatida tushuniladi va hokazo. Newton bo'lmagan suyuqliklar misollari qon, sirop va bo'yloqlardir.

7.3. Coleman–Noll metodi: Termodinamikaning ikkinchi qonuni bilan muvofiqlik

Mexanik izchillik tamoyilining muhim qo'llanilishi Coleman – Noll argumenti tomonidan taqdim etiladi, bu termodinamikaning ikkinchi qonuni bilan taqdim etilgan konstitutiv tenglamalar cheklovlariga nisbatan cheklovlar qo'yadi. Birinchi qadam Helmholtz erkin energiyasini ψ ni quyidagi yutuq bilan tanishtirishdan iborat:

$$\psi = e - \theta \eta \quad (7.13)$$

bu yerda e ichki energiya zichligi, η entropiya zichligi va θ absolyut haroratdir. Shuning uchun (6.2) tenglamasidan, bizda

$$-\rho \frac{d\psi}{dt} - \rho \eta \frac{d\theta}{dt} + \mathbf{T} : \mathbf{D} - \frac{\mathbf{q}}{\theta} \cdot \operatorname{grad} \theta \geq 0 \quad (7.14)$$

bu yerda biz shuningdek (5.4) ni ham kiritdik. Dastlabki konfiguratsiyada bu quyidagi shaklni oladi:

$$-\rho_0 \dot{\psi}_0 - \rho_0 \eta_0 \dot{\theta} + \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} - \frac{1}{\theta} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla \theta \geq 0 \quad (7.15)$$

Masalan, Helmholtz erkin energiyasi uchun konstitutiv tenglama quyidagi shaklda ekanligini faraz qilaylik:

$$\psi_0 = \Psi(\mathbf{E}, \theta, \nabla \theta) \quad (7.16)$$

Shunda,

$$\dot{\psi}_0 = \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{E}} : \dot{\mathbf{E}} + \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial \Psi}{\partial \nabla \theta} \cdot \nabla \dot{\theta} \quad (7.17)$$

Shu sababli, (7.15) quyidagicha yozilishi mumkin:

$$\left(\mathbf{S} - \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{E}} \right) : \dot{\mathbf{E}} - \rho_0 \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \theta} + \eta_0 \right) \dot{\theta} - \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \nabla \theta} \cdot \nabla \dot{\theta} - \frac{1}{\theta} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla \theta \geq 0 \quad (7.18)$$

Endi biz Coleman-Noll metodining argumentini qo'llaymiz: (7.18) ning har qanday belgining tezliklari $(\dot{\mathbf{E}}, \dot{\theta}, \nabla \dot{\theta})$ uchun amal qilishi kerakligi sababli, koeffitsiyentlarning nolga teng bo'lishi kifoya, shuning uchun bizda

$$\mathbf{S} = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{E}}, \quad \eta_0 = -\frac{\partial \Psi}{\partial \theta}, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial \nabla \theta} = 0 \quad (7.19)$$

va

$$-\frac{1}{\theta} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla \theta \geq 0 \quad (7.20)$$

Bu muhim natijadir. ψ_0 va $\mathbf{q}_0$ uchun konstitutiv tenglama «fizik jihatdan mos» bo'lishi uchun, tenglamalar (7.19) va tengsizlik (7.20) bajarilishi kifoya. Shunday qilib, biz $\mathbf{S}$ va η_0 uchun konstitutiv tenglamalarni to'g'ridan to'g'ri ψ_0 dan olamiz. Erkin energiya haroratning gradiyentiga, $\nabla \theta$ ga bog'liq bo'lishi mumkin emas. Xuddi shuningdek, «issiqlik issiqdan sovuqqa oqishi kerak», ya'ni tengsizlik (7.20) bilan ifodalangan holat ham bajarilishi kerak.

Biz kuzatamizki, erkin energiya kuchlanishning konservativ yoki dissipativ qismini aniqlaydi. Masalan, agar

$$\mathbf{S} = \mathcal{F}(\mathbf{E}) + \mathbf{I}(\dot{\mathbf{E}}), \quad (7.21)$$

bu yerda $\mathbf{I}(\dot{\mathbf{E}})$ «dissipativ» kuchlanishni anglatadi, shunda (7.18) dagi birinchi had quyidagicha bo'ladi:

$$\left(\mathcal{F}(\mathbf{E}) + \mathbf{I}(\dot{\mathbf{E}}) - \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{E}} \right) : \dot{\mathbf{E}}$$

va Coleman-Noll metodi talab qiladi:

$$\mathcal{F}(\mathbf{E}) = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{E}} \quad \text{va} \quad \mathbf{I}(\dot{\mathbf{E}}) : \dot{\mathbf{E}} - \frac{1}{\theta} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla \theta \geq 0 \quad (7.22)$$

Ushbu natija, shuningdek, ichki dissipatsiya maydoni δ_0 tushunchasi bilan ham tasvirlanadi, quyidagicha aniqlangan:

$$\delta_0 = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} - \rho_0 (\dot{\psi}_0 + \eta_0 \dot{\theta}) = \text{Div} \mathbf{q}_0 - r_0 + \rho_0 \theta \dot{\eta}_0. \quad (7.23)$$

Clausius–Duhem tengsizligi shunday talab qiladi:

$$\delta_0 - \frac{1}{\theta} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla \theta \geq 0 \quad (7.24)$$

Misol uchun (7.22) da, ma'lumki $\delta_0 = \mathcal{I}(\dot{\mathbf{E}}) : \dot{\mathbf{E}}$.

8-BOB. MISOLLAR VA QO'LLANISHLAR

Biz material jismlarning termomexanik xatti-harakatlari umumiy uzluksizlik nazariyasining barcha komponentlarini ishlab chiqdik. Suyuqlik mexanikasi, is-siqlik o'tkazish va qattiq mexanikaning klassik matematik modellari endi maxsus holatlar sifatida qurilishi mumkin. Ushbu bobda biz umumiy nazariyaning maxsus qo'llanmalari sifatida ba'zi klassik matematik modellarning bir nechtasini ishlab chiqamiz. Bizning maqsadimiz faqat klassik modellarni boshqaradigan tenglamalar tizimini ishlab chiqishdir; biz yechimlar qurilishi yoki boshqa tafsilotlarga e'tibor bermaymiz.

8.1. Siqilmas suyuqlik uchun Navier–Stokes tenglamalari

Biz tutash muhitlar mexanikasining eng muhim misollaridan biri bilan boshlaymiz: Yopishqoq siqilmas suyuqlik tenglamalari. Bu taniqli Navier-Stokes tenglamalari siqilmas oqimlar uchun. Ular ko'plab qo'llanmalarda suyuqliklarning oqimini o'rganish uchun ishlatiladi, asosan suv yoki havoni hatto ekstremal sharoitlarda. Biz muvozanat tenglamalarini va konstitutiv tenglamani yozamiz:

Massaning saqlanishi (2.4-ni eslang):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (8.1)$$

Siqilmas suyuqlik uchun bizda:

$$0 = \frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} dx = \int_{\Omega_0} \overline{\det \mathbf{F}} dX = \int_{\Omega_0} \det \mathbf{F} \operatorname{div} \mathbf{v} dX = \int_{\Omega_t} \operatorname{div} \mathbf{v} dx$$

bu shuni anglatadiki:

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \quad (8.2)$$

Shunday qilib,

$$0 = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} \rho + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} \rho = \frac{d\rho}{dt}, \quad (8.3)$$

bu esa ρ doimiy ekanligini anglatadi.

Momentning saqlanishi (4.8-ni eslang):

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} \mathbf{v} - \operatorname{div} \mathbf{T} = \mathbf{f}, \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Omega_t \times (0, T), \quad (8.4)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T.$$

Konstitutiv tenglama (7.11-ni eslang):

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D}, \quad (8.5)$$

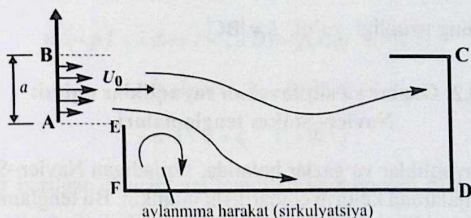
$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\text{grad } \mathbf{v} + (\text{grad } \mathbf{v})^T).$$

Navier–Stokes tenglamalari. Nihoyat, (8.5) ni (8.4) ga kiritish va (8.2) ni qo‘shish orqali taniqli Navier–Stokes tenglamalari hosil bo‘ladi:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \text{grad } \mathbf{v} - \mu \Delta \mathbf{v} + \text{grad } p = \mathbf{f}, \quad (8.6)$$

$$\text{div } \mathbf{v} = 0$$

bu yerda $\Delta = \text{vektor Laplacian} = \text{div grad}$.



8.1-rasm. Qaytishi bor kanal oqimining geometriyasi

Qo‘llanilish: Dastlabki-chegara qiymat muammosi

Boshlang‘ich-chegara qiymatlari masalasi

Standart model masalasi sifatida 8.1-rasmda ko‘rsatilganidek, «qadamcha» bo‘lgan kanaldan yopishqoq oqimni o‘tkazish masalasini ko‘rib chiqamiz.

Dastlabki shartlar:

$$\mathbf{v}(x, 0) = \mathbf{v}_0(x), \quad (8.7)$$

bu yerda dastlabki maydon $\text{div } \mathbf{v}_0 = 0$ shartini bajarishi kerak, bu esa quyidagilarni anglatadi:

$$\int_{\partial\Omega_0} \mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{n} dA = 0. \quad (8.8)$$

Chegara shartlari:

1. Segmentda BC va DE $\cup$ EF $\cup$ FA, bizda sirpanmaydigan chegara sharti $v = 0$.

2. «Ichki oqim chegarasi» AB da, biz Puazeyl oqim tezligi profilini belgilaymiz (8.1-rasmga qarang):

$$v_1(0, x_2, t) = \left(1 - \left(\frac{2x_2}{a}\right)^2\right) U_0, \quad (8.9)$$

$$v_2(0, x_2, t) = 0.$$

3. «Chiqarish chegarasi» CD da bir nechta imkoniyatlar mavjud. Ko'pincha ishlatiladigan biri:

$$-p + \mu \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \Big|_{x_1=L} = T e_1 \Big|_{x_1=L} = 0, \quad (8.10)$$

$$v_2(L, x_2, t) = 0,$$

bu yerda L kanalning uzunligi, ya'ni, $L = |BC|$

8.2. Gazlar va siqiluvchan suyuqliklar oqimi: Navier–Stokes tenglamalari

Siqiladigan suyuqliklar va gazlar holatida, siqiladigan Navier–Stokes tenglamalari avvalgi natijalardan keltirib chiqarilishi mumkin. Bu tenglamalar gaz dinamikasi, aerodinamika va samolyotlar, raketalar va o'qlar atrofida yuqori tezlikda oqimlar mexanikasini boshqaradi.

Kuchlanish, issiqlik oqimi va entropiya uchun odatiy konstitutiv tenglamalar quyidagicha:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \lambda \operatorname{tr}(\mathbf{D})\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D} - \alpha\theta\mathbf{I}$$

$$\int_{\gamma} \dot{\eta} e^{\eta} dq dp = 0, \quad (8.11)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \rho} = \rho^{-2} p,$$

bu yerda p endi termodinamik bosim bo'lib, odatda θ va ρ ning «holat tenglamasi» bilan beriladi, λ va μ – ommaviy va kesishish yopishqoqliklari, α – termal parametr, k – termal o'tkazuvchanlikdir. Bu yerda I odatda dastlabki holatidan haroratning o'zgarishi sifatida talqin qilinadi. (8.11), tenglamasida $\mathbf{D}$ deformatsi-

ya tezligida chiziqli bo'lgani uchun, $(8.11)_1$ Newton suyuqligi deb ataladi. $(8.11)_2$ tenglamasi klassik Fyurje qonunidir. Quyidagi shakllarni qabul qilamiz:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) &= 0 \\ \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} \mathbf{v} &= -\operatorname{grad} p + (\lambda + \mu) \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{v} + \\ &+ \mu \Delta \mathbf{v} - \alpha \operatorname{grad} \theta, \\ \rho \theta \left(\rho^{-2} p \dot{\rho} + \frac{\partial \eta}{\partial \theta} \dot{\theta} \right) &= k \Delta \theta + r + \lambda (\mathbf{r} \cdot \mathbf{D})^2 + 2\mu \mathbf{r} \cdot (\mathbf{D}^2).\end{aligned}\quad (8.12)$$

Bu yerda $\dot{\rho} = d\rho/dt$, $\dot{\theta} = d\theta/dt$ va $\operatorname{tr} \mathbf{D} = \operatorname{div} \mathbf{v}$. Tipik chegara va dastlabki shartlar quyidagi shaklda:

$$\rho(\mathbf{x}, 0) = \rho_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{v}_0(\mathbf{x}), \quad \theta(\mathbf{x}, 0) = \theta_0(\mathbf{x}), \quad (8.13)$$

berilgan ma'lumotlar uchun, $\rho_0, \mathbf{v}_0, \theta_0$ bilan $\mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$ va

$$\begin{aligned}\mathbf{n} \cdot (-p \mathbf{I} + \lambda \operatorname{div} \mathbf{v} \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{D}) &= \mathbf{g}(\mathbf{x}, t) \quad \Gamma_1 \times (0, \tau), \\ \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \quad \Gamma_2 \times (0, \tau) \\ -\mathbf{n} \cdot \mathbf{k} \nabla \theta &= \mathbf{q} \quad \Gamma_3 \times (0, \tau)\end{aligned}\quad (8.14)$$

bu yerda $\mathbf{g}, \hat{\mathbf{v}}, \hat{\mathbf{q}}$ berilgan chegara ma'lumotlari va $\mathbf{n}$ domen Ω ga perpendikulyar bir birlik vektordir va $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \partial\Omega$ chegarasining qismlari hisoblanadi.

8.3. Issiqlik o'tkazuvchanlik

Hozircha harakatni va deformatsiyani e'tiborga olmaganimizda, tashqi manbadan isitilayotgan qattiq jismlarni ko'rib chiqamiz. Biz Helmholtz erkin energiyasi (7.13) va konstitutiv tenglamalarga (7.19) qaytamiz. Konstitutiv tenglamalar quyidagicha qabul qilinadi:

$$\psi_0 = -\frac{\alpha}{2}(\theta - \theta_0)^2 - \beta(\theta - \theta_0) + \gamma(\theta_0), \quad (8.15)$$

Bu yerda α va β ijobiy doimiylar, θ_0 berilgan bir xil dastlabki harorat va $\gamma(\theta_0)$ esa faqat θ_0 ga bog'liq bo'lgan doimiydir. Issiqlik oqimi quyidagi ko'rinishda beriladi:

$$q_0 = -k \nabla(\theta - \theta_0) \quad (8.16)$$

Shunda,

$$\eta_0 = -\frac{\partial \psi_0}{\partial \theta} = \alpha(\theta - \theta_0) + \beta, \quad (8.17)$$

$$S = \rho_0 \frac{\partial \psi_0}{\partial E} = \theta.$$

Materialning o'ziga xos issiqligi bir birlik massa materialning ichki energiyasining o'zgarishi va o'zgarmas deformatsiya gradiyentida F haroratning birlik o'zgarishiga bo'lgan o'zgarishi bilan aniqlanadi va quyidagicha aniqlanadi:

$$c = \frac{\partial e_0}{\partial \theta}, \quad (8.18)$$

bu yerda e_0 dastlabki konfiguratsiyadagi birlik massa boshiga ichki energiyadir. ρ_0 aniqlashidan foydalanib, biz shuni osonlik bilan ko'rsatamiz:

$$c = \theta \frac{\partial \eta_0}{\partial \theta} = \alpha \theta. \quad (8.19)$$

Nihoyat, energiya saqlanish tenglamasiga o'tish (masalan, (5.5)), bizda:

$$\rho_0 \dot{e}_0 = \rho_0 \frac{\partial e_0}{\partial \theta} \dot{\theta} = \rho_0 c \dot{\theta} = -\text{Div} q_0 + r_0 = -\text{Div}(-k \nabla \theta) + r_0$$

yoki

$$\rho_0 c \frac{\partial \theta}{\partial t} - \nabla \cdot k \nabla \theta = r_0. \quad (8.20)$$

bu klassik issiqlik tenglamasi. Umuman olganda, kishi o'ziga xos issiqlik $c = \alpha \theta \approx \alpha \theta_0$ ni ishlatishi mumkin.

8.4. Elastiklik nazariyasi

Biz deformatsiyalanadigan jismni B kuchlar ta'siri ostida ko'rib chiqamiz (jism kuchlari $\mathbf{f}$ va 2-qism chegarasidagi kontakt kuchlari $\sigma(\mathbf{n}, \mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{x}) \delta\Omega$). Jism gomogen va izotrop bo'lgan materialdan yasalgan va faqat izotermal ($\theta = \text{o'z-garmas}$) va adiabatik ($\mathbf{q} = 0$) jarayonlarga duchor bo'ladi. Yagona konstitutiv tenglama:

$$\psi = \text{erkin energiya} = \Psi(\mathbf{X}, t, \theta, \mathbf{E}) = \Psi(\mathbf{E}) \quad (8.21)$$

Ψ birlik hajm uchun erkin energiyani bildiradi: $\bar{\Psi} = \rho_0 \Psi$. Shunday qilib, kuchlanish uchun konstitutiv tenglama:

$$\mathbf{S} = \left. \frac{\partial \tilde{\Psi}(\mathbf{E})}{\partial \mathbf{E}} \right|_{\text{sym}} \quad (8.22)$$

Bu holda, erkin energiya saqlangan energiya funksiyasi yoki deformatsiya energiya funksiyasi deb ataladi. Chunki $\tilde{\Psi}(\cdot)$ va $(\partial \psi / \partial \mathbf{E})$ kuzatuvchini o'zgartirganda invariant bo'lishi kerak va B izotrop bo'lgani uchun, $\Psi(\mathbf{E})$ $\mathbf{E}$ invariantlariga bog'liq:

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{E}) = W(I_E, I_E, III_E) \quad (8.23)$$

chunki $\mathbf{E} = (\mathbf{C} - \mathbf{I})/2$, biz shuningdek $\tilde{\Psi}$ ni $\mathbf{C}$ ning invariantlari funksiyasi sifatida ham yozishimiz mumkin:

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{E}) = W(I_E, I_E, III_E) \quad (8.24)$$

Shunday qilib, kuchlanish uchun holat tenglamasi quyidagicha:

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \frac{\partial W}{\partial I_E} \cdot \frac{\partial I_E}{\partial \mathbf{E}} + \frac{\partial W}{\partial I_E} \cdot \frac{\partial I_E}{\partial \mathbf{E}} + \frac{\partial W}{\partial III_E} \cdot \frac{\partial III_E}{\partial \mathbf{E}} = \\ &= \frac{\partial W}{\partial I_C} \cdot \frac{\partial I_E}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial W}{\partial I_C} \cdot \frac{\partial I_C}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial W}{\partial III_C} \cdot \frac{\partial III_C}{\partial \mathbf{C}}. \end{aligned} \quad (8.25)$$

Biz quyidagilarni qayd etamiz:

$$\frac{\partial I_E}{\partial \mathbf{E}} = \mathbf{I},$$

$$\frac{\partial \mathbf{I}_E}{\partial \mathbf{E}} = (\text{tr } \mathbf{E}^{-1}) \mathbf{I} - \mathbf{E}^{-T} \text{Cof } \mathbf{E}, \quad (8.26)$$

$$\frac{\partial \text{III}_E}{\partial \mathbf{E}} = \text{Cof } \mathbf{E}.$$

Kuchlanish energiyasi saqlangan energiya potensialidan kelib chiqadigan materiallar giperelastik materiallar deb ataladi.

Boshqaruvchi tenglamalar (4.14)ni eslang:

$$\text{Div} \left((\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}) \frac{\partial W}{\partial \mathbf{E}} \Big|_{\text{sym}} \right) + \mathbf{f}_0 = \rho_0 \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2}, \quad (8.27)$$

bu yerda

$$\mathbf{F} = (\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}),$$

$$G_k = G_k(q, p, f, T), \quad k = 1, 2, \dots, K, \quad (8.28)$$

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T + \nabla \mathbf{u}^T \nabla \mathbf{u}).$$

Chiziqli elastiklik uzluksiz mexanikaning eng muhim va keng qo'llaniladigan nazariyalaridan biri kichik deformatsiyalar taxminlaridan kelib chiqqan elastiklik tenglamalarining chiziqli versiyasi bilan bog'liq. Bu holda:

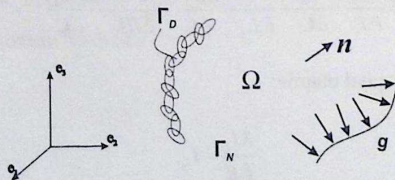
$$\mathbf{E} \approx \mathbf{e} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T),$$

$$W = \frac{1}{2} E_{ijkl} e_i e_j, \quad (8.29)$$

$$S = \frac{\partial W}{\partial e_i} = E_{ijkl} e_j = E_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l}$$

va biz taxmin qilamiz:

$$E_{ijkl} = E_{jikl} = E_{ijlk} = E_{klij}. \quad (8.30)$$



8.2-rasm. Muvozanatdagi elastik jism

Shunda, kichik deformatsiyalar uchun bizda quyidagilar mavjud:

$$\frac{\partial}{\partial X_j} \left(E_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial X_l} \right) + f_o = \rho_0 \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \quad (8.31)$$

Izotrop materiallar uchun, bizda quyidagilar mavjud:

$$E_{ijkl} = \lambda \delta_j \delta_k + \mu (\delta_k \delta_j + \delta_l \delta_k), \quad (8.32)$$

bu yerda λ , μ Lamé konstantalari:

$$\lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}, \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)}, \quad (8.33)$$

E Young moduli va ν Poisson koeffitsiyentidir. Shunda

$$S = \lambda (\text{tr } E) I + 2\mu E = \lambda \text{div } u I + 2\mu (\nabla u)_{\text{sym}}. \quad (8.34)$$

Agar (8.34) o'rinli bo'lsa va jism statik muvozanatda bo'lsa ($\partial^2 u / \partial t^2 = 0$), unda (8.31) Lamé elastostatika tenglamalariga aylanadi. Tarkibiy shaklda, ular quyidagicha yozilishi mumkin:

$$\lambda \frac{\partial^2 u_i}{\partial X_l \partial X_l} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_l}{\partial X_l \partial X_i} + \frac{\partial^2 u_k}{\partial X_l \partial X_k} \right) = -f_{oi}, \quad 1 \leq i, k \leq 3. \quad (8.35)$$

Chiziqli elastostatikaning odatiy model chegaraviy qiymat masalasi 8.2-rasm-dagi jism bilan tavsiya etiladi. Jism chegara yuzasining bir qismi Γ_D da harakatlarga qarshi qotib qolgan, chegaraning qolgan qismida, $\Gamma_N = \partial\Omega \setminus \Gamma_D$, Tuzilma gravitatsiya ta'sirida tana kuchlariga duchor bo'lgan f_o ta'sir qiladi. Shunda, tenglamalar (8.35) quyidagi chegaraviy shartlar bilan kengaytiriladi:

$$u_i = 0 \quad \Gamma_D$$

$$n_j E_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial X_l} = g_i \quad \Gamma_N \quad (8.36)$$

II QISM. ELEKTROMAGNIT MAYDON NAZARIYASI VA KVANT MEXANIKASI

9-BOB. ELEKTROMAGNIT TO'LOQLAR

9.1. Kirish

Hozirgi klassik elektr va magnetizm ilmi moddiy obyektlar elektr zaryadi deb ataladigan xosiyatga ega bo'lishi mumkinligini tan oladi – bu obyektlarni tashkil etuvchi asosiy zarralarning ichki xususiyatidir. Kundalik hayotda uchraydigan obyektlardagi zaryadlar ko'zga tashlanmasligi mumkin, chunki obyekt elektr zaryadsiz bo'lib, ikki xil zaryadni – musbat zaryad va manfiy zaryadni teng miqdorda tashiydi. Atomlar musbat zaryadlangan protonlar, manfiy zaryadlangan elektronlar va elektr neytral neytronlardan iborat bo'lib, proton va neytronlar atomning yadrosiga birikkan.

9.2. Elektr maydonlari

Zaryadlarning bir-biri bilan o'zaro ta'sirini matematik ifodalash Coulomb qonunidan boshlangan bo'lib, 1783-yili Charles Augustin de Coulomb tomonidan eksperimentlar asosida (ammo aslida Henry Cavendish tomonidan avvalroq kashf etilgan) taklif etilgan. U quyidagicha bayon etiladi: Ikki zaryadlangan zarrachani (yoki nuqta zaryadlarni) q_1 va q_2 kattaliklarda, ular orasidagi masofa esa r deb olaylik. Ular orasidagi elektrostatik tortilganlik yoki turtilganlik kuchi zaryadlarning kattaligi

$$F = k \frac{|q_1| |q_2|}{r^2}, \quad (9.1)$$

bu yerda k doimiy, odatda quyidagi shaklda ifodalanadi:

$$k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 8.99 \times 10^9 \text{ N m}^2 / \text{C}^2$$

bu yerda ϵ_0 o'tkazuvchanlik doimiyligi:

$$\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} (\text{N m}^2 / \text{C}^2)^{-1}$$

bu yerda S Coulomb deb ataladigan birlik zaryadning SI o'lchovi bo'lib, u bir sekundda sim orqali 1-Ampere tok natijasida o'tkaziladigan zaryad miqdori sifatida ta'riflanadi. Bu k tanlovining sababi keyinroq tushuntiriladi.

Jacksonga ko'ra [29], kuchning masofaga teskari kvadrat bog'liqligi (Coulomb qonuni) kuchayish darajasi kamida 24 marta oshishi ma'lum.

Zaryadning ikki muhim xususiyati quyidagicha:

1. Zaryad kvantlashtirilgan: e bir elektron yoki protonning elementar zaryadi bo'lsin, eksperimentlardan ma'lum bo'lgan

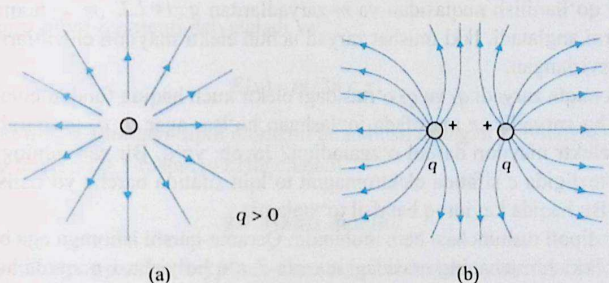
$$e = 1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$$

unda har qanday musbat yoki manfiy zaryad q quyidagicha shaklda bo'ladi:

$$q = \pm ne, \quad n = 1, 2, 3, \dots (n \in N).$$

Elektr zaryadining «kvantlashtirilgan» ekanligi (ya'ni e ning butun son ko'payuvchisi sifatida aniqlanganligi) ba'zilar tomonidan «jismoniy dunyoning eng chuqur sirlaridan biri» deb hisoblanadi (qarang, Jackson [29, 251-bet]).

2. Zaryad saqlanadi: Tizim yoki obyektidagi umumiy zaryad saqlanadi va qo'shimcha zaryadlangan zarralar tizimga qo'shilmasa, doimiy bo'ladi. Biz bu g'oyaga keyingi bobda qaytamiz.

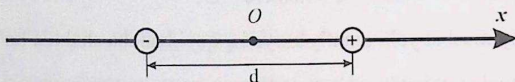


9.1-rasm. (a) Tekislikdagi musbat zaryad q va P dan chiquvchi elektr maydon chiziqlari. (b) P va Q nuqtalardagi teng musbat zaryadlar q_1 va q_2 tomonidan hosil qilingan elektr maydon

Elektr maydonining asosiy tushunchasi elektr zaryadlari tomonidan hosil qilingan kuch maydoni bilan yaqindan bog'liqdir. q_1 fazodagi P nuqtada joylashgan musbat nuqta zaryadni anglatsin. Tasavvur qiling, ikkinchi musbat nuqta zaryad q_2 P ga yaqin Q nuqtada joylashgan. Coulomb qonuniga ko'ra, q_1 q_2 ga tortishuvchi elektrostatik kuch qo'llaydi. Kuchlarning bu vektor maydoni elektr maydoni deb ataladi. Biz aytamizki, q_1 uni o'rab turgan fazoda elektr maydoni E ni o'rnatadi, shunday qilib Q nuqtadagi E kattaligi P dan Q ga bo'lgan masofaga bog'liq va yo'nalishi P dan Q ga bo'lgan yo'nalishga va P dagi q_1 elektr belgisiga bog'liq bo'ladi. Amaliyotda E nuqtada q_0 musbat sinov zaryadi natijasidagi elektrostatik kuch F ni baholash orqali aniqlanadi (9.1(a)-rasmga qarang). Keyin $E = q_0^{-1} F$.

Demak, E Newtonlar/Coulomblar (N/C) birliklariga ega. Elektr maydonining kataligi, shuning uchun, nuqta zaryadi q ga bog'liq ravishda quyidagicha bo'ladi:

$$|q_0|^{-1} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{|q_1| |q_0|}{r^2} \right) = \frac{|q_1|}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$



9.2-rasm. Chiziqdagi teng va qarshi zaryadlar

m uchun bunday zaryadlar,

$$E(x) = q_0^{-1} \sum_{i=1}^m F_{0i}(x) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^m q_i \frac{x - x_i}{|x - x_i|^3}, \quad (9.2)$$

F_{0i} q_0 qo'llanilish nuqtasidan va m zaryadlardan q_i , $i = 1, 2, \dots, m$ x_i nuqtalarda gi kuchlarni anglatadi. Ikki musbat zaryad uchun elektr maydon chiziqlari 9.1(b) rasmda tasvirlangan.

Ikki ta nuqta zaryadi q_1 va q_2 o'rtasidagi elektr kuch haqida fundamental savol tug'iladi, bu zaryadlar r masofada joylashgan bo'lsa: agar q_2 q_1 ga qarab harakatlansa, elektr maydon darhol o'zgaradimi? Javob: yo'q. Bir zaryadning ta'siri yorug'lik tezligida c sifatida elektromagnit to'lqin sifatida barcha yo'nalishlarda tarqaladi. Bu haqida keyinroq batafsil to'xtalamiz.

Elektr dipoli tushunchasi ham muhimdir. Qarama-qarshi ishoraga ega bo'lgan q zaryadli ikki zarrachaning orasidagi masofa d , o'q bo'yicha x nuqtada hosil qiladigan elektr maydoni quyidagicha ifodalanadi:

$$E(x) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{(x - d/2)^2} - \frac{1}{(x + d/2)^2} \right) i$$

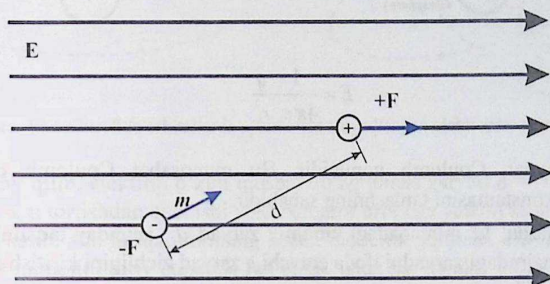
bu yerda i x -o'qi bo'yicha bir birlik vektori (9.2-rasmga qarang). Agar $x > d$ bo'lsa, elektr maydon quyidagicha soddalashtiriladi:

$$E(x) = \frac{1}{2\pi\epsilon_0} \frac{qd}{x^3} i$$

9.3-rasmda ko'rsatilgan ikki o'lcovli holatni ko'rib chiqamiz, unda ikki zaryadlangan zarracha E elektr maydoniga botgan bo'lib, bu uzoqdagi zaryad tufay-

lidir. Albatta, $|\mathbf{F}|$ kattalikdagi parallel qarshi yoʻnaltirilgan kuchlar tomonidan bir pallaga olib kelinadi. Bu palla, m , quyidagicha berilgan:

$$m = q d i \quad (9.3)$$



9.3-rasm. E elektr maydonida d masofada joylashgan teng va qarshi zaryadlar

va bu elektr dipol momenti deb ataladi va

$$E(x) = m / 2\pi \varepsilon_0 x^3. \quad (9.4)$$

E elektr maydonidagi dipol momenti bilan hosil qilingan τ aylanish momenti $m \times E$ ga teng, bu 9.3-rasmdan kelib chiqadi.

9.3. Gauss qonuni

Zaryadlangan jismlarning asosiy xususiyati shundaki, yuqorida taʼkidlanganidek, zaryad saqlanadi. Bir jismning zaryadi boshqasiga oʻtkazilishi mumkin, ammo umumiy zaryad oʻzgarmaydi. Bu kuzatuvga hech qanday istisno topilmagan. Zaryad saqlanishi gʻoyasi Gauss qonunida ifodalangan, bu cheklangan doimiy umumiy zaryadning yuza orqali elektr maydoni oqimi bilan muvozanatlashganini tasdiqlaydi. Bu faqat yuqorida qayd etilgan zaryad saqlanishi xususiyatining qayta bayonidir.

Elektr maydoni E ni chegara yuzasi $\partial\Omega$ orqali oʻtkazish qobiliyati va umumiy oqimi Ω cheklangan mintaqada joylashgan umumiy zaryad q_Ω ga teng boʻlishi kerak.

$$q_\Omega = \oint_{\partial\Omega} \varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} dA, \quad (9.5)$$

bu yerda $\mathbf{n}$ $\partial\Omega$ ga birlik normal va q_Ω $\partial\Omega$ yuzasi bilan cheklangan Ω mintaqadagi umumiy zaryaddir.

Gauss qonuni va Coulomb qonuni o'rtasidagi munosabat darhol aniqlanadi: Ω radiusi r bo'lgan, markazida musbat nuqta zaryadi q ni o'z ichiga olgan sfera bo'lsin va E yuzada doimiy kattalik E ga ega bo'lsin. Shunda

$$\varepsilon_0 \oint_{\vec{e}(\text{sphere})} \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} dA = \varepsilon_0 E (4\pi r^2) = q$$

shunday qilib

$$E = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{q}{r^2}$$

bo'lib, bu aynan Coulomb qonunidir. Bu munosabat Coulomb qonunida $k = 1/(4\pi\varepsilon_0)$ konstantasini tanlashning sababidir.

Ko'p hollarda, Ω mintaqadagi umumiy zaryad q_Ω shunday taqsimlanadiki, har bir birlik hajmdagi zaryadni ifoda etuvchi ρ zaryad zichligini kiritish ma'nosi-ga ega bo'ladi. Shunda

$$q_\Omega = \int_\Omega \rho dV, \quad (9.6)$$

va Gauss qonuni quyidagicha bo'ladi

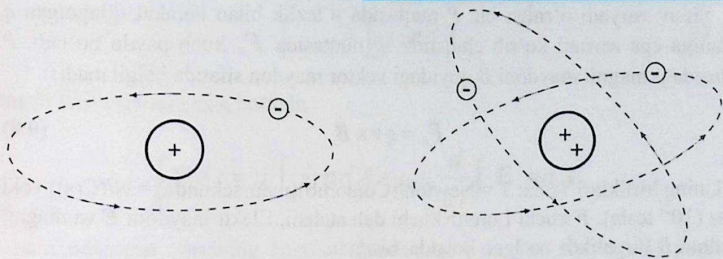
$$\oint_{\partial\Omega} \varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} dA = \int_\Omega \rho dV. \quad (9.7)$$

9.4. Elektr potensial energiyasi

Agar elektrostatik kuch zarracha tizimi ichidagi ikki yoki undan ko'p zaryadlangan zarrachalar o'rtasida ta'sir qilsa, tizimga shunday elektrostatik potensial energiya U berilsa, U dagi har qanday o'zgarish ΔU elektr kuchlar ish olib boradi. Birlik zaryad uchun potensial energiya (yoki zaryad q sabab bo'lgan) elektr potentsiali yoki kuchlanish V deb ataladi: $V = U/q$. V volt birliklariga ega, 1 volt = 1 joul/coulomb.

9.4.1. Atom modellari

Zaryadlangan zarralar o'rtasidagi tortish va itarish kuchlari to'g'ridan to'g'ri klassik Rutherford atom modeliga olib keladi. Ushbu modelga ko'ra, atom kichik bir Quyosh tizimi kabi tasavvur qilinadi, unda manfiy zaryadga ega bo'lgan elektronlar (e) musbat zaryadlangan yadro atrofida orbitada harakatlanadi (9.4-rasmga qarang).



9.4-rasm. Yadro atrofida orbitallarda aylanuvchi zaryadlangan elektronlar atom modeli

Shunday qilib, elektron o'zini musbat qo'zg'almas zaryad $q = +e$ ga yaqinlashtirganda, u tortishdan qochishi yoki barqaror orbitaga yetishi mumkin, zaryad atrofida aylanib, shu tariqa atomning sodda modelini yaratadi. Bu sodda model Bohr kvant modelini joriy etganida rad etildi, unda har qanday atom uchun elektronlar faqat aniq energiyaga ega bo'lgan kvant holatlarida yoki energiya qatlamlarida mavjud bo'lishi mumkin. Elektronning bir qavatdan boshqasiga o'tishi faqat kvant sakrashida darhol ro'y berishi mumkin. Bunday sakrashda energiya o'zgarishi aniq, bu elektromagnit nurlanish ftoni sifatida chiqariladi (bu haqda keyinroq ko'proq ma'lumot beriladi). Keyin Bohr modeli Schrödingerning ehtimol zichligi modeli bilan yaxshilandi, biz buni keyingi bobda ko'rib chiqamiz.

9.5. Magnit maydonlar

Qanday qilib zaryadlangan obyektlar elektr maydonlarini yaratasa, magnitlar $\mathbf{B}$ vektor maydonini yaratadi, bu magnit maydon deb ataladi. Bunday maydonlar elektr bilan zaryadlangan zarralarning harakati yoki elektronlar kabi elementar zarralarning ichki xususiyati sifatida yaratiladi. Bu so'nggi holatda magnit maydonlar zarralarning asosiy xususiyatlari sifatida, massasi, elektr zaryadi va hokazo bilan taniladi. Ba'zi materiallarda barcha elektronlarning magnit maydonlari bekor qilinib, umumiy magnit maydon bermaydi. Boshqa materiallarda ular birlashib, material atrofida umumiy magnit maydonini hosil qiladi.

Magnit maydonlari uchun «monopol» analogiyalar mavjud emas.

Elektr maydonlari kabi, ya'ni «magnit monopollari» yo'q, bu magnit maydonini belgilangan to'xtovchi sinov zaryadini qo'yish va zarraga ta'sir qilayotgan kuchni o'lchash orqali magnit maydonini aniqlashga olib keladi. Magnitning pol-yarligi qanday qilib yagona nuqtada mavjud bo'lishi mumkinligini tasavvur qilish qiyin bo'lsa-da, Dirac shunday magnit dipollari mavjud bo'lsa, elektr zaryadining kvant tabiati tushuntirilishi mumkinligini ko'rsatdi. Biroq, ko'plab urinishlarga qaramay, magnit dipollarining mavjudligi hech qachon yaqqol isbotlanmagan. Bu fakt elektromagnetizm nazariyasining matematik tuzilishiga kuchli ta'sir ko'rsa-

tadi. Sinov zaryadi o'rniga biz P nuqtasida v tezlik bilan harakat qilayotgan q zaryadiga ega zarrani ko'rib chiqamiz. P nuqtasida F_B kuch paydo bo'ladi. P nuqtasidagi magnit maydoni B quyidagi vektor maydon sifatida belgilanadi:

$$F_B = qv \times B. \quad (9.8)$$

Uning birliklari Tesla: $T = \text{Newton}/(\text{Coulomb})(\text{metr}/\text{sekunda}) = \text{N}/(\text{C}(\text{s}))$ yoki gauss (10^{-4} tesla). F kuchi Lorentz kuchi deb ataladi. Elektr maydoni E va magnit maydoni B birgalikda bo'lgan holatda, bizda:

$$F_B = q(E + v \times B),$$

v ba'zan v/c bilan almashtirilgan holda, c esa vakuumdagi yorug'lik tezligi. Elektr zaryadlarining harakati tok deb atalganidan buyon, B turli zaryad harakatlari uchun tok i bilan ifodalanishi osonlikcha ko'rsatiladi. Ampere qonuni har qanday yopiq kontur S da tekislikda quyidagini tasdiqlaydi:

$$\oint_C B \cdot ds = \mu_0 i_{\text{enclosed}},$$

bu yerda μ_0 o'tkazuvchanlik doimiysi, $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ T} \cdot \text{m} / \text{A}$ va i_{enclosed} – tekislikdagi C bilan chegaralangan sohada tekislikka perpendikulyar ravishda harakatlanayotgan umumiy tok miqdoridir. Tok – bu elektr zaryadlarining (zaryadlangan zarralarning), odatda elektronlarning oqimi bilan namoyon bo'ladigan hodisa va jismoniy miqdor sifatida elektr zaryadining oqimini o'lchashdir. U A birliklari (Ampere) bilan belgilanadi, bu yuza orqali bir soniyada bir Coulomb zaryadning o'tkazilishini o'lchashdir. Zaryadning to'g'ri chiziq bo'yicha harakatlanishi uchun $|B| = \mu_0 i / 2\pi R$, bu yerda R cheksiz chiziqdan perpendikulyar masofa.

Ampere qonuni elektr oqimidagi o'zgarish natijasida yuzaga kelgan magnit maydonini hisobga olmaydi. Bu hisobga olinganda, yuqoridagi tenglik Ampere–Maxwell qonuniga almashtiriladi:

$$\oint_C B \cdot ds = \mu_0 i_{\text{enclosed}} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{d}{dt} \Phi_E, \quad (9.9)$$

bu yerda Φ_E elektr oqimi,

$$\Phi_E = \int_A E \cdot n \, dA$$

yopiq kontur C bilan cheklangan A maydoniga birlik normal bo'lgan holda. (9.6) dagi kabi zaryad zichligini ρ sifatida ta'riflash an'anasiga amal qilgan holda, biz shuningdek tok oqimi zichligini j sifatida ta'riflashimiz mumkin:

$$i_{\text{enclosed}} = \int_A \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} dA. \quad (9.10)$$

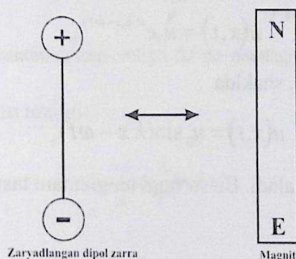
shunda (9.9) quyidagicha bo'ladi:

$$\oint_C \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = \mu_0 \int_A \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} dA + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{d}{dt} \int_A \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} dA.$$

Zaryadlangan zarraning harakati qanday qilib magnit maydonini yaratsa, magnit maydonining o'zgarishi ham shunday qilib elektr maydonini yaratadi. Bu induksiyalangan elektr maydoni deb ataladi va Faraday qonuni bilan tavsiflanadi: zaryad q bo'lgan zarrani yopiq kontur C bo'ylab A maydon bilan n birlik normal bo'lgan holda harakatlanishini ko'rib chiqing. Shunda $\mathbf{B}$ elektr maydoni $\mathbf{E}$ ni induksiylaydi, shundayki:

$$\oint_C \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} = -\frac{d}{dt} \int_A \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} dA. \quad (9.11)$$

Magnit materiallarida qutblar va turtki kuchlari mavjudligi sababli, magnit struktura magnit dipollar shaklida mavjud bo'lishi mumkin. Magnit monopollar mavjud emas. Shuning uchun



9.5-rasm. Elektr dipoli magnit orqali yuzaga kelgan dipolga o'xshash

Sababi, yopiq Gauss yuzasi orqali magnit oqimi Noll bo'lishi kerak:

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} dA = 0. \quad (9.12)$$

Bu magnit maydonlari uchun Gauss qonuni deb ataladi.

Har bir elektronning ichki burchakcha momenti s mavjud bo'lib, uni spin burchakcha momenti deb ataymiz va ichki spin magnit dipol momenti μ , quyidagi formula bilan bog'liq:

$$\mu = -\frac{e}{m}s, \quad (9.13)$$

bu yerda e elementar zaryad (1.6×10^{-19} C), m elektronning massasi (9.11×10^{-31} kg).

9.6. To'liqlarning ba'zi xususiyatlari

To'liqin tushunchasi kundalik tajribalardan yaxshi tanish. Umumiy holda, to'liqin fazoda ma'lum vaqt davomida tarqaladigan ayrim jismoniy miqdordagi buzilish yoki tashvishlanishdir. Jumladan, akustik to'liqin fazoda va vaqtdagi bosim o'zgarishlarini ifoda etadi, bu ovoz uchun mas'uldir; suv to'liqlari suv yuzasining ma'lum vaqt oralig'idagi harakatini ifoda etadi; elektromagnit to'liqlar, ma'lum bo'lganidek, vaqt davomida elektr va magnit maydonlarining evolyutsiyasini xarakterlaydi, lekin ular harakat qilish uchun hech qanday vositaga muhtoj emas, chunki ular mukammal vakuumda yorug'lik tezligida tarqaladi.

Matematik jihatdan, biz u to'liqinni joylashuv x (yoki $x = (x_1, x_2, x_3)$ uch o'lchamda) va vaqt t funksiyasini joriy qilish orqali tasvirlashimiz mumkin. Umuman olganda, to'liqlar oddiy sinusoid funksiyalarning superpozitsiyasi sifatida ifodalanishi mumkin, shuning uchun to'liqin nazariyasi uchun qurilish bloklari quyidagi shakldagi funksiyalardan iborat:

$$u(x, t) = u_0 e^{i(kx - \omega t)}, \quad (9.14)$$

yoki soddalashtirish uchun, shaklda

$$u(x, t) = u_0 \sin(kx - \omega t), \quad (9.15)$$

bular yassi to'liqlar deb ataladi. Bu so'nggi tenglamani tasvirlash uchun 9.7-rasm keltirilgan. Bu yerda

$$\begin{aligned} u_0 &= \text{to'liqinning amplitudasi,} \\ k &= \text{burchak to'liqin soni,} \\ \omega &= \text{burchak chastotasi.} \end{aligned} \quad (9.16)$$

Shuningdek, biz quyidagini aniqlaymiz:

$$\begin{aligned} \lambda &= 2\pi / k = \text{to'liqin uzunligi,} \\ T &= 2\pi / \omega = \text{davr (tebranish)} \end{aligned} \quad (9.17)$$

To'liqinning chastotasi ν quyidagicha aniqlanadi:

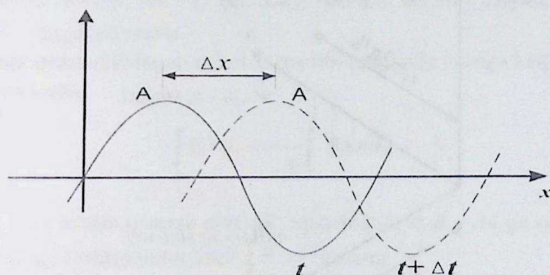
$$\nu = 1 / T. \quad (9.18)$$

To'liqning tezligi v to'liq namunasi harakat tezligi sifatida ta'riflanadi, bu 9.6-rasmda ko'rsatilgan. A nuqtasi to'liqin tog'i ustida o'z pozitsiyasini saqlab qolganligi sababli, to'liqin chapdan o'ngga harakatlanganda, quyidagi miqdor:

$$\varphi = kx - \omega t$$

doimiy bo'lishi kerak. Shunday qilib,

$$\frac{d\varphi}{dt} = 0 = k \frac{dx}{dt} - \omega$$



9.6-rasm. To'liqin frontining vaqt oralig'i Δt davomidagi inkremental harakati

Shunday qilib, to'liqin tezligi:

$$v = \frac{\omega}{k} = \frac{\lambda}{T} = \lambda v. \quad (9.19)$$

Hajm

$$\varphi = kx - \omega t \quad (9.20)$$

to'liqinning fazasidir. Quyidagi ko'rinishdagi ikki to'liqin:

$$u_1 = u_0 \sin(kx - \omega t) \quad \text{va} \quad u_2 = u_0 \sin(kx - \omega t + \varphi)$$

bir xil amplituda, burchak chastotasi, burchak to'liqini, to'liqin uzunligi va davrga ega, lekin fazasi φ ga farqlanadi. Bu to'liqinlar superpozitsiya qilinganda quyidagi interferensiyani hosil qiladi:

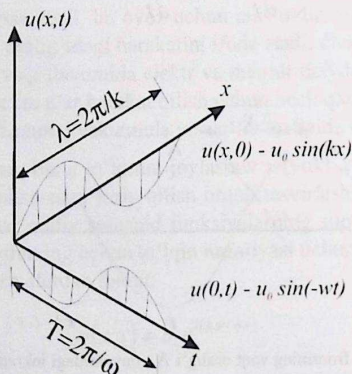
$$u(x, t) = u_1(x, t) + u_2(x, t) = (2u_0 \cos \varphi / 2) \sin(kx - \omega t + \varphi / 2). \quad (9.21)$$

- • $\varphi = 0$ bo'lganda, amplituda ikki barobarga ortadi va to'liq uzunligi va davri o'zgarmasligicha qoladi (konstruktiv interferensiya).

- • $\varphi = \pi$ bo'lganda, to'liqlar bir-birini bekor qiladi ($u(x,t) \equiv 0$) (destruktiv interferensiya).

Quyidagilarni kuzating:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -\omega^2 u_0 \sin(kx - \omega t)$$



9.7-rasm. Quyidagi shakldagi oddiy tekis to'liqning xususiyatlari

$$u(x,t) = u_0 \sin(kx - \omega t)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -k^2 u_0 \sin(kx - \omega t)$$

shu sababli u giperbolik to'liq tenglamasining ikkinchi darajali hosilasiga mos keladi:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \left(\frac{\omega^2}{k^2} \right) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad (9.22)$$

va yana ω / k to'liq tezligi sifatida tanilgan.

9.7. Maxwell tenglamalari

Vakuumdagi elektr va magnit maydonlarini E va B ni ko'rib chiqing. Quyidagi fizik qonunlarni eslab qoling:

Gauss qonuni (Sirt $\partial\Omega$ bilan o'ralgan Ω hajmdagi zaryadni saqlash qonuni)

$$\varepsilon_0 \int_{\partial\Omega} \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} dA = q_\Omega = \int_\Omega \rho dx, \quad (9.23)$$

bu yerda $\mathbf{n}$ – sirtning har bir elementiga perpendikulyar birlik vektor,

dA – sirt elementining yuzasi,

ρ – zaryad zichligi, $\partial\Omega - \Omega$ hajmda joylashgan umumiy zaryad,

$dx = d^3x$ – hajm elementi.

Faraday qonuni (Magnit oqimi o'zgarishi natijasida yuzaga kelgan induktiv elektromotor kuch)

$$\int_C \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} = - \frac{d}{dt} \int_A \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} dA \quad (9.24)$$

bu yerda $C - A$ sirtini qamrab oluvchi yopiq kontur va $\mathbf{n} - dA$ ga normal birlik vektor. Umumiy elektromotor kuch $\int_C \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s}$ ga teng.

Ampere-Maxwell qonuni (Tok i tomonidan hosil qilingan magnit maydon)

$$\begin{aligned} \int_C \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} &= \mu_0 i_{\text{enclosed}} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{d}{dt} \left(\int_A \mathbf{E} \times \mathbf{n} dA \right) = \\ &= \mu_0 \int_A \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} dA + \mu_0 \varepsilon_0 \int_A \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} dA, \end{aligned} \quad (9.25)$$

bu yerda $C - A$ sirtini qamrab oluvchi yopiq kontur, $\mathbf{j}$ – tok zichligi va $\mathbf{n} - dA$ ga normal birlik vektor.

Magnit monopollarning yo'qligi

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} dA = 0 \quad (9.26)$$

bu yerda $\partial\Omega$ – chegaralangan hududni o'rab turuvchi sirt $\Omega \subset \mathbb{R}^3$.

Gauss qonuni (9.23) va (9.26) hamda Stoks qonuni (9.24) va (9.25) ga qo'llanilganda va hosil bo'lgan integrallarning natijasi deyarli hamma joyda Nollga teng bo'lishida quyidagi tenglamalar sistemasiga kelinadi:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} &= \rho, \\
 \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\
 \nabla \times \mathbf{B} &= \mu_0 \mathbf{j} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \\
 \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0.
 \end{aligned}
 \tag{9.27}$$

Bular Maxwellning vakuumdagi klassik elektromagnetizmning tenglamalaridir. Bu yerda ∇ va *grad, div, rot* kabi operatorlar o'rtasida farq qilinmaydi.

Vakuumdin boshqa materiallarda, o'tkazuvchanlik ε va magnit o'tkazuvchanlik μ Ω dagi joylashuv x ga bog'liq bo'lishi mumkin va ular konstitutiv tenglamalarni qondirishi kerak:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{D} &= \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} - \text{elektron yoyilish maydoni,} \\
 \mathbf{H} &= \mu_0^{-1} \mathbf{B} - \mathbf{M} - \text{magnit maydon,}
 \end{aligned}
 \tag{9.28}$$

bu yerda $\mathbf{B}$ endi magnit induksiyasi, $\mathbf{P}$ – polarizatsiya vektori va $\mathbf{M}$ – magnit yoyilish. Keyin tenglamalar quyidagicha qayta yoziladi. $\mathbf{D}$, $\mathbf{H}$, $\mathbf{B}$ va $\mathbf{j}$ tenglamalari

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho_f, \\
 \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\
 \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0, \\
 \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{j}_f + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}
 \end{aligned}
 \tag{9.29}$$

bu yerda ρ_f va $\mathbf{j}_f$ mos ravishda masshtablangan zaryad va tok zichliklari. Kvant va relyativistik ta'sirlar inobatga olinganda, birinchi va uchinchi tenglamalarga qo'shimcha qadam kiritiladi va $\partial/\partial t$ o'rniga umumiy moddiy hosila ishlatiladi:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla$$

bu yerda $\mathbf{v}$ muhit tezligi. $\mathbf{j} = 0$ deb olsak, unda:

$$\frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{B} = \nabla \times \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}$$

shundan quyidagi to'liq tenglamasi kelib chiqadi:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \frac{1}{\mu_0 \epsilon_0} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = 0 \quad (9.30)$$

Quyidagidan: biz to'liq tenglamasiga erishamiz, bu yerda ∇ Laplacian operatori:

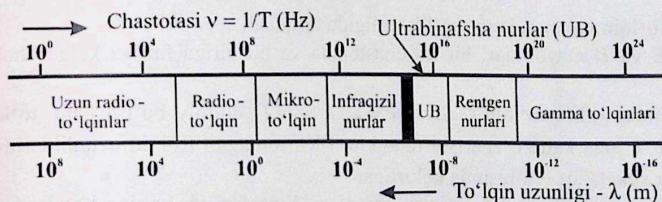
$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \Delta \mathbf{E} = \nabla(\rho_0 / \epsilon_0) - \Delta \mathbf{E}$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \frac{1}{\mu_0 \epsilon_0} \Delta \mathbf{E} = -\frac{1}{\epsilon_0} \nabla \rho \quad (9.31)$$

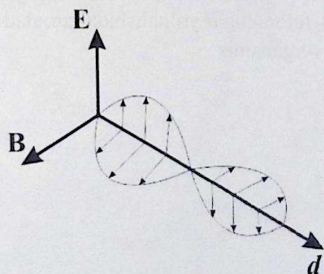
(9.22) bilan solishtirsak, elektromagnit buzilishlarining tarqalish tezligi aniq ekanligini ko'ramiz.

$$c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} = 3.0 \times 10^8 \text{ m/s}, \quad (9.32)$$

Elektromagnit to'liqlar spektri



9.8-rasm. Elektromagnit to'liqlar spektri



9.9-rasm. Elektromagnit tekis to'liqning d yo'nalishida tarqalish komponentlari

Bu vakuumdagi yorug'lik tezligiga teng, ya'ni:

Elektromagnit buzilishlar (elektromagnit to'liqlar) vakuumda yorug'lik tezligida tarqaladi (radiatsiyalanadi).

9.8. Elektromagnit to'liqlar

Elektr (yoki magnit) maydonining to'liqlanishi ko'rib chiqamiz. Bir necha turdagi to'liqlar mavjud, biz esa bu yerda tekis to'liqlarni ko'rib chiqamiz. Tekis to'liqlar – bu uzluksiz chastotali to'liqlar bo'lib, ularning doimiy faza yuzalarini tarqalish yo'nalishiga perpendikulyar holdagi parallel yoyilish maydonlari tashkil etadi.

Elektromagnit to'liq bugungacha aniqlangan xususiyatlarga ega bo'lgan to'liqlar shaklida tarqaladi:

- Elektr maydonning E komponenti va magnit maydonning B komponenti to'liqning tarqalish yo'nalishiga normaldir:

$$d = E \times E / |E \times B|$$

- E magnit maydonga B normaldir:

$$E \cdot B = 0$$

- To'liq vakuumda yorug'lik tezligida tarqaladi.

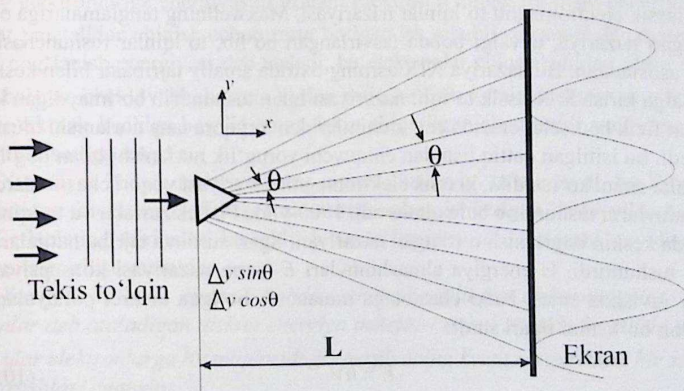
- E va B maydonlari bir xil chastotada va bir-biriga fazaga kelgan holda bo'ladi.

Shunday qilib, to'liq tezligi $c = \omega/k = \lambda/T$ doimiy bo'lsa ham, to'liq uzunligi λ juda katta o'zgarishi mumkin. Elektromagnit to'liq uzunliklarining mashhur shkalalari 9.8-rasmda keltirilgan.

Ayrim elektromagnit to'liqlar, masalan, X nurlari va ko'zga ko'rinadigan yorug'lik atom yoki yadroviy o'lchamdagi manbalardan tarqaladi. Elektronning bir qobiqdan boshqa qobiqqa kvant ko'chishi elektromagnit to'liqni chiqaradi. To'liq energiya paketi – fotonning d yo'nalishida tarqaladi. Biz ushbu hodisani keyingi boblarda batafsil o'rganamiz.

10.1. Kirish izohlari

Kvant mexanikasi klassik fizika yordamida fizik hodisalarni tavsiflashda yuzaga kelgan ikkita asosiy paradoksni hal qilish uchun ilgari surilgan nazariya sifatida paydo bo'ldi. Birinchidan, jismoniy hodisalarni to'liqlar (optika, to'liq mexanikasi) yoki zarralar («korpuskulalar» yoki zarralar mexanikasi) yoki ikkalasi bilan tasvirlash mumkinmi? Ikkinchidan, atom miqyosida, tajriba dalillari fizik miqdorlar faqat diskret qiymatlarni olishi mumkinligini tasdiqlaydi; ular kvantlangan deb aytiladi, vaqt bo'yicha uzluksiz emas va shuning uchun qiymatlarda bir lahzali sakrashlarni qabul qilishi mumkin. To'liqlar ν chastotasi va to'liq raqami k (yoki davr $T = 1/\nu$ va to'liq uzunligi $\lambda = 2\pi / k$) bilan tavsiflanadi, zarrachaning harakati esa uning umumiy energiyasi Ye va uning impulsi p bilan tavsiflanadi. Ushbu to'liq-zarracha paradoksini hal qilish boshida boshlangan kashfiyotlar ketma-ketligi orqali sodir bo'ldi. 1926-yilda Schrödinger tenglamasining paydo bo'lishi va keyingi yillarda Dirac va boshqalar tomonidan qo'shimcha takomillashtirish bilan kvant mexanikasining paydo bo'lishiga olib keldi. Ushbu bobdagi maqsadimiz Schrödinger tenglamasiga olib keladigan argumentlar va hosilalarni taqdim etish hamda fizik hodisalarning to'liq va zarracha tavsiflarining ikkito-monlama tabiatini ochib berishdir.



10.1-rasm. Yorug'lik nurining difraktsiyasi

10.2. To'liqin va zarrachalar mexanikasi

Biz oldingi bobda ko'rganimizdek, tabiatda kuzatilgan asosiy fizik hodisalarni to'liqlar konsepsiyasi – optika va yorug'likni tushunishdan tortib, radioto'liqlar, X nurlari va h.k. orqali tushuntirish mumkin. Bir xil fazada tarqalayotgan to'liqlar oldinroq ta'riflangan superpozitsiya xususiyatiga ega va bu xususiyat tufayli yorug'likning difraksiyasi tushuntiriladi, bu 10.1-rasmda ko'rsatilgan. U yerda mashhur bo'lgan ikki yoriq tajribasi tasvirlangan bo'lib, unda yorug'lik nurlari hosil qilinadi va ular devorda joylashgan, orasida masofa Δy bo'lgan ikki ingichka yoriqqa tushadi. Ma'lumki, yorug'lik – bu ma'lum bir to'liqin uzunligiga ega elektromagnit to'liqini. Yorug'lik difraksiya burchagi θ ostida tirqichdan chiqadi va devorga parallel joylashgan ekranga urilib, ekranda turli fazalardagi to'liqlarning bir-birini kuchaytirishi yoki so'ndirishi natijasida qorong'i va yorug' chiziqlardan iborat naqsh hosil qiladi. To'liqlarning yuqori va pastki yoriqlardan chiqqan yo'l uzunliklari orasidagi farq $\delta = \Delta y \sin \theta = \xi \lambda$ bo'lib, bu yerda ξ butun son n bo'lsa, bu yorug' chiziqqa to'g'ri keladi va $\xi = n + \frac{1}{2}$ bo'lsa, bu qorong'i chiziqqa to'g'ri keladi. Bundan tashqari, ekrandagi ikki yorug' chiziq orasidagi masofa $\lambda L / \Delta y$, bu yerda L yoriqdan ekrangacha bo'lgan masofadir. Bunday kuzatuvlar to'liqin nazariyasi orqali izchil va prognoz qilish mumkin bo'lgan hodisalar sifatida qaraladi. Biz bu kuzatuv tajribasiga keyinchalik yana qaytamiz.

Klassik elektromagnit to'liqlar nazariyasi, Maxwellning tenglamalariga olib keladigan nazariya, avvalgi bobda tasvirlangan bo'lib, to'liqlar tushunchasiga qat'iy asoslangan. Bu nazariya XIX asrning oxirida amaliy tajribalar bilan keskin ziddiyatga kirishdi. Klassik to'liqin nazariyasi bilan tushuntirib bo'lmaydigan kuzatilgan fizik hodisalar orasida eng muhimlaridan biri qora tana nurlanishi muammosi edi, bu isitilgan qattiq jismdan chiquvchi yorug'lik nurlanishi bilan bog'liq. Tajribalar shuni ko'rsatdiki, klassik elektromagnit nazariyasi yuqori chastotalardagi kuzatuvlarni tushuntirib bera olmas edi. 1900-yilda Planck zarralar va to'liqlar o'rtasida keskin bog'lanish o'rnatgan nazariyani ilgari surdi va tajriba natijalarini to'g'ri tushuntirdi. U energiya almashinuvi E (zarra nazariyasi konsepsiyasi) doimiy ravishda emas, balki chastotaga mutanosib bo'lgan diskret porsiyalarda namoyon bo'lishini ilgari surdi:

$$E = h\nu \quad (10.1)$$

Bu yerda proporsionallik doimiy qiymati h Planck doimiysi deb ataladi. Chunki $\nu = \omega / 2\pi$, bizda $E = \hbar\omega$ bo'ladi, bu yerda

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05457 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

Doimiy qiymat h tajribaviy ma'lumotlarga muvofiq kelish uchun aniqlab qo'yildi.

Messiahga ko'ra [37, b. 11], Planckning natijasiga nisbatan umumiy munosabat shunday ediki, go'yoki energiya almashinuvlari nurlanish va qora tana o'rtasida kvantlar orqali sodir bo'ladi. Besh yil o'tgach (1905-yilda), Einsteinning fotoelektrik ta'sir tushuntirishi Planck nazariyasini tasdiqladi va umumlashtirdi hamda energiya – yorug'lik – to'lqin munosabatlarining fundamental kvant tuzilmasini yaratdi. Fotoelektrik ta'sir tajribada kuzatiladi, bunda ishqoriy metall vakuumda qisqa to'lqinli yorug'likka duchor qilinadi. Yuza elektronlar shaklida manfiy zaryadni chiqarib, musbat zaryadlanadi. Juda aniq tajribalar elektronlarning umumiy toki va tezligini o'lchash imkonini beradi. Kuzatuvlar tasdiqlaydiki:

1. Chiqarilgan elektronlar tezligi yorug'likning ν chastotasiga (elektromagnit to'lqiniga) bog'liq.

2. Elektronlarning chiqishi nurlanish boshlanishi bilan darhol kuzatiladi (klassik nazariyaga qarshi);

3. Elektronning energiyasi materialga bog'liq holda doimiy $h\nu_0$ bilan, chastotaga ν proporsional bo'lib, proporsionallik doimiysi h , Planck doimiysi:

$$E = h\nu - h\nu_0$$

Ushbu natija quyidagicha izohlanadi: Har bir yorug'lik kvanti metallga urilib, uning elektronlariga energiyasini uzatadi. Elektron o'zining bir qism energiyasini ($-h\nu_0$) metalldan chiqish uchun zarur bo'lgan ish sababli yo'qotadi. Bu materialning bog'lanish energiyasi deb ataladi, bu elektronlar chiqarilishidan oldin ma'lum bo'lgan cheklovchi chastota ν_0 dan ortiq bo'lishi kerak. Elektronning tezligi yorug'likning kuchiga bog'liq emas, lekin chiqarilgan elektronlar soni yorug'lik kvantlari soniga tengdir.

Xususiyyat Planck nazariyasining umumiylashuvini ta'minlaydi, bu Einstein tomonidan fotoelektrik effektini tushuntirish uchun ishlatilgan. 1914-yilda Meyer va Gerlachning tajribalari bu taklif bilan to'liq mos edi. Xulosani quyidagicha umumlashtirilish mumkin:

Yorug'lik to'lqini, aynan 9-bobda muhokama qilingan elektromagnit to'lqin, fotonlar deb ataladigan diskret energiya paketlari oqimi sifatida ko'rilishi mumkin, ular elektronlarga $h\nu$ miqdoridagi energiyaning kvant o'zgarishini bir zumda yetkazishlari mumkin:

Bu fakt atom tuzilishi modelining sezilarli darajada qayta ko'rib chiqilishiga olib keldi. Planck va Einstein nazariyalari to'lqinlarning zarra tabiatiga ishora qilgani kabi, zarralarning to'lqin tabiati ham 1923-yilda de Brogliening dissertatsiyasida ilgari surilgan edi. U yerda elektronlar va boshqa zarralar bilan bog'liq to'lqinlar mavjud bo'lib, ularning to'lqin uzunligi λ zarra impulsining p teskari

proporsionaliga mos kelishi nazariya qilingan edi, bu yerda proporsionallik konstantasi yana Planck doimiysi bilan ifodalangan:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (10.2)$$

De Broglie nazariyasiga ko'ra, zarracha difraksiyasi to'liq difraksiyasi ruhi-da bo'lishi mumkin, bu hodisa oxir-oqibat 1927-yilda Devisson va Germer to-monidan kuzatilgan.

Biz kuzatamizki, fotonlar vakuumda yorug'lik tezligi c da harakat qilgani uchun, fotonning impulsi p va uning energiyasi E o'rtasidagi bog'lanish $E = pc = p\lambda\nu$ bo'ladi va shunday qilib $p = h/\lambda$ bu de Broglie munosabati (10.2) bilan muvofiq keladi. Shuningdek, relyativistik nazariyadan foydalangan holda, Einstein foton-larning massaga ega emasligini ko'rsatdi, bu ham tajribalar bilan muvofiq. Atom-larning chastotalari yoki shu bilan ekvivalent bo'lgan energiya spektrlari bo'yicha tajribalar, Rutherfordning klassik modelida taxmin qilingan doimiy spektrga qar-shi bo'lib, diskret spektrlarning mavjudligini tasdiqlaydi. Shunday qilib, zarralar (modda) va yorug'lik o'zaro ta'sirida ham uzilishlar uchraydi.

10.3. Heisenbergning nomuayyanlik prinsipi

Planck–Einstein munosabati (10.1) va de Broglie munosabati (10.2) fizik ho-disalarni zarracha xususiyatlari yoki to'liq xususiyatlari bilan izohlash mumkin-ligini ko'rsatadi. Ammo de Brogliening (10.2) munosabati tez orada ajoyib bir xulosaga olib keldi. 1925-yilda Heisenberg bir zarracha, ayniqsa, elektronning bir vaqtning o'zida ham pozitsiyasini, ham impulsini aniqlab bo'lmashligini ang-ladi. Tabiiy hodisalarning to'liq va zarracha nazariyalari birgalikda, ya'ni o'zaro to'ldiruvchi deb ataladi, agar tajribada zarracha xususiyati isbotlansa, uning bir vaqtning o'zida to'liq xususiyatini isbotlash mumkin emas. Shuningdek, to'liq xususiyatini isbotlash zarracha xususiyatini bir vaqtning o'zida o'rnatish mumkin emasligini anglatadi.

Klassik misol bu g'oyalarni ifoda qilishda elektronlar nurini teshikdan o'tka-zishda difraksiyani o'z ichiga oladi, bu 10.1-rasmda ko'rsatilgan. Elektronlar Δy kenglikdagi teshikdan o'tganda, nur difraksiyaga uchraydi va burchak θ bo'yicha kengayadi. Elektron de Broglie to'liqini bilan ifodalanadi, uning to'liqin uzunligi $\lambda = h/p$. Demak,

$$\Delta y \sin \theta \approx \lambda = h/p$$

Shuningdek, y yo'nalishidagi impuls o'zgarishi:

$$\Delta p = \Delta p_y = p \sin \theta$$

Demak,

$$\Delta y \Delta p_y \approx h. \quad (10.3)$$

Teshikdagi elektronning aniq pozitsiyasini aniqlab bo'lmaydi, shuningdek, impulsning o'zgarishini Δp_y yoki $h / \Delta y$ dan ko'ra aniqroq aniqlab bo'lmaydi.

Bu munosabat Heisenbergning nomuayyanlik prinsipiga misol bo'ladi. Kvant mexanikasidan shunday tuzilmaga ega boshqa natijalar ham chiqarilishi mumkin. Quyida ayrim misollar va izohlar keltirilgan:

1. Yanada aniqroq tahlil quyidagilarni keltirib chiqaradi:

$$\Delta y = \sigma_y = \sqrt{\langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2}, \quad \Delta p = \sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2},$$
$$\Delta y \Delta p = \sigma_y \sigma_p \geq \frac{1}{2} h. \quad (10.4)$$

bunda $\langle y \rangle$ y atrofidagi pozitsiyaning o'rtacha o'lchovini anglatadi va shu kabi ta'riflar p ga ham qo'llanadi. σ_y va σ_p esa y va p dagi mos standart og'ishlardir.

2. Shuningdek, quyidagicha ko'rsatish mumkin:

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{1}{2} h. \quad (10.5)$$

Shunday qilib, pozitsiya va impulsni vaqtda lokallashtirib bo'lmaganidek, energiya o'zgarishi ro'y beradigan vaqt oralig'ini va energiya o'zgarishini ham bir vaqtning o'zida aniqlab bo'lmaydi.

Bu mavzuga keyingi bobda qaytamiz va kengroq versiyasini muhokama qilamiz.

10.4. Schrödingerning tenglamasi

Bu yerda bizga Planck–Einstein munosabati (10.1), de Broglie munosabati (10.2) va Heisenberg nomuayyanlik prinsipi (masalan, (10.4) yoki (10.5)) tomonidan berilgan asosiy to'liqin-zarra munosabatlari taqdim etilgan. Bu faktlar tizimining, xususan, harakatdagi elektronning xatti-harakatini to'liq tasvirlash uchun, qandaydir to'liqin funksiyasi mavjud bo'lishi kerakligini, chunki zarrachaning dinamikasi to'liqin xususiyatlari bilan bog'liq ekanligini ko'rsatadi. Zarrachaning joylashuvi nomuayyan, shuning uchun eng yaxshi ehtimol bu zarrachaning ma'lum vaqtda, ma'lum joyda, masalan, x koordinatasida bo'lish ehtimolini bilishdir. Shunday qilib, to'liqin funksiyasi qandaydir ma'noda shunday ehtimollik zichligi funksiyasini aniqlashi kerak. Nihoyat, to'liqin fazasini aniqlovchi parametrlar (masalan, k, ω yoki λ, ν) zarracha parametrlari (masalan, E, p) bilan (10.1) va (10.2) munosabatlariga muvofiq bog'liq bo'lishi kerak.

10.4.1. Erkin zarracha holati

Avval erkin zarrachaning to'liqin tenglamasini ko'rib chiqsak (bundan keyin relyativistik ta'sirlarni hisobga olmaganda), biz to'liqin $\Psi = \Psi(x, t)$ monoxromatik tekislik to'liqlarining superpozitsiyasi (bu yerda bir fazo o'lchamida) ekanligidan boshlaymiz. Yuqorida aytib o'tganimizdek, tekis to'liqlar quyidagi shaklga ega:

$$\Psi(x, t) = \psi_0 e^{i(kx - \omega t)}$$

bu yerda ψ_0 amplituda. Unda umumiy to'liqin funksiyasi ushbu shakldagi to'liqlarning superpozitsiyasi bo'ladi. Endi to'liqin soni k va burchak tezligi ω energiya va impulsga mos ravishda $k = 2\pi / \lambda = p / \hbar$ va $\omega = 2\pi\nu = E / \hbar$ munosabatlari bilan bog'liq, bizning holatimizda:

$$\Psi(x, t) = \psi_0 e^{i(p x - E t) / \hbar}$$

Shunday qilib,

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi_0 e^{i(p x - E t) / \hbar} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi,$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p \psi_0 e^{i(p x - E t) / \hbar} = \frac{i}{\hbar} p \Psi.$$

Demak, E va p ψ_0 ni operatori sifatida qaralishi mumkin:

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

$$p = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi. \quad (10.6)$$

Erkin zarrachaning massasi m bo'lsa, umumiy energiya E kinetik energiyadir va u impuls p bilan quyidagi formula orqali bog'langan:

$$E = \frac{p^2}{2m}. \quad (10.7)$$

Demak, (10.6) tenglamani (10.7) ga kiritsak, to'liqin funksiyasi uchun quyidagi differensial tenglamani olamiz:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = 0. \quad (10.8)$$

Bu Schrödingerning erkin zarracha uchun tenglamasi.

Albatta, tekis to'liqlar superpozitsiyasi tasavvuri Ψ ning qo'llab-quvvatlash doirasi chegaralangan deb taxmin qiladi, ammo biz bu holatda bunday emasligini bilamiz. Shuning uchun biz domenni $R = (-\infty, +\infty)$ ga kengaytirishimiz va monoxromatik tekis to'liqlarning Fyure o'zgartirish turidagi superpozitsiyasini quyidagi shaklda olishimiz mumkin:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) e^{i(px - Et)/\hbar} dp, \quad (10.9)$$

Shundan, quyidagilarni olamiz:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} E \phi(p) e^{i(px - Et)/\hbar} dp, \\ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} p^2 \phi(p) e^{i(px - Et)/\hbar} dp. \end{aligned} \quad (10.10)$$

Munosabat $E = p^2 / 2m$ (10.8) tenglamasiga qaytib olib boradi, bu yerda $x \in \mathbb{R}$. Biz $\phi(p)$ ni keyinchalik talqin qilamiz.

To'liq funksiyasi kvant tizimining dinamik holatini to'liq aniqlaydi, ya'ni tizim holati haqidagi barcha ma'lumotlar Ψ ni bilish orqali chiqarib olinishi mumkin. Kvant nazariyasining asosiy maqsadi shundan iborat: Ψ ni boshlang'ich vaqt t_0 da bilib, keyingi vaqt t da Ψ ni aniqlash. Buni amalga oshirish uchun, biz Schrödingerning tenglamasini yechishimiz kerak.

10.4.2. R^n fazosida superpozitsiya

Endi n o'lchovli holatni ko'rib chiqaylik, $n = 1, 2$ yoki 3 . Bunda $\mathbf{p}x$ vektorga aylanadi, $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3)$ impuls vektori hisoblanadi. Biz Ψ ni quyidagi shaklda yozishimiz mumkin:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \psi_0 e^{i(\mathbf{p}x - Et)/\hbar}$$

va Schrödinger tenglamasini olamiz:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (10.11)$$

bu yerda Δ – Laplacian operatori:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}$$

Biz Ψ ni cheksiz sondagi to'liqlar superpozitsiyasi sifatida ifodalashimiz mumkin:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \int_{R^n} \varphi(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{x} - E)/\hbar} d\mathbf{p}$$

bunda $d\mathbf{p} = dp_1 dp_2 dp_3$, $t = 0$ deb olsak, boshlang'ich shart quyidagicha:

$$\Psi(\mathbf{x}, 0) = \varphi(\mathbf{x}) = \int_{R^n} \varphi(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} d\mathbf{p}$$

ya'ni, $\varphi(\mathbf{x})$ boshlang'ich ma'lumotlar $\Psi(\mathbf{x}, 0)$ ning Furye o'zgartirishidir (muhim bo'lmagan ko'paytirish konstantasi bilan birga).

10.4.3. Hamiltonian formasi

Schrödinger tenglamasini yozishning mashhur usuli Hamiltonianni kiritishdan iborat:

$$H(q, p) = E \quad (q \sim x),$$

Shunda Hamiltonian operatori quyidagicha yoziladi:

$$H(q, p) = H\left(q, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}\right)$$

va Schrödinger tenglamasi quyidagicha bo'ladi:

$$\left(H\left(q, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \right) + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi = 0. \quad (10.12)$$

10.4.4. Potensial energiya holati

Agar zarracha potensial energiya $V = V(q)$ bilan kuch ta'siri ostida bo'lsa, unda:

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q), \quad (10.13)$$

zarracha koordinatasi q bilan va Schrödingerning tenglamasi quyidagicha bo'ladi:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + V(q) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi = 0. \quad (10.14)$$

R^3 fazosida harakatlanuvchi zarracha uchun bu tenglama quyidagicha ko'rinishga ega:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(q) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi = 0. \quad (10.15)$$

10.4.5. Relativistik kvant mexanikasi

Relyativistik effektlarni qamrab olmasligimizga qaramay, bu holdagi to'liq tenglamasi osonlikcha kelib chiqadi, chunki bu holda erkin zarrachaning energiyasi quyidagicha beriladi:

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

Bu tenglamadan biz quyidagini olamiz:

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \Psi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (10.16)$$

Bu Klein-Gordon tenglamasi deb ataladi. Klein-Gordon kengaytmasi elektron kabi elementar zarralarning ichki spinini hisobga olmaydi. Dirac spinni erkinlikning qo'shimcha darajasi sifatida kiritdi, bu E^2 ning kvadrat ildizini hisoblash imkonini berdi va natijada relyativistik kvant mexanikasi tenglamasi – Dirac tenglamasi yuzaga keldi. Bu holatda to'liq funksiyasi skalyar qiymatli funksiyadan ko'ra, to'rt-komponentli spinor hisoblanadi. Norelyativistik kvant mexanikasida, biz o'zimizni chegaralaymiz, zarra spinining xususiyati postulat sifatida kiritiladi. Biz bu mavzuni 13-bobda batafsilroq muhokama qilamiz.

10.4.6. Schrödinger tenglamasining umumiy qo'yilishi

Ko'p zarrachali holatni bir o'lchamli erkin zarra holati bilan analogiyada qurish mumkin. Asosiy reja – dinamik sistema sifatida koordinatalar $q_1, q_2, \dots, q_N$ va impulsalar $p_1, p_2, \dots, p_N$ bilan N ta zarrachalar tizimini ko'rib chiqishdan iborat, bunda Hamiltonian funksionali:

$$H = H(q_1, q_2, \dots, q_N; p_1, p_2, \dots, p_N; t)$$

Bu dinamik tizimga mos keladigan kvant tizimi to'liq funksiyasi bilan ifodalanadi: $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t)$.

To'liq funksiyasi uchun Schrödinger tenglamasi quyidagicha ko'rinishga keladi:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H\left(q_1, q_2, \dots, q_N; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_2}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_N} \right) \right) \Psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t) = 0 \quad (10.18)$$

Qoidalar (10.17) energiya va impulsning differensial operatorlarga mosligini ko'rsatadi va faqat karteziyan koordinatalarda amal qiladi.

Schrödinger tenglamasi koordinatalar o'qlarining aylanishiga nisbatan invariant bo'lishi kerak.

10.4.7. Vaqtga bog'liq bo'lmagan Schrödinger tenglamasi

Umuman olganda, to'liq funksiyasi fazoviy to'liq funksiyasi $\psi(\mathbf{x})$ va garmonik vaqtga bog'liq komponentning qo'shilmasi sifatida yozilishi mumkin:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}) e^{-iEt/\hbar} \quad (10.19)$$

To ko'rinishning umumiy holda to'g'ri ekanligini tekshirish uchun Ψ ni $\psi(\mathbf{x})$ va istalgan funktsiyaning $\varphi(t)$ ko'paytmasi sifatida olishni faraz qilish mumkin. $\psi\varphi$ ni (10.15) ga kiritib, natijaviy tenglamani $\psi\varphi$ ga bo'lib, klassik argumentni qo'llab, $\mathbf{x}$ ning funksiyasi t ning funksiyasiga teng bo'lishi uchun ikkalasi ham doimiyga teng bo'lishi kerakligini aytib, biz $\varphi(t)$ quyidagi shaklda bo'lishi kerak degan xulosaga kelamiz: $\varphi(t) = \exp(iEt/\hbar)$ shuning uchun (10.19).

Shundan (10.19)dan quyidagini olamiz:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\hbar \frac{i}{\hbar} E \Psi = E \Psi$$

Shuning uchun

$$H\psi = E\psi \quad (10.20)$$

Bu vaqtga bog'liq bo'lmagan Schrödinger tenglamasi. U energiya E Hamiltonian operatorining egen qiymati va fazoviy to'liq ψ funksiyasi Hamiltonianing xos funksiyasi ekanligini belgilaydi.

10.5. To'liq tenglamasining boshlang'ich xususiyatlari

Biz Schrödinger tenglamasining asosiy va kirish darajasidagi o'rganilishini amalga oshiramiz, avval bitta zarracha uchun bir o'lchovli fazoda, so'ngra tahlilni umumlashtirib, funktsiyalar fazosi kontekstida taqdim etilgan umumiy ma-

tematik formalizmni ko'rib chiqamiz. Ushbu darajadagi muammolarni o'rganish uchun ajoyib manba Griffithsning «Kvant mexanikasiga kirish» kitobidir [21], lekin Bhorn [11] va Messiah [37] kitoblariga ham murojaat qilish mumkin.

10.5.1. Tahlil

Schrödinger tenglamasi bir o'lchovli x o'qi bo'ylab harakatlanayotgan, massasi m bo'lgan yagona zarrachaning dinamikasini boshqaradi. Bu zarracha V potentsialidan kelib chiqadigan kuchlarga ta'sir qiladi va tenglama quyidagicha ifodalanadi:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - V\Psi = 0, \quad (10.21)$$

bu yerda

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} - \text{Planck doimiysi} / 2\pi = 1.054573 \times 10^{-34} \text{ ds}$$

$\Psi = \Psi(x, t)$ – to'liq funksiyasi. (10.21) tenglamani yechish uchun, biz boshlang'ich shart kiritishimiz kerak:

$$\Psi(x, 0) = \varphi(x), \quad (10.22)$$

bu yerda φ belgilangan. Biz to'liq funksiyasi quyidagi xossalarga ega bo'lishini postulat sifatida qabul qilamiz:

$$\Psi^* \Psi = |\Psi(x, t)|^2 = \rho(x, t)$$

bu yerda $\Psi^* - \Psi$ ning kompleks birlashmasi va

$\rho(x, t)$ – ehtimoliy taqsimot funksiyasi Ψ bilan bog'liq bo'ladi,

$\rho(x, t)dx - t$ vaqtda x va $x + dx$ orasida zarrachani topish ehtimoli.

To'liq funksiyasi normalizatsiya qilinishi kerak, chunki ρ PDF (ehtimollik zichligi funksiyasi)dir:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (10.23)$$

10.1-taklif: Agar $\Psi = \Psi(x, t)$ Schrödinger tenglamasining (10.21) yechimi bo'lsa, unda:

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 0 \quad (10.24)$$

Isbot.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^*(x,t) \Psi(x,t)) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \right) dx. \end{aligned}$$

Biroq,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V \Psi \\ \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} &= -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V \Psi^* \end{aligned}$$

Shunday qilib,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 &= \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right). \end{aligned} \quad (10.25)$$

Shu sababli,

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \bigg|_{x \rightarrow -\infty}^{x \rightarrow \infty} = 0$$

chunki $\Psi, \Psi^* \rightarrow 0$ qachonki $x \rightarrow \pm\infty$ bo'lsa, (10.23) tenglama saqlanishi mumkin.

Shunday qilib, (10.24) munosabati to'liq funksiyasining qulay xususiyatidir. Bir marta normallashtirilgandan so'ng, u hamma t uchun normallashtirilgan.

10.5.2. Impuls

Muqaddam qayd etilganidek, impuls operator sifatida qaralishi mumkin:

$$p\Psi = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi. \quad (10.26)$$

Buni talqin qilishning yana bir usuli quyidagicha. Agar $\langle x \rangle$ zarrachaning x pozitsiyasining kutilgan qiymati bo'lsa, biz quyidagini olamiz:

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle x \rangle}{dt} &= \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) dx = \\
&= \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx = \quad ((10.25) \text{ ga ko'ra}) \\
&= -\frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx = \\
&= -\frac{i\hbar}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx = \\
&= \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx = \\
&= \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* p \Psi dx
\end{aligned}$$

Qismlarga bo'lish usuli bilan integralni hal qilamiz, biz 10.1 ning isbotida bo'lgani kabi, $\Psi, \Psi^*, \partial \Psi / \partial x, \partial \Psi^* / \partial x$ ni $x \rightarrow \pm \infty$ ga bog'liq deb olamiz. Oxirgi o'ng tomonni $\langle p \rangle / m$ deb belgilaymiz. Shunday qilib:

$$\langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* p \Psi dx. \quad (10.27)$$

Bu e'tiborga loyiq natijadir. Biz Heisenberg prinsipiga ko'ra kvant mexanika-sida zarrachaning impuls yoki pozitsiyasini aniq belgilab bera olmasak-da, p va x ning o'rtacha (kutilgan qiymati) zarrachalar dinamikasining klassik nazariyasida biz kutgan tarzda aniq bog'liqdir; ya'ni impuls massani tezlik bilan ko'paytiradi. Shuni tushunish kerakki, $\langle x \rangle$ ko'rib chiqilayotgan zarrachaning o'rtacha o'lchovi emas (Griffiths [21, 14-bet]). To'g'rirog'i, $\langle x \rangle$ bir xil Ψ holatidagi zarrachalar-ning o'rtacha joylashuvi. Bu Ψ bir xil holatdagi tizimlar bo'yicha o'rtacha ansambldir.

O'rtachalar orasidagi bu munosabatni yana davom ettirish mumkin. Agar $V(x)$ potensial bo'lsa, shunday qilib:

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

keyin

$$\begin{aligned}
 \frac{d\langle p \rangle}{dt} &= \frac{d}{dt} \int_R \Psi^* p \Psi dx = \int_R \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} p \Psi dx + \int_R \Psi^* p \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx = \\
 &= \int_R -\frac{1}{i\hbar} \Psi^* (Hp - pH) \Psi dx = \int_R \left(\Psi^* V \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} (V \Psi) \right) dx = \\
 &= \int_R \Psi^* \left(-\frac{\partial V}{\partial x} \right) \Psi dx = \\
 &= \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle.
 \end{aligned}$$

Demak,

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \langle F \rangle, \quad (10.28)$$

bu yerda $F = -\partial V / \partial x$ zarrachaga ta'sir qiluvchi kuchdir. Shuningdek, bu qiymatlar p ning o'rtacha yoki kutilgan qiymatlari Newtonning ikkinchi qonuniga amal qiladi.

Bhor zarrachalar dinamikasi uchun klassik mexanika va kvant nazariyasi o'rtasidagi bunday munosabatlarni muhim prinsip darajasida qabul qilish bilan tanilgan. Messiah [37, b. 29] bu prinsipni quyidagicha tasvirlaydi: «Klassik nazariya makroskopik jihatdan to'g'ri; ya'ni kvant uzilishlari cheksiz kichik deb hisoblanishi mumkin bo'lgan chegaralarda yuzaga keladigan hodisalarni hisobga oladi; barcha ushbu cheklovchi hollarda, aniq nazariya bashoratlari Klassik nazariyaning bashoratlari bilan mos kelishi kerak. «Aniq nazariya» bilan u kvant mexanikasini nazarda tutadi. U, shuningdek, shunday deydi: «Kvant nazariyasi katta kvant sonlari chegarasida klassik nazariyaga asimptotik yaqinlashishi kerak». Agar bu holat bo'lmasa, uzluksiz mexanika va elektromagnit maydon nazariyasining boy va juda muvaffaqiyatli makroskopik nazariyalari kamroq ahamiyatga ega bo'ladi.

10.5.3. To'liq paketlari va Fourier o'tkazmalari

Erkin x zarrachaning vakuumdagi to'g'ri chiziqli harakatini yana bir bor ko'rib chiqaylik. To'liq funksiyasi quyidagicha ifodalanadi:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar} = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}, \quad (10.29)$$

va $\psi(x)$ quyidagi tenglamani qanoatlantiradi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E \psi. \quad (10.30)$$

Yechim quyidagicha:

$$\Psi(x, t) = Ae^{ik(x - \hbar k t / 2m)}, \quad (10.31)$$

bu yerda

$$k = \pm \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (10.32)$$

Aniqki, $E = \hbar^2 k^2 / 2m = 2\pi^2 \hbar^2 / m \lambda^2$, shunday qilib, energiya λ kamaygan sari oshadi.

Ushbu maxsus yechim normallashtirilmaydi $\int_{\mathbb{R}} \Psi^* \Psi dx \rightarrow \infty$, shunday qilib erkin zarracha statsionar holatda bo'la olmaydi. Ushbu holatda spektr uzluksiz bo'lib, yechim quyidagi shaklda bo'ladi:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(k) e^{i(kx - \hbar k^2 t / 2m)} dk, \quad (10.33)$$

va bu quyidagiga olib keladi:

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(k) e^{ikx} dk, \quad (10.34)$$

Bu quyidagilarni bildiradi:

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx. \quad (10.35)$$

Tenglama (10.33) to'liqinni to'liqin paketlari yig'indisi sifatida xarakterlaydi. Bu sinusoidal funksiya φ funksiyasi bilan modulyatsiyalangan. Bu yerda φ to'liqin funksiyasi Ψ ning Fourier transformidir va $\Psi(x, 0)$ ning dastlabki qiymati φ ning teskari Fourier transformidir. Klassik mexanikadagi zarrachaning tezligi o'rniga, biz to'liqin paketlarining qutb tezligini olamiz.

10.6. To'liqin-impuls dualizmi

Klassik mexanikada zarrachaning dinamik holati har bir vaqtning har bir lahzasida uning x o'rnini va impuls p ni ko'rsatish orqali aniqlanadi. Kvant mexanikasida ma'lum bir mintaqada zarrachani topish ehtimolini faqat pozitsiyani o'lchashda aniqlash mumkin. Xuddi shunday, zarrachaning impulsini ham aniqlab

bo'lmaydi; impuls o'lchovini o'tkazishda impuls fazosining ma'lum bir hududida impulsni aniqlash ehtimolini aniqlashga umid qilish mumkin.

Hajmdagi impuls $\mathbf{p}$ ni topish ehtimolini aniqlash uchun $(\mathbf{p}, \mathbf{p} + d\mathbf{p})$ t belgilangan vaqt uchun Ψ to'lqin funksiyasining $\Phi(\mathbf{p})$ Fourier konvertatsiyasini ko'rib chiqamiz:

$$\Phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{R^n} \Psi(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} / \hbar} d\mathbf{x}, \quad (10.36)$$

$$\Psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{R^n} \Phi(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} / \hbar} d\mathbf{p}$$

bu yerda $d\mathbf{x} = dx_1 \dots dx_n$ va $d\mathbf{p} = dp_1 \dots dp_n$. Shunday qilib, to'lqin funksiyasi impuls $\mathbf{p}$ dagi to'lqinlarning $\exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} / \hbar)$ chiziqli kombinatsiyasi sifatida qaralishi mumkin, bu yerda koeffitsiyentlar $(2\pi\hbar)^{-n/2}$. Hajmda $\mathbf{p}$ impulsni topish ehtimoli $(\mathbf{p}, \mathbf{p} + d\mathbf{p})$:

$$\pi(\mathbf{p}) = \Phi^*(\mathbf{p})\Phi(\mathbf{p})$$

va bizda quyidagi shart bajarilishi kerak:

$$\int_{R^n} \Phi^*(\mathbf{p})\Phi(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = 1 \quad (10.37)$$

Shunday qilib, Fourier o'zgartirishi $\mathcal{F}: L^2(R^n) \rightarrow L^2(R^n)$ to'lqin funksiyasi va impuls to'lqin funksiyasi o'rtasida bir-biriga mos kelishni o'rnatadi. Tenglama (10.37) Plancherel teoremasidan kelib chiqadi:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \|\Psi\|^2 = \langle \mathcal{F}(\Psi) | \mathcal{F}(\Psi) \rangle = \langle \hat{\Psi} | \hat{\Psi} \rangle = \|\hat{\Psi}\|^2. \quad (10.38)$$

Bu yerda $\langle | \rangle = \langle \cdot | \cdot \rangle$ $L^2(R^n)$ da ichki ko'paytmani bildiradi, bu keyingi bobda batafsil muhokama qilinadi.

Φ va Ψ bilan bog'liq bo'lgan ehtimollik zichligini talqin qilish muhimdir. Har ikkala pozitsiya yoki impuls bo'yicha o'lchashni amalga oshirayotganda, ikkalasini ham tiniq aniqlash mumkin emas. Pozitsiya va impuls ehtimolini bashorat qilish deganda bir xil to'lqin funksiyasi Ψ bo'lgan juda ko'p M ekvivalent tizimlar ko'rib chiqilishi tushuniladi. Ularning har biridagi pozitsiyani o'lchash M cheksizlikka yaqinlashganda chegaradagi natijalarning $\Psi^*(\mathbf{x})\Psi(\mathbf{x})$ ehtimollik zichligini beradi. Xuddi shunday, $\Phi^*(\mathbf{x})\Phi(\mathbf{x})$ impulsni o'lchash natijalarining ehtimollik zichligini beradi.

10.7. Ilova: ehtimollik zichliklarining qisqacha

ko'rib chiqilishi

Schrödinger tenglamasining Ψ yechimi shundayki, $\Psi^*\Psi=|\Psi|^2$ ehtimollik zichligi funksiyasidir, ρ , zarracha ma'lum intervalda $(x, x+dx)$ bo'lish ehtimolini belgilaydi, ya'ni ρdx . Ehtimollik nazariyasining asosiy tushunchalarini qisqacha ko'rib chiqish o'rinlidir.

Biz, Ω deb nomlanuvchi obyektlar namunasi to'plamining bir to'plami, ya'ni namuna to'plami (yoki fazo) g'oyasidan boshlaymiz va Ω to'plamning barcha qism to'plamlari sinfi $U=U(\Omega)$ ni ko'rib chiqamiz. U , birlashmalar, kesishmalar va qism to'plamlarning to'ldiruvchilari ham U da qoladigan xossalarga ega bo'lishi kerak va bo'sh to'plam $\emptyset$ ham. U sinfi Ω ustida σ algebra va U dagi to'plamlar hodisalari deb ataladi. Keyinchalik, biz P xaritasini U dan birlik oraliqqa $[0,1]$ kiritamiz, bu quyidagi xossalarga ega:

$$P(A \cup B) = P(A) + P(B), \quad A \cap B = \emptyset,$$

$$P(A) + P(B) \geq P(A \cup B), \quad \forall A, B \in U,$$

$$P(\Omega) = 1,$$

$$P(\emptyset) = 0.$$

Bu xossalar P ni U ustida o'lchov bo'lishiga moslashtiradi. $P(A)$, $A \in U$ soni hodisaning ehtimolligi hisoblanadi. (Ω, U, P) uchligi ehtimollik fazosi deb ataladi.

Misol: Faraz qiling, bizda bitta kubik (yoki bir juft zar) bor, bu kubikda har bir tomonida odatdagi nuqtalar bilan ifodalangan oltita raqam bor $\square, \square, \square, \square, \square, \square$. Bu olti imkoniyat Ω to'plamini tashkil etadi. Biz kubikni stol ustiga tashlaymiz va kubik qaysi raqam bilan yuqoriga qarab tushganini ko'ramiz. Mumkin bo'lgan hodisalarning U fazosi Ω ning barcha kichik to'plamlari, shu jumladan Ω ning o'zi va $\emptyset$ ning 2^6 quvvat to'plamidir. (Chunki Ω olti a'zodan iborat, $2^6 = 64$ ta mumkin bo'lgan hodisalarni o'z ichiga oladi.)

Endi, U da ehtimollik P $[0,1]$ ichiga funksiyadir. Funksiya nima? Asosan, bu U elementlari, hodisalar va $[0,1]$ oralig'idagi sonlar o'rtasida munosabatni o'rnatadigan qoidani belgilovchi funksiyadir:

1. Har bir hodisa A $[0,1]$ ichida $P(A)$ tasviri bor.

2. Har bir bunday A uchun faqat bitta son $a \in [0,1]$ mavjud bo'lib, $P(A)$ ga mos keladi.

Shunday qilib, U da ehtimollikni aniqlash uchun bizga qoida kerak. Mana ba'zi misollar:

– Yuqoriga qaragan yuzning 4 ($\square$) bo'lish ehtimoli qanday? Standart javob hodisalar chastotasi bilan belgilanadi va 4 ehtimoli oltidan biri bo'lib, $P(\{4\}) = 1/6$.

– Yuqoriga qaragan qiyofa juft son bo'lish ehtimoli qanday? Oltita sondan uchtasi juft bo'lgani uchun, $P(A) = 3/6 = 1/2$.

– Raqam 7 bo‘lish ehtimoli qanday? Chunki $\{7\} \notin U$, bizda $P(\{7\})=0$.

– Yuqoriga qaragan qiyofa 1 va 6 orasida bo‘lish ehtimoli qanday? $P(\Omega)=1$.

Ehtimollik fazolari darhol kuzatilmaydi, shunday qilib biz ular bilan haqiqiy o‘zgaruvchi tushunchasidan foydalanamiz. Haqiqiy tasodifiy o‘zgaruvchi X bu Ω dan R ga xaritadir, shunday qilib, har qanday ochiq to‘plam $B \subset R$ uchun $X^{-1}(B) \in U$ mavjud bo‘ladi. Asosan, tasodifiy o‘zgaruvchining teskari tasviri $B \in R$ ga tegishli bo‘lgan har qanday ochiq to‘plamni σ algebra B ustida, bu R da Burel sigma-algebra deb ataladi, $A \in U$ ga tegishli hodisalarga xaritalaydi. Shunday qilib, odatda ehtimollik $P(X^{-1}(B))$ haqida gapirish mantiqiy, u quyidagicha yoziladi:

$$P(X \in B) = P(\{\omega : X(\omega) \in B\})$$

Bu noqulay belgi bo‘lib, shuning uchun biz uni haqiqiy qiymatli funksiyalar bilan bog‘liq ekvivalent tushuncha bilan almashtirishga harakat qilamiz. Bu tasodifiy o‘zgaruvchi X uchun taqsimot funksiyasi $F_X : R \rightarrow [0,1]$ ni kiritish orqali amalga oshiriladi, bu yerda:

$$F_X(x) = P(X \leq x)$$

$\forall A \in U, x \in R$. Bu quyidagicha o‘qiladi: X tasodifiy o‘zgaruvchisi berilgan bo‘lsa, X uchun ehtimollik taqsimoti funksiyasi har bir $F_X(x)$ da $x \in R$ qiymatlarini oladi, har qanday $A \in U$ hodisasi uchun $X(A) \leq x$ ehtimoliga teng.

Umuman olganda, X ni ehtimollik zichligi $\rho = \rho(x)$ funksiyasini kiritish orqali quyidagicha aniqlash mumkin:

$$F_X(x) = \int_{-\infty}^x \rho(y) dy$$

Funksiya ρ X uchun ehtimollik zichligi deb ataladi. Agar bunday funksiya mavjud bo‘lsa, u quyidagi xossalarga ega:

$$P(X \in B) = \int_B \rho(x) dx, \quad B \in B,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1.$$

Tasodifiy o‘zgaruvchi X ehtimollik zichligi ρ bo‘lsa, X ning o‘rtacha yoki kutilayotgan qiymati $\langle x \rangle$ bilan belgilanadi va quyidagicha aniqlanadi:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \rho(x) dx$$

Markaziy momentlar:

$$\mu_k = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle x \rangle)^k \rho(x) dx, \quad k = 1, 2, \dots$$

Xususiy holda, dispersiya quyidagicha aniqlanadi:

$$\sigma_x^2 = \mu_2 = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle x \rangle)^2 \rho(x) dx$$

va standart farqlanish $\sigma_x = \sqrt{\sigma_x^2} = \sqrt{\mu_2}$. Biz osongina tasdiqlashimiz mumkinki:

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

11-BOB. KVANT MEXANIKASIDA DINAMIK O'ZGARUVCHILAR VA KUZATILADIGAN KATTALIKLAR: MATEMATIK FORMALIZM

11.1. Kirish izohlari

Biz Schrödinger tenglamalarining yechimlari to'liqin funksiyalar $\Psi = \Psi(x, t)$ bo'lib, ular $|\Psi|^2 = \Psi' \Psi$ ning ehtimollik zichlik funksiyasi sifatida xususiyatga egaligini ko'rdik, ya'ni u o'rganilayotgan zarraning x nuqtada va $x+dx$ oralig'ida t vaqtda bo'lish ehtimolligini ifodalaydi. Bundan tashqari, to'liqin funksiyasi Ψ (yoki teng qadar momentli to'liqin funksiyasi $\Phi = \Phi(p, t)$) zarrachaning butun dinamik holati to'liq belgilanishini ifodalaydi. Endi biz ushbu g'oyalar asosida va kvant mexanikasining tegishli nazariy sistemasi yordamida zarrachalarning to'g'ri klassik modellari uchun qulay nazariy asosni yaratamiz.

Biz olib borgan barcha nazariy yechimlar R^d da aniqlangan funksiyalarga taalluqlidir ($d=1,2,3$), ammo natijalarning deyarli barchasini umumlashtirish R uchun ham isbotlash mumkin. x koordinatasi q bilan bir xilda ishlatiladi (yoki R da x bilan q), chunki q «faza fazosi»dagi umumlashtirilgan koordinatani klassik belgilashdir, bu yerda koordinata-impuls juftlari $(q, p) = (q_1, q_2, \dots, q_N, p_1, p_2, \dots, p_N)$ dinamik holatlarni belgilaydi. Biz dinamik o'zgaruvchilarni, masalan, impuls p ni operatorlar sifatida tez-tez ko'rib chiqamiz va natijaning operator xarakteri muhim bo'lganda, biz belgining ustidan tilda belgisini qo'yamiz (ya'ni impuls uchun p ga tegishli operator $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}$). Shunday qilib, $F = F(q, p)$ funksiyasi

$$\tilde{F}\left(q_1, q_2, \dots, q_N, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_1}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_2}, \dots, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_N}\right)$$

operatori bilan bog'langan. $(q_1, q_2, \dots, q_N)$ koordinatalar endi Kartizan koordinatalar deb tushuniladi, chunki operator yozuvi dinamik kattaliklarni koordinatalar o'zgarishiga (masalan, aylanishga) nisbatan invariant bo'lishi kerak. Haqiqatan ham, funksiyalarning oddiy ko'paytirilishi kommutativ bo'lsa-da, mos keladigan operatorlar o'zgarimasligi mumkin, shuning uchun noaniqlikning oldini olish uchun q , Dekart koordinatalari sifatida talqin qilinadi.

11.2. Hilbert fazolari $L^2(R)$ (yoki $L^2(R^d)$) va $H'(R)$ (yoki $H'(R^d)$)

To'liqin $|\phi|^2$ ning R ustidan integrallanishi (o «kvadrat integral») xususiyatiga ega bo'lishi kerakligi sababli, u quyidagi fazoga tegishli bo'lishi kerak:

$L^2(\mathbb{R})$ (yoki $L^2(\mathbb{R}^d)$) fazosi $u: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ funksiyalaridan iborat kompleks qiymatli o'lchovli ekvivalentlik sinflari $[u]$ fazosidir, $\mathbb{R}$ (yoki $\mathbb{R}^d$) da deyarli har joyda teng (ya'ni $v \in [u] \Rightarrow v = u$ o'lchov noll bo'lgan to'plamlardan tashqari hamma joyda) bo'lib, shundayki $|u|^2 = u^* u$ ($\mathbb{R}$ (yoki $\mathbb{R}^d$) da Lebeg integraliga ega).

Shunday qilib, $u \in L^2(\mathbb{R})$ bo'lishi u $\mathbb{R}$ da deyarli har joyda teng bo'lgan funksiyalar ekvivalentlik sinfini $[u]$ ifodalashini anglatadi va shuningdek, $\int_{\mathbb{R}} u^2 dx < \infty$ bo'lishi kerak.

$L^2(\mathbb{R})$ fazosi to'liq ichki ko'paytma fazosi bo'lib, $L^2(\mathbb{R})$ tarkibidagi ikki funksiya Ψ va φ uchun ichki ko'paytma quyidagicha aniqlanadi:

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi^* \varphi dx, \quad (11.1)$$

bu yerda ψ^* , ψ ning kompleks qo'shilishi. «To'liq» faza deb, biz har bir cheksiz elementlar ketma-ketligi $\{u_j\}_{j=1}^{\infty}$ ni tushunamiz, $j \rightarrow \infty$ ularning masofasi fazo o'lchami bo'yicha joylashgan, (ya'ni $\|u_j - u_k\| \rightarrow 0$ $j, k \rightarrow \infty$), ular doimiy fazoning bir element u ga konvergent bo'ladi. Bunday ketma-ketliklar Cauchy ketma-ketliklari deb ataladi. To'liq ichki ko'paytma fazolar Hilbert fazolari deb ataladi. Demak, $L^2(\mathbb{R})$ Hilbert fazosidir. $L^2(\mathbb{R})$ ga mos normalar quyidagicha:

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle}. \quad (11.2)$$

Ta'kidlash mumkinki, $L^2(\mathbb{R})$ reflektivdir (ayniqsa, Riesz teoremasi bo'yicha, har bir uzluksiz chiziqli funksional f $L^2(\mathbb{R})$ fazosida, yagona $u_f \in L^2(\mathbb{R})$ mavjud bo'lib, u holda $f(v) = \langle v, u_f \rangle$ va $\|f\|_{(L^2(\mathbb{R}))^*} = \|u_f\|$. Shuningdek, $L^2(\mathbb{R})$ zichdir, ya'ni uning har joydagi nuqtada sanoqli zichlik to'plamlari mavjud. Ya'ni, har qanday $u \in L^2(\mathbb{R})$ va har qanday $\varepsilon > 0$ uchun, $L^2(\mathbb{R})$ da cheksiz ketma-ketlik $\{u_n\}_{n=1}^{\infty}$ va $M > 0$ butun son mavjud bo'lib, $\|u_n - u\| < \varepsilon$ uchun hamma $n > M$. Biz keyingi bobda qanday qilib bunday sanoqli to'plamlar hisoblanishi mumkinligini ko'rsatamiz.

Shuningdek, biz $L^2(\mathbb{R}^d)$ da qisman hosilalarga ega bo'lgan funksiyalar fazolariga ham qiziqish bildirypmiz. Bu Sobolev fazosi:

$$H^1(\mathbb{R}^d) = \left\{ v \in L^2(\mathbb{R}^d) \text{ va } \frac{\partial v}{\partial x_i} \in L^2(\mathbb{R}^d), i = 1, 2, \dots, N \right\}. \quad (11.3)$$

Bu ham Hilbert fazosi bo'lib, uning ichki ko'paytmasi:

$$\langle \psi, \varphi \rangle_1 = \int_{\mathbb{R}^d} (\nabla \psi^* \cdot \nabla \varphi + \psi^* \varphi) d^d x, \quad (11.4)$$

bu yerda

$$\nabla \psi^* \cdot \nabla \varphi = \sum_{i=1}^d \frac{\partial \psi^*}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi}{\partial x_i}$$

va $d^d x = dx_1 dx_2 \dots dx_d$. Biz $L^2(\mathbb{R}^d)$ fazosida $H\psi$ bilan funksiyaning ichki ko'paytmasini yozganda, H dagi hosilalarni umumiy ma'noda olamiz. Demak,

$$\langle \varphi, H\psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \varphi^* \cdot \nabla \psi + V \varphi^* \psi \right) d^d x, \quad (11.5)$$

bu $H^1(\mathbb{R}^d)$ funksiyalari uchun silliq (silliq V uchun). Agar ψ va φ yetarlicha silliq bo'lsa, (11.5) ning qisman integrali quyidagicha keladi:

$$\begin{aligned} \langle \varphi, H\psi \rangle &= \int_{\mathbb{R}^d} \varphi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi \right) d^d x = \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \varphi^* H \psi d^d x. \end{aligned}$$

$L^2(\mathbb{R}^d)$ dagi qisman hosilalari $m \geq 0$ bo'lgan funksiya uchun, biz analogik ravishda fazolarni $H^m(\mathbb{R}^d)$ sifatida aniqlaymiz, bu yerda ichki ko'paytmalar ham xuddi shunday aniqlanadi.

11.3. Dinamik o'zgaruvchilar va Hermit operatorlari

Dinamik o'zgaruvchi – bu kvant tizimining fizik holatiga bog'liq bo'lgan qandaydir fizik xususiyatdir. Umuman olganda, biz holat $\mathbf{q}$ koordinatalari va $\mathbf{p}$ impuls (yoki N zarralar tizimi uchun $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N; \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N$) bilan tasvirlanadi, degan konvensiyani qabul qilamiz. Demak, dinamik o'zgaruvchi quyidagi funksiya hisoblanadi:

$$Q = Q(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N; \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N)$$

$\mathbf{p}_j$ impuls komponentlarini $\mathbf{p}_j = -i\hbar \partial / \partial \mathbf{q}_j$ operatorlariga bog'lash mumkin bo'lgani kabi, dinamik o'zgaruvchilar ham operatorlarni tavsiflaydi.

$$\tilde{Q} \left(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N, -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_1}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_2}, \dots, -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_N} \right)$$

Xuddi shu kabi, operatorni ham aniqlash mumkin:

$$\hat{Q}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2}, \dots, -i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_N}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N\right)$$

Kvant holati Ψ uchun dinamik o'zgaruvchi Q ning kutilgan qiymati yoki o'rta-cha qiymati $\langle Q \rangle$ bilan belgilanadi va agar $\langle \Psi, \Psi \rangle = 1$ bo'lsa quyidagicha aniqlanadi:

$$\begin{aligned}\langle Q \rangle &= \int_{\mathbb{R}} \Psi^* \tilde{Q} \Psi dq / \int_{\mathbb{R}} \Psi^* \Psi dq = \\ &= \frac{\langle \Psi, \tilde{Q} \Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \\ &= \langle \Psi, \tilde{Q} \Psi \rangle,\end{aligned}\quad (11.6)$$

Har qanday $A: L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ operatorlar Hermit operator deyiladi, agar

$$\langle \psi, A\varphi \rangle = \langle A\psi, \varphi \rangle \quad \forall \psi, \varphi \in L^2(\mathbb{R}). \quad (11.7)$$

Ya'ni, $L^2(\mathbb{R})$ dagi har qanday ψ va φ uchun Hermit operatorning quyidagi xos-sasi bor:

$$\int_{\mathbb{R}} \psi^* A\varphi dq = \int_{\mathbb{R}} (A\psi)^* \varphi dq$$

Kvant tizimining haqiqiy fizik kuzatilishi mumkin bo'lgan xususiyatiga mos keladigan har qanday Q operatori uchun uning kutilgan qiymati $\langle Q \rangle$ haqiqiy bo'lishi kerak; ya'ni,

$$\langle Q \rangle = \langle \Psi, \tilde{Q} \Psi \rangle$$

haqiqiydir. Demak, bunday Q uchun bizga kerak bo'ladi:

$$\langle \psi, \tilde{Q} \varphi \rangle = \langle \tilde{Q} \psi, \varphi \rangle, \quad \forall \psi, \varphi \in L^2(\mathbb{R})$$

Boshqa tomondan

Har qanday kuzatish $L^2(\mathbb{R})$ (yoki $L^2(\mathbb{R}^d)$) dagi Hermit operatori bilan tavsiflanishi kerak.

(Texnik jihatdan, «kuzatish» so'zini Hermit operatorlari tomonidan aniqlangan va to'liq ortonormal xos funksiyalar to'plamiga ega bo'lgan dinamik o'zga-

ruvchilarni tasvirlash uchun saqlab qo'ydik; bu xossasi keyingi bo'limda ko'rib chiqiladi; 11.B-teoreмага qarang).

Biz dinamik o'zgaruvchining dispersiyasi quyidagicha aniqlanganini ta'kidlaymiz:

$$\sigma_Q^2 = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2 \quad (11.8)$$

Dinamik o'zgaruvchi Q kutilgan qiymat $\langle Q \rangle$ ni aniqlik bilan oladi, faqat va faqat $\sigma_Q^2 = 0$ bo'lganda. Bu kuzatish bizga kvant tizimlarida mutlaq aniqlik bilan o'lchanishi mumkin bo'lgan dinamik o'zgaruvchilarning ajoyib xossasini olib keladi, bunday o'zgaruvchilar «kuzatishlar» deb ataladi. Hermit operator uchun bizda bor:

$$\begin{aligned} \sigma_Q^2 &= \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2 = \\ &= \langle \rangle^2 - 2\langle \rangle \langle \rangle + \langle \rangle = \\ &= \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \\ &= \langle (\tilde{Q} - \langle Q \rangle)\Psi, (\tilde{Q} - \langle Q \rangle)\Psi \rangle = \\ &= \|(\tilde{Q} - \langle Q \rangle)\Psi\|^2. \end{aligned} \quad (11.9)$$

Shunday qilib, agar $\sigma_Q^2 = 0$ bo'lsa, bizda:

$$\tilde{Q}\Psi = \langle Q \rangle\Psi. \quad (11.10)$$

Bu $\tilde{Q}$ Hermite operatori uchun xos son muammosi sifatida taniladi, xos son – bazis funktsiya jufti $\langle Q \rangle, \psi$ bilan birgalikda aniqlanadi. Demak, Q dinamik o'zgaruvchisining kutilgan qiymatidan $\langle Q \rangle$ bo'lgan «chetlanishlar» (dispersiyalar) operator $\tilde{Q}$ ning bazis funksiyalari bo'lgan ψ holatlarida yo'qoladi va kutilgan qiymat $\langle Q \rangle$ $\tilde{Q}$ ning xos soni bo'ladi. Bu natijani quyidagi teoremda umumlashtiramiz:

11.A-teorema. *Kvant tizimining dinamik o'zgaruvchisi Q aniq qiymat (kutilgan qiymat $\langle Q \rangle$) ga ega bo'ladi (1 ehtimollik bilan) faqat va faqat agar tizimning dinamik holati Q ga bog'langan Hermit operator $\tilde{Q}: L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ bazis funktsiyasi Ψ bilan tasvirlansa; bundan tashqari, kutilgan qiymat $\langle Q \rangle$ $\tilde{Q}$ ning xos soni xos son bo'lib, Q tizimning mumkin bo'lgan xususiyati hisoblanadi.*

Kanonik misol sifatida vaqtga bog'liq bo'lmagan Schrödinger tenglamasi qarash mumkin:

$$\tilde{H}\psi = E\psi$$

Shunday qilib, oldin ham ko'rganimizdek, aniq energiya holatlari Hamiltonian operatorining xos sonlaridir.

11.A-teorema kvant mexanikasini Hermit operatorlarning spektral nazariyasi bilan bog'lashni o'rnatadi. Biz ushbu nazariyani ixcham spektr holati uchun batafsil o'rganamiz.

11.4. Hermit operatorlarining spektral nazariyasi: diskret spektr

Xos son muammosi (11.10) ga qaytib, operator $\tilde{Q}$ uchun λ_k xos sonlar va $\varphi_k \in L^2(\mathbb{R})$ bazis funksiyalardan iborat sanoqli, lekin cheksiz to'plam mavjud bo'lgan holatni ko'rib chiqaylik, bu yerda $k = 1, 2, \dots$. Bunday holda, $\tilde{Q}$ ixcham spektrga ega deyiladi. Ushbu holda tizimning asosiy xususiyatlari quyidagi teoremdan kelib chiqadi yoki qamrab olinadi:

11.B-teorema $\lambda_k \varphi_k$ juftlari, bu yerda $k = 1, 2, \dots$ sonli xos son va bazis funksiya ketma-ketligi sifatida German operatori $\tilde{Q}: L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ uchun qabul qilingan; ya'ni

$$\tilde{Q}\varphi_k = \lambda_k \varphi_k, \quad k = 1, 2, \dots \quad (11.11)$$

Shunda

1. Agar φ_k bazis funksiya bo'lsa, $c\varphi_k$ ham bazis funksiya bo'ladi, bu yerda c ihtiyoriy o'zgarmas.

2. Agar $\varphi_k^{(1)}, \varphi_k^{(2)}, \dots, \varphi_k^{(M)}$ M ta xos funksiyalar bir xil λ_k xos qiymatiga mos bo'lsa, unda bu bazis funksiyalarning har qanday xos sonlari φ_k xos soniga mos bazis funksiya hisoblanadi.

3. Xos sonlar haqiqiy sonlardir.

4. Bazis funksiyalar φ_k ortonormal to'plamni tuzish uchun ishlatilishi mumkin — ya'ni $\tilde{Q}$ bazis funksiyalari to'plami shundayki,

$$\langle \varphi_k, \varphi_m \rangle = \delta_{km} = \begin{cases} 1 & \text{agar } k = m, \\ 0 & \text{agar } k \neq m. \end{cases} \quad (11.12)$$

5. Har qanday holat $\Psi \in L^2(\mathbb{R})$ quyidagi seriya ko'rinishida ifodalanishi mumkin,

$$\Psi(q) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \varphi_k(q), \quad (11.13)$$

bu yerda

$$c_k = \langle \varphi_k, \Psi \rangle, \quad (11.14)$$

va (11.13) orqali biz quyidagini tushunamiz:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \left\| \Psi - \sum_{k=1}^m c_k \varphi_k \right\| = 0 \quad (11.15)$$

Isbot: 1 va 2-qismlar oddiydir. 2-xususiyatda Eygen funksiyalarning M darajali ajratilishi mavjud. 3-ni ko'rsatish uchun, (11.11) har ikki tomonini φ_k bilan ichki ko'paytmasini olamiz va quyidagi sonni qo'llaymiz:

$$\lambda_k = \langle \varphi_k, \tilde{Q} \varphi_k \rangle / \langle \varphi_k, \varphi_k \rangle$$

bu haqiqiy, chunki $\tilde{Q}$ Hermit operator.

4-ni ko'rsatish uchun, quyidagini ko'rib chiqing:

$$\tilde{Q} \varphi_k = \lambda_k \varphi_k \quad \text{va} \quad \tilde{Q} \varphi_m = \lambda_m \varphi_m, \quad m \neq k.$$

Shunda,

$$\langle \varphi_m, \tilde{Q} \varphi_k \rangle = \lambda_k \langle \varphi_m, \varphi_k \rangle = \langle \tilde{Q} \varphi_m, \varphi_k \rangle = \lambda_m \langle \varphi_m, \varphi_k \rangle$$

Shunday qilib, $(\lambda_k - \lambda_m) \langle \varphi_m, \varphi_k \rangle = 0$ uchun $m \neq k$, $\lambda_k \neq \lambda_m$.

Nihoyat, 5-ni ko'rsatish uchun bazis funksiyalar φ_k normallangan deb qabul qilinadi:

$$\langle \varphi_k, \varphi_k \rangle = 1, \quad k = 1, 2, \dots$$

Shunday qilib, ular $L^2(R)$ uchun ortonormal asosni tashkil qiladi. (11.13) tenglama keyin bu asosga nisbatan Ψ ning Fourier ifodasi hisoblanadi. (11.14) tenglama oddiy holda $\langle \sum_m c_m \varphi_m, \varphi_k \rangle$ ni hisoblash orqali va (11.12) tenglamadan foydalalanib kelib chiqadi.

$\tilde{Q}$ operatorining turli funksiyalari ham spektral ifodani olishi mumkin. Masalan, agar $\tilde{Q} \varphi_k = \lambda_k \varphi_k$ bo'lsa, unda

$$\begin{aligned} \tilde{Q}^2 \varphi_k &= \tilde{Q}(\tilde{Q} \varphi_k) = \\ &= \tilde{Q} \lambda_k \varphi_k = \\ &= \lambda_k \tilde{Q} \varphi_k \\ &= \lambda_k^2 \varphi_k, \end{aligned}$$

va umumiy holda,

$$(\tilde{Q})^r \varphi_k = \lambda_k^r \varphi_k$$

Ramziy ma'noda,

$$\begin{aligned} (\sin \tilde{Q}) \varphi_k &= \left(\tilde{Q} - \frac{1}{3!} \tilde{Q}^3 + \dots \right) \varphi_k = \\ &= \left(\lambda_k - \frac{1}{3!} \lambda_k^3 + \dots \right) \varphi_k = \\ &= (\sin \lambda_k) \varphi_k, \end{aligned}$$

va hokazo. Faraz qilaylik,

$$u = \sum_{k=1}^{\infty} b_k \varphi_k$$

shunda

$$\sin(\tilde{Q}u) = \sum_{k=1}^{\infty} b_k (\sin \lambda_k) \varphi_k$$

Umuman olganda, agar $\tilde{Q}$ Hermit operator bo'lib, uning xos son – bazis funktsiya juftlari $(\tilde{e}_k, \tilde{o}_k)$ ixcham (notekisliksiz, belgilarni soddalashtirish uchun) va F har qanday R ga tegishli silliq funksiya bo'lsa, quyidagini yozsak bo'ladi:

$$F(\tilde{Q})u = \sum_{k=1}^{\infty} b_k F(\lambda_k) \varphi_k. \quad (11.16)$$

$\tilde{Q}: L^2(R) \rightarrow L^2(R)$ uchun, (11.16) seriya yig'ilsa ma'no kasb etadi; ya'ni haqiqiy sonlar ketma-ketligi R da yig'ilsa:

$$\mu_n = \sum_{k=1}^n |b_k F(\lambda_k)|^2$$

uchun

$$F(\tilde{Q}) = e^{i\xi \tilde{Q}}, \quad \xi \in \mathbb{R},$$

bu seriya har doim yig'iladi. Xususan, $|c_k e^{i\xi \lambda_k}|^2 = |c_k|^2 \rightarrow 0$ bo'lganda $k \rightarrow \infty$

$$e^{i\xi \tilde{Q}} \Psi = \sum_{k=1}^{\infty} c_k e^{i\xi \tilde{Q}} \phi_k = \sum_{k=1}^{\infty} c_k e^{i\xi \lambda_k} \phi_k$$

11.5. Kuzatishlar va statistik taqsimotlar

Kvant dinamik sistema bilan bog'liq bo'lgan Q kattalikning statistik taqsimoti uning xarakteristik funksiyasi bilan belgilanadi: $a: R \rightarrow R$. Umuman olganda, xarakteristik funksiya X tasodifiy o'zgaruvchisi bilan bog'liq bo'lgan ρ ehtimollik zichligi funksiyasining Fourier konvertatsiyasini doimiyga aylantiradi:

$$a(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\xi x} \rho(x) dx, \quad (11.17)$$

$\rho(x)$ X ning $(x, x+dx)$ oralig'ida bo'lish ehtimolini bildiruvchi funksiya. Demak, $a(\xi) e^{i\xi x}$ kutilgan qiymatidir:

$$a(\xi) = \langle e^{i\xi x} \rangle. \quad (11.18)$$

Bu holatning $L^2(R)$ dagi Hermit operator $\tilde{Q}$ ga umumlashtirilishi (11.14) dagi c_k koeffitsiyentlarining muhim xossasini ochib beradi. Birinchi navbatda, tasodifiy o'zgaruvchi X faqat $x_k, k=1,2,\dots$ qiymatlarni qabul qila oladi deb tasavvur qilsak va ρ_1, ρ_2 ushbu qiymatlarning ehtimolliklari bo'lsa, unda

$$a(\xi) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \rho_k e^{i\xi x_k}, \quad (11.19)$$

bu yerda $\sum_k \rho_k = 1$.

Endilikda kvant dinamikasiga qaytsak, avvalroq aytilganidek, $L^2(R)$ dagi Hermit operator $\tilde{Q}$ bilan tasvirlangan kvant tizimining har qanday dinamik o'zgaruvchi Q xos sonlari λ_k bo'lgan ixcham spektrga ega bo'lgan holda kuzatish hisoblanadi, garchi kuzatishlar uzluksiz spektrga ega bo'lgan boshqa operatorlar bilan ham tasvirlanishi mumkin, keyingi bo'limda qayd etilgan. Bu terminning sababi ravshan: **11.A-teorema**dan kelib chiqadi, lekin $a(\xi)$ xarakteristik funksiyasining roli qo'shimcha ma'lumot beradi. Kvant tizimining dinamik holatini ifodalovchi Ψ to'liq funksiyasi uchun, bizda quyidagi bor:

$$a(\xi) = \frac{\langle \Psi, e^{i\xi \tilde{Q}} \Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \rho_k e^{i\xi \lambda_k}, \quad (11.20)$$

bu yerda

$$\rho_k = |c_k|^2 / \langle \Psi, \Psi \rangle = |\langle \phi_k, \Psi \rangle|^2 / \langle \Psi, \Psi \rangle. \quad (11.21)$$

(11.19) va (11.20) ni taqqoslab, biz quyidagi teoreмага kelimiz:

11.C-teorema. Q kvant dinamik tizimining kuzatilishi mumkinligi uchun, uning diskret xos sonlari spektri $\{\lambda_k\}_{k=-\infty}^{\infty}$ bo'lsa. Unda Q λ_k qiymatini qabul qilish ehtimoli quyidagicha:

$$\rho_k = |c_k|^2 = |\langle \varphi_k, \Psi \rangle|^2$$

bu yerda φ_k, λ_k Eygen qiymatiga mos keladigan bazis funksiya va Ψ normallashtirilgan to'liq funksiyasi $\langle \Psi, \Psi \rangle = 1$ ekanligini anglatadi.

Shunday qilib, Q qabul qilishi mumkin bo'lgan yagona qiymatlar uning xos sonlari $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, va Q λ_k qiymatini qabul qilish ehtimoli $|c_k|^2 = |\langle \varphi_k, \Psi \rangle|^2$. Biz ehtimolliklarning p_k diskretligi quyidagilarni qanoatlantirishini ko'ramiz:

$$1 = \langle \Psi, \Psi \rangle = \left\langle \sum_{k=1}^{\infty} c_k \phi_k, \sum_{m=1}^{\infty} c_m \phi_m \right\rangle = \sum_k \sum_m c_k^* c_m \langle \phi_k, \phi_m \rangle = \sum_{k=1}^{\infty} |c_k|^2 = \sum_{k=1}^{\infty} \rho_k,$$

11.6. Uzlüksiz spektr

Har qanday dinamik o'zgaruvchilar (Hermit operatorlari) ixcham spektrga ega emas; ya'ni hamma ham kvant dinamik tizimlarida kuzatilmaydi. Masalan, impuls operatori $p = -i\hbar d/dq$ Hermit operator bo'lsa-da, uning ixcham spektri yo'q va, shu sababli, u kuzatilmaydi (pozitsiya va impuls uchun noaniqlik prinsipini oldingi nuqtayi nazarimizga muvofiq). Xususan, p uchun xos sonlari muammosi (q.) Masiks [37, 179-190-betlar]

$$pU(p', q) = p'U(p', q), \quad (11.22)$$

bu yerda $U(p', q)$ p ning Eygen funksiyasi bo'lib, xos sonlari $\lambda = p', p'$ o'zgaruvchisining uzluksiz funksiyasi; ya'ni, $p = -i\hbar \frac{d}{dq}$ spektri uzluksizdir. Biz osonlik bilan quyidagini tekshira olamiz:

$$U(p', q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'q/\hbar}. \quad (11.23)$$

Fourier qatori ifodasi (11.13) ga o'xshash ravishda dinamik holat ψ uchun ixcham spektrlar uchun, endi biz uzluksiz spektr holati uchun holatning Fourier ko'effitsiyenti ifodasini olamiz:

$$\psi(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \varphi(p') e^{ip'q/\hbar} dp'. \quad (11.24)$$

(11.14) ga o'xshash ravishda, bizda

$$\varphi(p') = \langle U(p', q), \psi(q) \rangle. \quad (11.25)$$

Analog argumentlar bundan ortiq davom ettirilmaydi. Darhaqiqat, (11.23) funksiyasi $L^2(\mathbb{R})$ da emas va uzluksiz spektr holatini to'g'ri matematik asosga qo'yish uchun umumiyoq sozlama tuzilishi kerak.

11.7. Dinamik o'zgaruvchilar uchun umumlashgan noaniqlik prinsipi

Har qanday dinamik o'zgaruvchi uchun, Hermit operator Q bilan xarakterlanadigan holat Ψ da quyidagi o'rtacha qiymatga ega bo'lamiz:

$$\langle Q \rangle = \langle \Psi, \tilde{Q} \Psi \rangle$$

bu yerda $\tilde{Q}$ operatori Q bilan bog'liq va $Q(x, p, t) = \tilde{Q}(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, t)$ tarzida ifodalanadi. Shuningdek, $\langle \Psi, \Psi \rangle = 1$ deb hisoblaymiz. Uning tarqalishi quyidagicha bo'ladi:

$$\sigma_Q^2 = \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle \Psi, (\tilde{Q} - \langle Q \rangle)^2 \Psi \rangle. \quad (11.26)$$

Har qanday boshqa shunday operator M uchun, bizda bor:

$$\sigma_M^2 = \langle \Psi, (\tilde{M} - \langle M \rangle)^2 \Psi \rangle = \langle (\tilde{M} - \langle M \rangle) \Psi, (\tilde{M} - \langle M \rangle) \Psi \rangle.$$

Har qanday kompleks son z uchun, $|z|^2 \geq (\operatorname{Im}(z))^2 = \left(\frac{1}{2i}(z - z^*) \right)^2$ ekanligini ko'rib, (11.2 to'plamdagi 1-mashqni ko'ring) quyidagini ko'rsatish mumkin:

$$\sigma_Q^2 \sigma_M^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\tilde{Q}, \tilde{M}] \rangle \right)^2, \quad (11.27)$$

bu yerda $[\tilde{Q}, \tilde{M}]$ operatorlarning kommutatori Q va M :

$$[\tilde{Q}, \tilde{M}] = \tilde{Q}\tilde{M} - \tilde{M}\tilde{Q}. \quad (11.28)$$

Umumlashtirilgan Heisenberg noaniqlik prinsipi quyidagicha. Har qanday mos kelmaydigan kuzatishlar jufti uchun (ularning operatorlari kommutativ emas, ya'ni $[\tilde{Q}, \tilde{M}] \neq 0$, (11.27) sharti amal qiladi. Biz bunday mos kelmaydigan opera-

torlar umumiy Eygen funksiyalarga ega bo'la olmasligini ko'rsatamiz. (11.27) tenglamadagi tengsizlik o'ng tomonni manfiy qilmaydi, chunki $\langle [\tilde{Q}, \tilde{M}] \rangle$ ham i faktoriga ega bo'lishi mumkin.

(11.27) tenglamasi oldin muhokama qilingan noaniqlik prinsipining elementar shakli bilan mos kelishi uchun, $\tilde{Q} = x$ va $\tilde{M} = \tilde{p} = (\hbar/i)d/dx$ qo'yish kerak. Shunday qilib, ψ test holati uchun, bizda quyidagicha:

$$[\tilde{x}, \tilde{p}]\psi = x \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dx} - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}(x\psi) = i\hbar\psi$$

Shunday qilib,

$$\sigma_x^2 \sigma_p^2 \geq \left(\frac{1}{2i} i\hbar \right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2$$

yoki

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Hermit (yoki o'z-o'ziga tegishli) operator $\tilde{Q}$ uchun xos sonlar – bazis vektor juftlari $(\lambda, \varphi)_{n=1}^{\infty}$ bilan, biz quyidagini ko'ramiz:

$$\tilde{Q}\psi = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k c_k \varphi_k, \quad c_k = \langle \varphi_k, \psi \rangle.$$

$\{P_k\}$ proyeksiya operatorlari quyidagicha belgilanadi:

$$P_k\psi = \langle \varphi_k, \psi \rangle \varphi_k = c_k \varphi_k$$

ularning xususiyati shundaki,

$$\psi = I\psi = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \varphi_k = \sum_{k=1}^{\infty} P_k\psi$$

shuningdek, ramziy tarzda

$$\sum_{k=1}^{\infty} P_k = I = \quad (11.29)$$

Shu sababli, bunday proyeksiyalar majmuasi identifikatsiyaning rezolyutsiyasi deb ataladi. Shunday qilib, operatorlar $\tilde{Q}$ quyidagicha ifodalanishi mumkin:

$$\sum_{k=1}^{\infty} P_k = I =$$

Bu g'oyalarni Q uzluksiz spektrga ega bo'lgan holatlarga kengaytirish mumkin.

11.7.1. Bazis funksiyalar sistemasi

Kommutativ operatorlarining maxsus xususiyati mavjud bo'lib, uni bir vaqtning o'zidagi xos funksiyalar xossasi deyiladi. Faraz qilaylik $\tilde{Q}$ va $\tilde{M}$ operatorlari shundayki, ψ $\tilde{Q}$ va $\tilde{M}$ har ikkisinin ham xos funksiyasi; ya'ni $\tilde{M}\psi = \lambda\psi$ va $\tilde{Q}\psi = \mu\psi$. Shunda

$$\tilde{Q}\tilde{M}\psi = \tilde{Q}\lambda\psi = \lambda\mu\psi = \tilde{M}\mu\psi = \tilde{M}\tilde{Q}\psi$$

shunday qilib, $(\tilde{Q}\tilde{M} - \tilde{M}\tilde{Q})\psi = [\tilde{Q}, \tilde{M}]\psi = 0$. Demak, agar operatorlarda bir xil bazis funksiyalar bo'lsa, ular kommutativdir.

Qaytarma xossa esa mos keluvchi operatorlar uchun nodegerat xos holatlar bilan amal qiladi. Agar $\{\psi_n\}$ Hermite operator $\tilde{Q}$ ning nodegerat Eygen holatlar ketma-ketligi bo'lsa, u Hermit operator $\tilde{M}$ bilan kommutatorlar va $\tilde{Q}\psi_n = \lambda_n\psi_n$, unda

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \psi_m, [\tilde{M}, \tilde{Q}]\psi_n \rangle = \\ &= \langle \psi_m, \tilde{M}\tilde{Q}\psi_n \rangle - \langle \psi_m, \tilde{Q}\tilde{M}\psi_n \rangle = \\ &= \lambda_n \langle \psi_m, \tilde{M}\psi_n \rangle - \lambda_m \langle \psi_m, \tilde{M}\psi_n \rangle = \\ &= (\lambda_n - \lambda_m) \langle \psi_m, \tilde{M}\psi_n \rangle \end{aligned}$$

Chunki xos holatlar uchun, $n \neq m$ uchun $\langle \psi_n, \tilde{M}\psi_m \rangle = 0$, bu quyidagini anglatadi: $\langle \psi_n, \tilde{M}\psi_m \rangle \propto \delta_{nm}$, ya'ni $\tilde{M}\psi_m$ qiymati ψ_m ga proporsional bo'lgan doimiy sonidir. Demak, $\tilde{Q}$ va $\tilde{M}$ xos holatgaega bo'lishadi.

Degerat holat uchun, faqat $\tilde{Q}$ Eygen holatlarining bir qismi $\tilde{M}$ ning xos holatlari bo'lishi mumkin.

12-BOB. QO‘LLANILISHLAR: GARMONIK OSSILLYATOR VA VODOROD ATOMI

12.1. Kirish izohlari

Ushbu bobda biz kvant mexanikasidagi asosiy misollarga ilgari muhokama qilingan nazariyani qo‘llashni ko‘rib chiqamiz. Bularga garmonik ossillyator holatining elementar misoli kiradi, unda asosiy holatlar va energiya darajalari kvantlanishi Schrödinger tenglamasidan darhol kelib chiqadi. Shuningdek, vodorod atomining asosiy muammosi uchun kvant dinamikasi (to‘lqin funksiyasi) hisoblanishi ham tavsiflangan.

12.2. Asosiy holatlar va energiya kvantlari: garmonik ossillyator

Keling, to‘g‘ri chiziq bo‘ylab harakatlanuvchi zarracha holatiga qaytaylik, pozitsiya koordinatasi $x = q$. Keyin biz quyidagi shakldagi to‘lqin funksiyalarini ko‘rib chiqishimiz mumkin:

$$\Psi(q, t) = \psi(q) e^{iEt/\hbar}. \quad (12.1)$$

Schrödinger tenglamasi quyidagicha qisqaradi:

$$H\left(q, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq}\right) \psi(q) = E \psi(q). \quad (12.2)$$

Shunday qilib, energiya E Hamiltonian H ning Eygen qiymati hisoblanadi. Esga olamiz: Hamiltonian quyidagi shaklga ega:

$$\begin{aligned} H(q, p) &= \frac{p^2}{2m} + V(q) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + V(q). \end{aligned} \quad (12.3)$$

Shunday qilib, operator H ta’rifini to‘liqlash uchun, biz V potentsialni belgilashimiz kerak. Klassik va ochiq misol V garmonik ossillyatorning burchak chastotasi ω bilan tebranishidagi potensial energiyasini ifodalaganda:

$$V(q) = \frac{1}{2} m \omega^2 q^2. \quad (12.4)$$

Shunda (12.2) quyidagicha bo‘ladi:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \right) \psi = E \psi, \quad (12.5)$$

yoki

$$\left(\frac{d^2}{dq^2} + \lambda - \alpha^2 q^2 \right) \psi = 0, \quad (12.6)$$

bu yerda

$$\lambda = 2mE/\hbar^2, \quad \alpha = m\omega/\hbar. \quad (12.7)$$

(Normallanadigan) (12.6) tenglamasining yechimlari quyidagicha:

$$\psi(q) = a(q) e^{-\alpha q^2/2}$$

va eng sodda holatda $a(q) = a_0$ bo'lsa, to'g'ridan to'g'ri qo'yish mos keladigan xos sonni ochib beradi:

$$\lambda = \lambda_0 = \alpha = m\omega/\hbar$$

Shunday qilib, mos keladigan energiya quyidagicha:

$$E = E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega. \quad (12.8)$$

Energiyaning eng kichik ehtimoliy qiymati asosiy holatga to'g'ri keladi va Planckning energiya kvantlarining yarmiga teng bo'lib ko'rinadi.

To'liq tenglamasining qolgan yechimlarini standart quvvat qatorlarining kengaytmasi (Frobenius usuli) orqali quyidagicha topish mumkin:

$$\psi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n! 2^n}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (12.9)$$

bu yerda $H_n(\cdot)$ n tartibdagi Hermite polinomlari va $\xi = q(m\omega/\hbar)^{1/2}$. Mos keladigan energiya holatlari quyidagicha:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega. \quad (12.10)$$

Shunday qilib, energiya kvantlangan holatlarda paydo bo'ladi, ular turli butun n qiymatlari bilan ajralib turadi va eng past energiya $n = 0$ ga mos keladigan asosiy holatdir. Bu elementar misol yana bir bor diskret kvant holatlarining ro'yobga chiqishi ushbu ikkinchi tartibli, chiziqli, elliptik differensial operatorning diskret spektrining tabiiy matematik natijasi ekanligini ko'rsatadi.

12.3. Vodorod atomi

Garmonik ossillyator asosiy va kvantlangan energiya holatlarining Schrödinger tenglamasi Eygen qiymatlarining tabiiy matematik xossalari qanday ekanligining elementar namunasini beradi, ammo potensial V ni tanlash ma'lum darajada sun'iy edi. Endilikda kvant mexanikasidagi eng muhim misollardan biriga murojaat qilamiz, bu kvant kimyosi uchun qurilish bloklarini ta'minlaydi: vodorod atomi uchun Schrödinger tenglamasi. Bu zaryadlangan zarracha, elektron, zaryadi bir xil kattalikda bo'lgan, lekin qarama-qarshi belgili yadroda aylanishini ifodalovchi potentsialli Hamiltonianni o'z ichiga oladi.

Vodorod atomi uchun bizda quyidagicha:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_p} \Delta_r - \frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_e + V(r)$$

bu yerda (m_p, r_p) , (m_e, r_e) proton va vodorod elektronining massasi-pozitsiya juftlari aniq nuqta O ga nisbatan va

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad r = |r_e - r_p|. \quad (12.11)$$

Agar biz boshlanish nuqtasini massa markaziga $R = (m_e r_e + m_p r_p) / (m_e + m_p)$ o'tkazsak, Hamiltonian quyidagi shaklga ega bo'ladi:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\tilde{m}} \Delta_r + V(r), \quad (12.12)$$

bu yerda $M = m_e + m_p$, $\tilde{m} = m_e m_p / M$ va $r = r_e - r_p$. Elektron massasi ma'lumki $m_p = 1.67262 \times 10^{-27}$, proton massasi esa $m_p = 1.67262 \times 10^{-27}$ kg. Proton massasi elektron massasidan 1800 marta katta bo'lganligi sababli, $\tilde{m} = m_e$ ($\tilde{m} = 1836 m_e / 1837 = 0.99946 m_e$), biz proton harakatini e'tiborga olmaymiz va boshlanish nuqtasini O aniq protonda qo'yamiz, shunday qilib $r = r_e$. Shunda H quyidagicha qisqaradi:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r)$$

bu yerda Δ uch o'lchovli Laplacian operatori ($\Delta = \Delta_r$), $m = m_e$ va $V = -e^2 / 4\pi\epsilon_0 r$. Yakka elektron uchun Schrödinger tenglamasi quyidagicha bo'ladi:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - V \Psi = 0 \quad (12.13)$$

Belgilash kiritamiz:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-iEt/\hbar}, \quad (12.14)$$

shunda bizda:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V \Psi = E \Psi. \quad (12.15)$$

(12.15) tenglamasining umumiy yechimi, asosan, superpozitsiya orqali olinadi: $\Psi = \sum_n c_n \Psi_n$ bu yerda c_n boshlang'ich ma'lumotlardan $\Psi(x, y, z, 0)$ aniqlanadi va $H \Psi_n = E_n \Psi_n$. Ammo bu holatda, ushbu bazis funksiyalar va xos sonlarning xossalari haqidagi tafsilotlar materiyaning atom tuzilishini tushinishda asosiy rol o'ynaydi.

12.3.1. Schrödinger tenglamasi sferik koordinatalarda

Sferik simmetriya tufayli, Schrödinger tenglamasini (12.15) sferik koordinatalarga (r, θ, ϕ) o'tkazish qulay, bu yerda r nukleusdan boshlanishgacha bo'lgan radial masofa, θ z o'qiga nisbatan qiyshayish burchagi va ϕ x o'qidan xy tekstilga radius proyeksiyasiga bo'lgan azimutal burchakdir. Ushbu koordinatalarda, vaqtga bog'liq bo'lmagan Schrödinger tenglamasi quyidagicha ko'rinish oladi (quyida soddalashtirish uchun Ψ_n o'rniga ψ qo'yilgan):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + V \psi = E \psi, \quad (12.16)$$

Biz (12.16) ni o'zgaruvchilarni ajratish usuli bilan yechishga harakat qilamiz, bunda ψ ni ko'rinishda deb faraz qilib, radial bog'liqlikni (θ, ϕ) bog'liqlikdan ajratamiz.

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi). \quad (12.17)$$

Standart jarayon (12.17) ni (12.16) ga qo'yish, RY ga bo'lish va keyin $-2mr^2 / \hbar^2$ ga ko'paytirishdan iborat bo'lib, natijada quyidagi tenglamani olamiz:

$$A(R) + B(Y) = 0, \quad (12.18)$$

bu yerda A va B differensial ifoda qilinishlardir:

$$A(R) = R^{-1} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2m^2}{\hbar^2} [V(r) - E], \quad (12.19)$$

$$B(Y) = Y^{-1} \left[(\sin \theta)^{-1} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + (\sin^2 \theta)^{-1} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right]. \quad (12.20)$$

Hozirgi kunda qo'llanilayotgan standart dalil shundaki, faqat r ga bog'liq bo'lgan $A(R)$ funksiyasi faqat θ va ϕ ga bog'liq bo'lgan $-B(Y)$ funksiyasiga teng bo'lishi mumkin, faqat ular har ikkala doimiylikka, masalan, $\pm k$ ga teng bo'lganda, bu butun son ekanligini ko'rsatish mumkin. Shuning uchun, biz quyidagi ikki tenglamani keltiramiz:

$$\begin{aligned} A(R) &= k, \\ B(Y) &= -k. \end{aligned} \quad (12.21)$$

k doimiy ayrim vaqtlarda ajratish doimiyliigi deb ataladi (masalan, Griffiths [2], 124-bet).

Keyinchalik, biz Y ni funksiyasi θ va ϕ funksiyasi mahsuloti sifatida ham ifoda etamiz.

12.3.2. Radial tenglama

$R(r) r = 0$ da cheklangan bo'lishi va $r \rightarrow \infty$ da yo'qolishi kerakligi sababli, biz radial funksiyani $R = a_0 e^{-\alpha r}$ shaklida chegarada tanlashimiz mumkin, bu yerda a_0 va α doimiyliklar. Buni (12.21) ga kiritish quyidagini beradi:

$$\left(\alpha^2 - \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2\alpha}{r} + \frac{2me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 r} - \frac{k}{r^2} \right) R(r) = 0$$

ning o'xshash darajalarini tenglashtirib, biz ushbu tenglama $R(r) \neq 0$ uchun qoniqtirilishini xulosa qilamiz, agar $k = 0$ bo'lsa va

$$\alpha = \frac{2me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}$$

bundan biz quyidagini ham olamiz:

$$E = E_1 = -\frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2}. \quad (12.22)$$

(12.22) dagi E_l energiya vodorod atomining asosiy holat energiyasidir.

Radikal yechimning to'liq shakli $(c_1 r + c_2 r^2 + c_3 r^3 + \dots) e^{-\alpha r}$ shaklidagi sinov yechimlarini ko'rib chiqish va qatori yakunlash orqali olinadi. Tenglamani kengaytirish funksiyani normallashtirilishiga olib keladi. Xususan, biz R ni quyidagicha normallashtiramiz: $\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = 1$. k ni butun sonlar $k = l(l+1)$, $l = 0, 1, \dots, n-1$ bilan almashtirib, $A(R) = l(l+1)$ umumiy yechimlarini quyidagicha yozishimiz mumkin:

$$R_{nl}(r) = - \left[\frac{4(n-l-1)!}{n^2 a_0^2 [(n+l)!]^2} \right]^{-1/2} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^l e^{-r/na_0} L_{n-l-1}^{l+1/2}(2r/na_0),$$

$$n = 1, 2, \dots, \quad l = 0, 1, \dots, n-1, \quad (12.23)$$

bu yerda a_0 nomlangan Bohr radius (chunki u vodorod atomining Bohring 1913-yilgi modelidan eng past energiyali orbita radiusidir),

$$a_0 = \frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \quad (12.24)$$

($a_0 \approx 0.529 \text{ \AA}$) va $L_j(\cdot)$ tegishli Laguerre polinomlari:

$$L'_{j-1}(x) = (-1)^j \left(\frac{d}{dx} \right)^j L_j(x),$$

$$L_q(x) = e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^q). \quad (12.25)$$

Misollar:

$$L_0^0 = 1, \quad L_0^2 = 2, \quad L_1^0 = 1 - x,$$

$$L_1^2 = 18 - 6x, \quad L_2^0 = x^2 - 4x + 2,$$

va h.k.

ℓ indeksining diapazoni R_{nl} normallashtirilishi uchun $n - l$ da tugatiladi. [E'tibor bering, ushbu mavzuning ba'zi tadqiqotlarida $R_{nl}(r)$ uchun ozgina boshqacha formula keltirilgan, bu yerda boshqa polinomlar bilan aniqlangan umumlashtirilgan Laguerre polinomlari beriladi.]

n va ℓ indeksleri asosiy kvant sonlari, ℓ esa azimutal kvant sonlari deb ataladi. Energiya Eygen qiymatlari ℓ dan mustaqil va quyidagicha beriladi:

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \left[\frac{me^2}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \right] = \frac{E_1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (12.26)$$

Atomlarning spektrlari (yoki chiziqli spektrlari) ular qo'zg'alganda chiqaradigan elektromagnit nurlanishni tasvirlaydi. Vodorod atomi uchun spektr uning ehtimoliy energiya holatlari oralig'idagi o'tishlarni xarakterlaydi. Holatlar oralig'idagi energiya farqlari energiyasi $h\nu$ bo'lgan foton sifatida chiqadi, bu yerda to'liq raqami $\kappa = \nu/c$. (12.26) formula Bohr formulasi deb ataladi. Undan, kvant holatlari n' va n o'rtasidagi o'tish bilan bog'liq to'liq uzunligini hisoblash mumkin. Planck formulasiga ko'ra, fotonning energiyasi uning chastotasiga proporsional:

$$E = h\nu = ch/\lambda$$

$$\frac{1}{\lambda} = R_0 \left[\left(\frac{1}{n''} \right)^2 - \left(\frac{1}{n'} \right)^2 \right], \quad (12.27)$$

bu yerda $R_0 = (2/4\pi c\hbar^3)(e^2/4\pi\epsilon_0)^2 = 1.097 \times 10^7 m^{-1}$. R_0 doimiysi Rydberg doimiysi deb ataladi va (12.27) vodorod spektri uchun Rydberg formulasi. $n_1 \leftarrow n_2$ o'tish uchun chiqarilgan nurlanishning to'liq raqami $R_0 \left((1/n_1)^2 - (1/n_2)^2 \right)$ bo'ladi. $n_1 = 1$ belgilangan va $n_2 = 2, 3, \dots$ holatlarda, ultrabinafsha nur chastotalari uchun Lyman qatorini olamiz; $n_1 = 2, n_2 = 3, \dots$ holatlarda, ko'rinuvchi nur Balmer qatori olinadi. Infraqizil $n_1 = 3, n_2 = 4, 5, \dots$ holatlarda Paschen qatorlari bilan boshlanadi va Brekett qatorlari $n_1 = 4, n_2 = 5, 6, \dots$ boshlanadi. Elektron olib tashlanganda, ionlashgan holat olinadi. Atomni ionlash uchun kerak bo'lgan minimal energiya bu ionlash energiyasi:

$$E = hcR_0 \left(1 - 1/n''^2 \right)_{n'' \rightarrow \infty} = hcR_0$$

12.3.3. Burchak tenglamasi

Endi burchak tenglamasiga qaytamiz, (12.21)₂, $k = l(l+1)$ bilan. Yana o'zgaruvchilarni ajratishni qo'llaymiz, uni quyidagicha belgilaymiz:

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

$B(Y) = -l(l+1)$ ni θ va ϕ dagi differensial tenglamalarga ajratamiz, ajratish doimiysi m^2 bo'lib, standart dalillar bilan m butun son deb topiladi: $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ (albatta, m massadan adashtirilmasligi kerak). $m = m_0$ elektronning. Bu butun sonlar m magnit kvant sonlari deb ataladi. Hosil bo'lgan tenglamalar:

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + [l(l+1)\sin^2 \theta - m^2]\Theta = 0, \quad (12.28)$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m^2\Phi = 0. \quad (12.29)$$

Ushbu tenglamalarning yechimlari:

$$\begin{aligned} \Theta(\theta) &= \Theta_{lm}(\theta) = A P_l^m(\cos\theta), \\ \Phi(\phi) &= \Phi_m(\phi) = e^{m\phi}, \quad \begin{cases} l = 0, 1, \dots, n-1, \\ m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \end{cases} \end{aligned}$$

bu yerda A doimiy va P_l^m tegishli Legendre polinomlari:

$$\begin{aligned} P_l^m(x) &= (1-x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} P_l(x), \\ P_l(x) &= \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2-1)^l. \end{aligned} \quad (12.30)$$

Shunday qilib, burchak yechimlari:

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\theta, \phi) &= \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi) = \delta_m \sqrt{\frac{(1+2l)(l-|m|)!}{2\pi(l+|m|)!}} e^{m\phi} P_l^m(\cos\theta) \\ \delta_m &= (-1)^m \quad m \geq 0, \quad \delta_m = 1 \quad m \leq 0, \\ l &= 0, 1, \dots, n-1 \quad \text{va} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \end{aligned} \quad (12.31)$$

Funksiyalar Y_{lm} sferik garmonikalar deb ataladi. Ular o'zaro ortogonal, ya'ni quyidagi ma'noda:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm}(\theta, \phi)^* Y_{l'm'}(\theta, \phi) \sin\theta d\theta d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (12.32)$$

12.3.4. Vodorod atomining orbitalari

Xulosa qilganda, vodorodning to'liq to'liq funksiyalari quyidagicha:

$$\begin{aligned} \psi_{nlm} &= R_n(r) Y_{lm}(\theta, \phi), \\ n &= 1, 2, \dots, \quad l = 0, 1, \dots, n-1, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \end{aligned} \quad (12.33)$$

bu yerda $R_n(r)$ (12.23) da, $Y_{lm}(\theta, \phi)$ esa (12.31) da keltirilgan. Mos keladigan to'liq funksiyalari o'zaro ortogonaldir:

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \psi_{nlm}^* \psi_{n'l'm'} r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (12.34)$$

ψ_{nlm} funksiyalari vodorod atomi uchun Hamiltonianning bazis funksiyalari ($\tilde{m} \approx m_e = m$ deb taxmin qilinadi) va xos sonlar orbital holatlar energiyasiga mos keladi. Biz bu xos holatlarni orbitalar deb ataymiz.

12.3.5. Spektroskopik holatlar

Bir xil Eygen qiymatlarga ega bo'lgan Eygen funksiyalar bir xil Eygen qiymat uchun ikki yoki ko'proq Eygen funksiyalar bir-biriga mos kelgandagi holatlarga to'g'ri keladi. Turli orbitalar va energiya holatlarini va ularning energiya sathlarini toifalash uchun universal ravishda qo'llaniladigan spektroskopik holat konvensiyasi qo'llaniladi, bu turli kvant sonlariga orbital turlarini belgilaydi. Quyidagi kuzatuvlar va konvensiyalar vodorod orbitaliga tegishli:

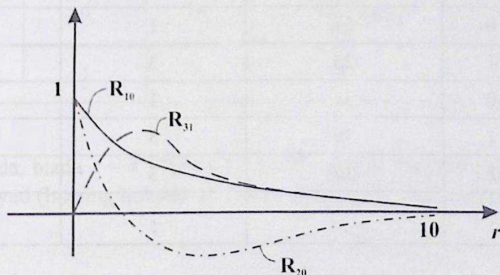
1. Chunki

$$1 = \langle \psi^*, \psi \rangle = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi R^* Y^* R Y r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi$$

agar

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y^* Y \sin \theta d\theta d\phi = 1$$

bo'lsa.



12.1-rasm. Radikal to'liqin funksiyasi komponentlari, $R_{nl}(r)$, r ortgan sari tez yo'qolishini ko'rsatadi

Biz uni radial ehtimol sifatida aniqlashimiz mumkin:

$$\mathbb{P}_n(r) = r^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\psi_{nlm}|^2 \sin \theta d\theta d\phi = r^2 R_n^2(r)$$

bu r ortgan sari tez yoqoladi. R^3 da har bir orbital doirasida, masalan, 90% ehtimollik zichligini o'z ichiga olgan domen qismlari, turli energiya sathlari uchun orbitallarning standart geometriya shakllarini belgilaydi (12.1-rasmga qarang).

2. $\ell = 0$ uchun, biz s orbitalarini olamiz, $1s, 2s, \dots, ns$, asosiy kvant sonlari n bo'yicha. Bular sferik domenlardir (yuqoridagi 1 konvensiya sharoitida), $1s$ esa eng past yer holat energiyasiga mos keladi. Faqat s -orbitalar $r = 0$ da nolldan farq qiladi. Asosiy holat energiyasi E_1 manfiy bo'lib, shunday qilib, energiyalar asosiy kvant sonlari n bilan o'sadi, bu 12.1-jadvalda ko'rsatilgan.

3. Bir xil n qiymati uchun ℓ va m turlicha bo'lgan orbitalar degenerativdir. $\ell \neq 0, m = 0$ uchun, shunday ataladigan z orbitalar olinadi ($2p_z, 3d_z, \dots$ bilan belgilanadi). Masalan, $2p$ orbitalar ($n=2, \ell=1$) bir real va ikki kompleks qiymatli funksiyalarni o'z ichiga oladi ($m=0$ va $m=\pm 1$):

$$2p(-1): \sqrt{3/8\pi} R_1(r) \sin \theta e^{-i\phi},$$

$$2p(0): \sqrt{3/4\pi} R_1(r) \cos \theta,$$

$$2p(+1): -\sqrt{3/8\pi} R_1(r) \sin \theta e^{i\phi}$$

12.1-jadval

Vodorod orbitalar

Kvant son		Orbital nomi	Degeneratsiya	Energiya (Eq. (12.26))
n	ℓ			
1	0	$1s$	1	E_1
2	0	$2s$	1	$E_1/4$
2	1	$2p$	3	$E_1/4$
3	0	$3s$	1	$E_1/9$
3	1	$3p$	3	$E_1/9$
3	2	$3d$	5	$E_1/9$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$2p(0) 2p_z$ orbitaliga to'g'ri keladi va $2p(+1)$ va $2p(-1)$ liney kombinatsiyalari $2p_x$ va $2p_y$ orbitalariga to'g'ri keladi:

$$2p_x = -\frac{1}{\sqrt{2}} [2p(+1) - 2p(-1)]: \sqrt{3/4\pi} R_1(r) \sin \theta \cos \phi,$$

$$2p_y = -\frac{1}{i\sqrt{2}} [2p(+1) + 2p(-1)]: \sqrt{3/4\pi} R_1(r) \sin \theta \sin \phi$$

Shuningdek, boshqa degenerativ juftlarining o'xshash liney kombinatsiyalari $3p, 3d, 4f, \dots$ orbitalarga olib keladi. Kvant kimyosidagi adabiyot s, p, d, f ni «o't-

kir», «asosiy», «diffuz» va «fundamental» deb talqin qiladi. Biz bu mavzuni atom tuzilishi va davriy jadvalni o'rganishda 14-bobda batafsil ko'rib chiqamiz.

Vodorod to'liq funksiyalarining ayrim misollari 12.2-jadvalda keltirilgan.

12.2-jadval

To'liq funksiyasi komponentlari

Kvant son			Orbital nomi	To'liq funksiya komponenti $\Psi_{\min}$
n	l	m		
1	0	0	1s	$\gamma e^{-\zeta}$
2	0	0	2s	$\frac{1}{2\sqrt{2}}\gamma(1-\zeta/2)e^{-\zeta/2}$
2	1	0	2p _z	$\frac{1}{4\sqrt{2}}\gamma\zeta e^{-\zeta/2}\cos\theta$
2	1	± 1	2p _{±1}	$\pm \frac{1}{8}\gamma\zeta e^{-\zeta/2}e^{\pm i\varphi}\sin\theta$
3	0	0	3s	$\frac{1}{81\sqrt{3}}\gamma(27-18\zeta+2\zeta^2)e^{-\zeta/3}$
3	1	0	3p _z	$\frac{2\sqrt{2}}{81}\gamma(6\zeta-\zeta^2)e^{-\zeta/3}\cos\theta$
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

Formulalarda, bizda $\gamma = \pi^{-1/2}(Z/a_0)^{3/2}$ va $\zeta = Zr/a_0$, bu yerda eZ boshlanish nuqtasidagi zaryad (bizning holatda $Z=1$) va $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2$ Bohr radiusidir.

13-BOB. SPIN VA PAULI PRINSIPI

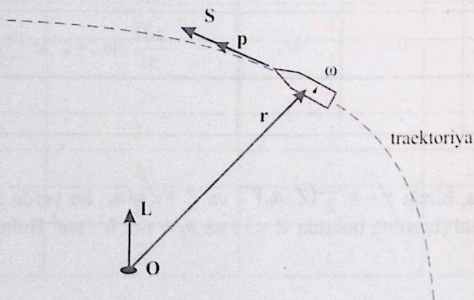
13.1. Burchak momenti va aylanish

Shu vaqtgacha, tizimning chiziqli impulsi $\mathbf{p}$ kvant tizimlarining asosiy dinamik xossasi sifatida xizmat qilgan. Klassik mexanikadan biz boshqa turdagi impulslarning mavjud bo'lishi mumkinligini bilamiz, bu impuls vektorlarining fazoda aniq nuqtaga nisbatan momentlari va zarracha trayektoriyasi bo'ylab spin tufaylidir. Biz endilikda bu xossalarning kvant tizimlarida qanday namoyon bo'lishini o'rganamiz.

Biz qattiq jismlarning klassik dinamikasidan bilamizki, jism (masalan, sun'iy yo'ldosh) uch o'lchovli fazoda trayektoriya bo'ylab harakatlanganda, u ikki ta'sir tufayli burchak impulsiga ega: impuls vektori $\mathbf{L}$ fazoda aniq nuqta (masalan, Yerning markazi) atrofidagi trayektoriyaga tangensial bo'lgan moment va jismning o'z o'qi atrofidagi aylanishi natijasidagi burchak impulsi $\mathbf{S}$. Birinchisi ekstruzin burchak impulsi deb ataladi va quyidagicha beriladi:

$$\mathbf{L} = \mathbf{q} \times \mathbf{p} \quad (13.1)$$

bu yerda $\mathbf{q}$ jismning massa markazining boshlanish nuqtaga nisbatan pozitsiyasi, $\mathbf{p}$ esa uning chiziqli impulsi va ikkinchisi odatdagi burchak impulsi deb ataladi.



13.1-rasm. Qattiq jismning ekstruzin burchak momenti $\mathbf{L}$ va odatdagi burchak momenti $\mathbf{S}$

Burchak momenti quyidagicha beriladi:

$$\mathbf{S} = I \boldsymbol{\omega}, \quad (13.2)$$

bu yerda I jismning (o'q bo'ylab) aylanish o'qiga nisbatan inersiya momenti va $\boldsymbol{\omega}$ uning burchak tezligi. Ushbu holatlar 13.1-rasmda tasvirlangan. Qayd etish kerakki, agar jism soat millari bo'yicha aylansa, $\mathbf{S}$ harakat yo'nalishiga, agar qarama-qarshi aylansa, ortga yo'naltirilishi mumkin.

Xuddi shunday, orbital trayektoriyada harakatlanuvchi elektronda ham ikki turdagi burchak momentlari mavjud: (1) ekstruzin moment, $L = \mathbf{q} \times \mathbf{p}$ bu yerda $\mathbf{q} = \mathbf{r}$ aniq nuqtadan masofa, odatda yadroga markazidan va $\mathbf{p}$ elektron impulsi ($\mathbf{p} = \hbar/i \partial/\partial \mathbf{q}$) va (2) odatdagi moment $\mathbf{S}$. $\mathbf{L}$ albatta, kvant tizimining dinamik o'zgaruvchisi bo'lganligi sababli, biz uning xossalarini o'rganish uchun hozirgacha ishlab chiqilgan g'oyalardan foydalanishimiz mumkin, spin $\mathbf{S}$ mavjudligi relyativistik kvant mexanikasida o'rnatilgan va biz bu yerda o'rganayotgan norelyativistik nazariyaning doirasidan tashqarida qoladi. Biz $\mathbf{S}$ ni o'z nazariyamizda postulat sifatida kiritamiz:

*Har bir elementar zarracha kvant tizimida odatdagi spin $\mathbf{S}$ ga ega; elektron holatida, spinning kattaligi $\hbar/2$ **

Biz bu odatdagi spinning ushbu maxsus turi haqida 13.3-bo'limda batafsil ma'lumot beramiz. Umumiy yondashuv dinamik xossalarni chiqarishdan iborat ekstruzin burchak momenti $\mathbf{L}$ va $\mathbf{S}$ ning bir nuqttagacha bir xil xossalarga ega ekanligini taxmin qilish; $\mathbf{L}$ va $\mathbf{S}$ ning spektral xossalari (ya'ni Eygen vektorlar va Eygen qiymatlarning tuzilishi) bir-biridan ancha farq qiladi. Aslida, $\mathbf{L}$ ning Eygen funksiyalari vodorod atomini o'rganishimizdan tanish funksiyalardir, $\mathbf{S}$ ning Eygen funksiyalari esa butun sonlarning juftliklaridan iborat.

13.2. Tashqi burchak momenti

Biz ekstruzin burchak momentning xossalarini keltirishdan boshlaymiz va keyin spinga o'xshash xossalarni aniqlaymiz. Demak,

$$\mathbf{L} = \mathbf{q} \times \mathbf{p}$$

va Kartizian koordinatalarida bizda

$$L_j = \varepsilon_{rsj} q_r \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_s}, \quad (13.3)$$

bu yerda ε_{rsj} permutatsiya simvoli bo'lib, biz qayta takrorlanuvchi indekslar bo'yicha qo'shamiz. Demak:

$$\begin{aligned} L_1 &= \frac{\hbar}{i} \left(q_2 \frac{\partial}{\partial q_3} - q_3 \frac{\partial}{\partial q_2} \right), \\ L_2 &= \frac{\hbar}{i} \left(q_3 \frac{\partial}{\partial q_1} - q_1 \frac{\partial}{\partial q_3} \right), \\ L_3 &= \frac{\hbar}{i} \left(q_1 \frac{\partial}{\partial q_2} - q_2 \frac{\partial}{\partial q_1} \right). \end{aligned} \quad (13.4)$$

Biz zarralarning sferik orbitallardagi harakatini ko'rib chiqmoqchi bo'lganimiz uchun, ushbu operatorlarni sferik koordinatalarda quyidagicha yozishimiz mumkin:

$$\begin{aligned} L_1 &= \frac{\hbar}{i} \left(-\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\phi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right), \\ L_2 &= \frac{\hbar}{i} \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\phi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right), \\ L_3 &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\phi}. \end{aligned} \quad (13.5)$$

Birinchi xossalar to'plami sifatida, biz kommutativlikdan boshlaymiz.

13.A-teorema

1. (13.3) dagi ekstruzin burchak momenti operatorlari L_j kommutativ emas va aslida:

$$[L_1, L_2] = i\hbar L_3, \quad [L_2, L_3] = i\hbar L_1, \quad [L_3, L_1] = i\hbar L_2. \quad (13.6)$$

2. L_j operatorlari operatorlar bilan kommutativdir:

$$L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2. \quad (13.7)$$

1-isbot Berilgan sinov funksiyasi ω uchun, bevosita hisoblash shunday beradi:

$$\begin{aligned} [L_1, L_2]\varphi &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left\{ \left(q_2 \frac{\partial}{\partial q_3} - q_3 \frac{\partial}{\partial q_2} \right) \left(q_3 \frac{\partial}{\partial q_1} - q_1 \frac{\partial}{\partial q_3} \right) \varphi - \right. \\ &\quad \left. - \left(q_3 \frac{\partial}{\partial q_1} - q_1 \frac{\partial}{\partial q_3} \right) \left(q_2 \frac{\partial}{\partial q_3} - q_3 \frac{\partial}{\partial q_2} \right) \varphi \right\} = \\ &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 (q_2 q_{1,1} + q_2 q_{3,3} - q_2 q_{1,3} - q_3^2 \varphi_{,1} + q_3 q_{1,3} - \\ &\quad - q_3 q_{2,3} + q_3^2 \varphi_{,2} + q_1 q_{2,3} - q_1 \varphi_{,2} - q_1 q_{3,3}) = \\ &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 (q_2 \varphi_{,1} - q_1 \varphi_{,2}) = \\ &= i\hbar L_3 \varphi, \end{aligned}$$

bu yerda biz qisqartirilgan belgilardan foydalanganmiz, $\varphi_{,i} = \partial\varphi/\partial q_i$, $\varphi_{,ij} = \partial^2\varphi/\partial q_i\partial q_j$, $\varphi_{,ij} = \partial^2\varphi/\partial q_i\partial q_j$ uchun $i, j = 1, 2, 3$. Shunday qilib,

$$[L_1, L_2] = i\hbar L_3$$

(13.6) dagi qolgan munosabatlar indekslarning permutatsiyasidan kelib chiqadi.

2. L^2 operatori operatorlari bilan kommutativ ekanligi quyidagi dalildan kelib chiqadi:

$$\begin{aligned} [L^2, L_1] &= [L_1^2 + L_2^2 + L_3^2, L_1] = [L_1^2, L_1] + [L_2^2, L_1] + [L_3^2, L_1] = \\ &= L_2[L_2, L_1] + [L_2, L_1]L_2 + L_3[L_3, L_1] + [L_3, L_1]L_3, \end{aligned}$$

chunki $[L_1^2, L_1] = 0$, $[L_2^2, L_1] = L_2^2 L_1 - L_1 L_2^2 = L_2[L_2, L_1] - [L_1, L_2]L_2$ va h.k.

Shunday qilib

$$[L^2, L_1] = L_2(-i\hbar L_3) + (-i\hbar L_3)L_2 + L_3(i\hbar L_2) + (i\hbar L_2)L_3 = 0,$$

buning o'xshash natijalari $[L^2, L_2]$ va $[L^2, L_3]$ uchun ham mavjud.

Biz 11-bobdan bilamizki, L_j kommutativ emasligi ularni nomutanosib kuza-tuvchilar sifatida tasniflaydi va bu ularning variatsiyalari quyidagi noma'lumlik tengsizligini qoniqtiradi:

$$\sigma_{L_1}^2 \sigma_{L_2}^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle i\hbar L_3 \rangle \right)^2 = \frac{\hbar^2}{4} \langle L_3 \rangle^2$$

yoki

$$\sigma_{L_1} \sigma_{L_2} \geq \frac{\hbar}{2} \langle L_3 \rangle. \quad (13.8)$$

L^2 va L_j kommutativ ekanligi ularning bir vaqtning o'zida bazis funksiyalar-ga ega ekanligini anglatadi; ya'ni φ va xos sonlar λ va μ mavjud bo'lib,

$$L^2 \varphi = \lambda \varphi \quad \text{va} \quad L_j \varphi = \mu \varphi \quad (j=1,2,3).$$

Bu munosabat bitta tanlangan indeks j uchun amal qiladi; ammo, (13.6)-ga ko'ra, L_j, L_k , bilan $j \neq k$ uchun kommutativ emas va L_j, L_k bilan bazis funk-siya-larga ega emas.

13.2.1. Zanjir xossasi: holatlarni ko'tarish va tushirish

Operatorlar L_1 va L_2 burchak impuls holatlari oilasini qurish uchun foydalani-lishi mumkin, bu holatlar operator L_3 ning Eygen qiymatlarini operatorlar $L_{\pm}$ bilan kompozitsiya qilib kamaytiradi yoki oshiradi, bu quyidagicha aniqlanadi:

$$L_{\pm} = L_1 + iL_2. \quad (13.9)$$

$L_{\pm}$ va L_3 bilan kommutativ, lekin L_3 bilan emas. Ammo, har qanday φ funksiyasi uchun, agar u L^2 ning bazis funksiyasi bo'lsa va $L_3\varphi = \mu\varphi$, unda $L_{\pm}\varphi$ L_3 va L^2 ning bazis funksiyasi hisoblanadi va ba'zi algebraik shakl almashtirishlardan so'ng (13.4) dan foydalanib (batafsil ma'lumot uchun, masalan, Griffit [21, 147-148-betlar]), biz quyidagini keltiramiz:

$$L_3(L_{\pm}\varphi) = (\mu \pm \hbar)L_{\pm}\varphi. \quad (13.10)$$

Shunday qilib, L^2 ning bazis funksiyalari oilasi $L_{\pm}$ orqali yaratilishi mumkin, bu yerda $L_{\pm}$ xos sonni $\hbar$ ga oshiradi va $L_{\mp}$ xos sonni $\hbar$ ga kamaytiradi. L^2 ning berilgan λ xos soni uchun, biz holatlar zinasini olamiz, har bir holat $\hbar$ masofa bilan ajratiladi. Agar biz m indeksini L_3 xos sonlariga mos keladigan holatlarni sanash uchun va ℓ indeksini L^2 uchun ajratsak, L^2 ning xos sonlari $\ell(\ell+1)$ ga va L_3 ning xos sonlari m ga bog'liq ekanligini ko'rsatish mumkin.

L^2 va L_3 ning bazis funksiyalari qanday? Ular burchak impulsidan kelib chiqqani sababli, keling, (12.16) da berilgan elektron uchun Schrödinger tenglamasiga qaytamiz va $r = r_0 = \text{constant}$ bo'lgan holda faqat aylanma harakat holatini ko'rib chiqamiz. Tenglama quyidagicha tushadi:

$$-\frac{\hbar^2}{2I} \left\{ (\sin\theta)^{-1} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + (\sin^2\theta)^{-1} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right\} \psi(\theta, \phi) = E\psi(\theta, \phi), \quad (13.11)$$

bu yerda $I = m_0 r_0^2$ aylanish inersiyasidir. Vodorod atomining tahlilidan biz burchak Eygen funksiyalari (12.31) dagi sferik garmonikalar Y_m ekanligini bilamiz. (13.5) ni kiritib, bizda:

$$L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 = -\hbar^2 \left\{ (\sin\theta)^{-1} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + (\sin^2\theta)^{-1} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right\}. \quad (13.12)$$

Shunday qilib, Hamiltonianning qat'iy rotor qismi $L^2 / 2I$. Undan quyidagi xulosa kelib chiqadi:

$$L^2 Y_m = l(l+1)\hbar^2 Y_m, \quad (13.13)$$

va bir vaqtning o'zida

$$L_3 Y_m = \hbar m Y_m. \quad (13.14)$$

(13.10) ga ko'ra, $L_{\pm}$ operatorlari holatlarni ko'tarish va tushirishni amalga oshiradi, har bir holat o'zaro Eygen qiymatlarda L_3 orqali v bilan ajratiladi. Biz

yuqoriga ko'tarilishni L_+ operatori yordamida va pastga tushishni L_- operatori yordamida amalga oshiramiz. Yuqori darajaga tegishli ψ_{top} funksiyasi va quyi darajaga tegishli ψ_{bot} funksiyasi mavjud bo'lib, ular quyidagi shartlarga mos keladi: $L_+\psi_{top} = 0$ va $L_-\psi_{bot} = 0$. Aslida, $L^2\psi_{bot} = \hbar^2 l(l+1)\psi_{bot}$ va $L^2\psi_{top} = \hbar^2 l(l+1)\psi_{top}$ ekanini ko'rsatish mumkin. Bu yerda kvant soni l uchun yuqori chegara va kvant soni l uchun quyi chegara mavjud bo'lib, ular N butun sonli qadamlar bilan ajralib turadi: $\hat{l} = -l$ L_3 operatorining o'z qiymatlari $\hbar m$ bo'lib, m qiymatlari $-l$ dan l gacha bo'lgan oraliqda o'zgaradi, shuning uchun N -bosqichda $l = l + N$ bo'ladi. Boshqacha aytganda, $l_{max} = N/2$, bu yerda $N = 0, 1, 2, \dots$. Shunday qilib, vodorod atomidagi azimutal indekslar l butun va yarim butun qiymatlarni oladi va m qiymatlari $-l$ dan l gacha bo'lgan oraliqda yotadi:

$$l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots, \quad m = -l, -l+1, \dots, l-1, l. \quad (13.15)$$

Biz ushbu hisob-kitobni teoremda umumlashtiramiz.

13.B-teorema. *Burchak impulsi operatorlarining L^2 va L_3 Eygen funksiyalari (12.31) dagi sferik funksiyalar Y_m va Eygen qiymatlari $\hbar^2 l(l+1)$ va $m\hbar$, mos ravishda, bu yerda $l = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$ va $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$*

13.3. Spin

Endi elementar zarracha spini S ga o'tamiz, biz uning tegishli operator komponentlari aynan ekstruzin burchak impulsi L bilan bir xil kommutator xossalariga ega ekanligini taxmin qilamiz. Shunday qilib:

Kvant tizimidagi har bir elementar zarrachaning aylanish momenti S komponentlariga ega bo'lib, ular quyidagi munosabatlarga mos keladi:

$$[S_1, S_2] = i\hbar S_3, \quad [S_2, S_3] = i\hbar S_1, \quad [S_3, S_1] = i\hbar S_2. \quad (13.16)$$

Shunday qilib, S_j kommutativ emas, lekin ekstruzin burchak impulsi operatorlari L_j kabi, S^2 S_3 bilan kommutativ bo'lib, umumiy bazis vektorlarga ega:

$$S^2 q_{sm} = \hbar s(s+1) q_{sm}, \quad S_3 q_{sm} = \hbar m q_{sm}. \quad (13.17)$$

Shuningdek, quyidagilarni ko'rsatish mumkin:

$$S_{\pm} q_{sm} = \hbar [s(s+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} q_{s, m \pm 1}, \quad (13.18)$$

bu yerda $S_{\pm} = S_1 \pm iS_2$, shunday qilib spin operatorlari holatlarni ko'tarish va tushirish xossasiga ega, $L_{\pm}$ ga o'xshash. Ammo bazis vektorlar $q_{sm}(\theta, \phi)$ funksiyalari

emas; balki ular s va m yarim-butun son qiymatlari bilan tavsiflangan miqdordir.

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots, \quad m = -s, -s+1, \dots, s.$$

Har bir elementar zarracha o'zining aniq spin qiymatiga ega bo'lib, faqat zarracha turiga bog'liq: pi mezonlar uchun $s = 0$; elektronlar uchun $s = \frac{1}{2}$; fotonlar uchun $s = 1$; delta barionlar uchun $s = \frac{3}{2}$; gravitonlar uchun $s = 2$ va h.k. Lekin spin qiymati har bir muayyan zarracha turi uchun o'zgarmasdir.

Shuning uchun bu yerda qiziqishga katta bo'lgan holatlar $s = 1/2$ bo'lgan holatlardir, bu oddiy materiyani tashkil etuvchi zarrachalarning spinidir: elektronlar, protonlar, neytronlar. Bu holatda faqat ikkita xos holat mavjud bo'lib, ular $s = 1/2, m = \pm 1/2$ ga to'g'ri keladi: $q_{1/2, 1/2}$ pastki spin deb ataladi va $\downarrow$ bilan ramzlanadi va $q_{1/2, -1/2}$, yuqori spin deb ataladi va $\uparrow$ bilan ramzlanadi. Spin komponentlari vektorning skalyar komponentlari sifatida qaralmaydi, balki endilikda S_i 2×2 matritsalar sifatida ko'riladi. Bu asos vektorlari sifatida $s = 1/2$ spin zarrachasi-ning holati quyidagi chiziqli kombinatsiyadir:

$$\mathbf{X} = a\mathbf{X}_+ + b\mathbf{X}_-, \quad \mathbf{X}_+ = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X}_- = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (13.19)$$

Bizning kuzatishimizcha, S_i ning mos keladigan xos sonlari yuqori spin uchun $+\hbar/2$ va pastki spin uchun $-\hbar/2$.

(13.17) ga ko'ra, bizda quyidagilar mavjud:

$$\begin{aligned} S^2\mathbf{X}_+ &= \frac{3\hbar^2}{4}\mathbf{X}_+, & S^2\mathbf{X}_- &= \frac{3\hbar^2}{4}\mathbf{X}_-, \\ S_3\mathbf{X}_+ &= \frac{\hbar}{2}\mathbf{X}_+, & S_3\mathbf{X}_- &= -\frac{\hbar}{2}\mathbf{X}_-. \end{aligned} \quad (13.20)$$

Agar $\mathbf{X} = a\mathbf{X}_+ + b\mathbf{X}_-$ zarrachaning umumiy holatiga to'g'ri kelsa va biz, masalan, S_3 ni o'lchamoqchi bo'lsak, unda biz $|a|^2$ ehtimol bilan $\hbar/2$ yoki $|b|^2$ ehtimol bilan $-\hbar/2$ qiymatini olamiz. Shunday qilib, $|a|^2 + |b|^2 = 1$ bo'lishi kerak. Spinlar S_1, S_2 kommutativ emas, shuning uchun ularni o'lchashga urinish ularning har biri uchun bir xil ehtimollik bilan $\hbar/2$ yoki $-\hbar/2$ natijani beradi.

(13.16) va (13.17) dagi spin operatorlari quyidagi ko'rinishga keladi:

$$S_1 = \frac{\hbar}{2} \sigma_1, \quad S_2 = \frac{\hbar}{2} \sigma_2, \quad S_3 = \frac{\hbar}{2} \sigma_3, \quad (13.21)$$

bu yerda σ_i Paulining spin matritsalarini:

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (13.22)$$

Agar biz $S_{\pm} = S_1 \pm iS_2$ qo'ysak, unda $S_1 = (S_+ + S_-)/2$, $S_2 = (S_+ - S_-)/2i$ va (13.19) dagi $X_{\pm}$ xos spinorlari, spinorlar deb ataladi va quyidagilarni qoniqtiradi:

$$\begin{aligned} S_1 X_{\pm} &= \frac{\hbar}{2} X_{\pm}, & S_1 X_{\mp} &= \frac{\hbar}{2} X_{\mp}, \\ S_2 X_{\pm} &= -\frac{\hbar}{2i} X_{\mp}, & S_2 X_{\mp} &= \frac{\hbar}{2i} X_{\pm}. \end{aligned} \quad (13.23)$$

Shunday qilib,

$$S^2 = S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$S_3 = \frac{\hbar}{2} \sigma_3,$$

va xos spinorlar $X_{\pm}$ S_3 ning bazis vektorlari bo'lib, ularning xos sonlari $\pm \hbar/2$.

Shu nuqtada savol tug'iladi: Elektron spini qanday qilib Schrödinger tenglamasi yechimlariga qo'shilishi kerak? Bu odatda har bir elektronlik to'liqin funksiyasini (a) avval muhokama qilingan turdagi fazoviy orbitallar va (b) elektronning spinini tasvirlovchi spin funksiyasining mahsuli sifatida yozish orqali amalga oshiriladi. Natijalar shunday ataladigan spin orbitallaridir. Masalan, agar ψ_{nlm} vodorod kvant holati va $X_{\pm}$ spin holati bo'lsa, $\psi_{nlm} X_{\pm}$ spin orbitali bo'ladi. To'liqin funksiyasi n elektron uchun pozitsiya va spinning to'liq kvant holati quyidagi shaklda bo'ladi:

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_n) X(s_1, s_2, \dots, s_n)$$

bu yerda X spin holatini tavsiflovchi spinor. Bu butun kompozit funksiya ikki elektronning almashinishiga nisbatan antisimmetrik bo'lishi kerak.

Yana bir umumiy spin belgilashi elektron spin funksiyalarining m kvant soniga qarab 0 yoki 1 qiymatga ega ekanligini tan oladi va α va β bilan belgilanadi:

$$\alpha(m) = \begin{cases} 1, & m = 1/2, \\ 0, & m = -1/2 \end{cases} \quad \text{va} \quad \beta(m) = \begin{cases} 0, & m = 1/2, \\ 1, & m = -1/2 \end{cases} \quad (13.24)$$

Umuman olganda, orbitadagi burchak spin momenti muvozanatlanadi, ya'ni spin-yuqori momenti spin-pastga muvozanatlangan. Natija shundaki, umumiy holda:

Har bir fazoviy orbital faqat (ikkitagacha) spinlar juftlangan elektronni joylashtirishi mumkin.

Bu prinsip polielektron atomlarning elektron tuzilishiga oid asosiy qoidalarni ta'minlaydi. Keyinchalik biz bu tuzilishga qaytamiz.

Ushbu bo'limdagi oxirgi mulohaza sifatida, biz 9-bobdan aylanuvchi zaryadlangan elementar zarra magnit dipoli bilan magnit dipol momenti μ spin burchak momenti S ga proporsional ekanligini eslaymiz ((9.13) ni eslang). Magnit maydoni B da joylashtirilganda, zarracha $\mu \times B$ momentiga ega bo'lib, energiya $-\mu B$ ga ega bo'ladi. Proporsionallik doimiy m_0 ($= -e/m$) $\mu = m_0 S$ deb ataladi va hozirgi holatda aylanuvchi zarracha uchun Hamiltonian $H = -m_0 B \cdot S$

13.4. Bir xil zarrachalar va Pauli prinsipi

Biz bugungi kunda ko'rib chiqilgan g'oyalarni ko'p elektronli tizimlarga kengaytirsak, to'liq funksiyasining shakli va xossalriga katta ta'sir ko'rsatadigan savolga duch kelamiz. Faqat ikkita mutlaqo bir xil zarracha, 1-zarracha koordinatalari r_1 va 2-zarracha koordinatalari r_2 bo'lgan tizimni ko'rib chiqaylik. Biroz vaqtga spinni e'tibordan chetda qoldirib, ushbu tizimning to'liq funksiyasi quyidagicha:

$$\Psi = \Psi(r_1, r_2, t)$$

Hamiltonian bilan,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 + V(r_1, r_2). \quad (13.25)$$

Agar $\Psi = \psi(r_1, r_2)e^{-iEt/\hbar}$ bo'lsa, fazoviy to'liq funksiya ψ vaqtga bog'liq bo'lmagan Schrödinger tenglamasini qanoatlantiradi:

$$H\psi = E\psi$$

Agar 1-zarracha $\psi_1(r_1)$ holatida va 2-zarracha $\psi_2(r_2)$ holatida bo'lsa, unda

$$\psi(r_1, r_2) = \psi_1(r_1)\psi_2(r_2). \quad (13.26)$$

Ammo agar biz ikki zarrachani (2-quyumni r_1 joyiga va 1-quyumni r_2 joyiga qo'ysak), biz hamon bir xil dinamik tizimga kelamiz. Boshqacha qilib aytganda, biz to'liq funksiyasini qaysi zarracha qaysi holatda ekanligiga mos kelmaydigan tarzda tasvirlashimiz kerak. Quyidagi ikki kombinatsiyadan har biri bu talabni qondirishi mumkin:

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C(\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) \pm \psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2)). \quad (13.27)$$

Demak, ushbu misolda, kvant mexanikasi ikki bir xil zarracha tizimlari uchun ikkita turdagi to'liq funksiyalarini qabul qiladi, ulardan biri uchun (13.27) dagi belgi musbat va biri uchun belgi manfiy. Shundan keyin,

$$\begin{aligned} \psi_{+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= +\psi_{+}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1), \\ \psi_{-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= -\psi_{-}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \end{aligned} \quad (13.28)$$

Ma'lum bo'ldiki, tajriba kuzatuvlari ko'rsatganidek, musbat holat ψ_{+} butun sonli spinlarga ega bo'lgan zarrachalarga (biz ularni bozonlar deb ataymiz) va manfiy holat ψ_{-} yarim-butun sonli spinlarga ega bo'lgan zarrachalarga, masalan, elektronlarga (biz ularni fermionlar deb ataymiz) to'g'ri keladi.

Ikkita imkoniyatni farqlashning yanada qisqacha usuli – bu permutatsiya operatorini kiritish:

$$P_{12}\psi(r_1, r_2) = \psi(r_2, r_1). \quad (13.29)$$

Bu operator quyidagi asosiy xususiyatlarga ega:

1. $P_{12}^2 = P_{12}^2$ (P_{12} proyeksiyadir).
2. P_{12} ning Eygen qiymatlari ± 1 .
3. P_{12} Hamiltonian H bilan kommutativdir:

$$[H, P_{12}] = 0. \quad (13.30)$$

Shunday qilib, P va H muvofiq kuzatuvchilardir va biz har ikki operatorning bir vaqtning o'zidagi Eygenholatlari bo'lgan funksiyalar to'plamni topishimiz mumkin.

Shuning uchun, to'liq funksiyalari har qanday ikki bir xil zarrachaning permutatsiyasiga nisbatan simmetrik yoki antisimmetrik bo'lishi mumkin.

Kuzatuvlar $|\psi|^2$ va $P_{12}|\psi|^2 = |\psi|^2$ har ikki holda bir xil fizik imkoniyatga ega miqdorlardir.

Ushbu mulohazalar va tajriba dalillari bizga shunga olib keladi:

Pauli prinsipi. *Har bir elementar zarracha o'zining ichki burchak impulsiga ega, bu uning spini deb ataladi. Butun sonli spinlarga ega bo'lganlar bozonlar deb ataladi va ularning mos to'liq funksiyasi bir xil zarrachalarning permutatsiyalariga nisbatan simmetrik ($P_{12}\psi = \psi$). Yarim-butun sonli spinlarga ega bo'lganlar fermionlar deb ataladi va ularning mos to'liq funksiyasi bir xil zarrachalarning permutatsiyalariga nisbatan antisimmetrik ($P_{12}\psi = -\psi$).*

(13.27) ga qaytib, ikki elektron, 1 va 2, bo'lgan holda, $\psi_1 = \psi_2$ bo'lsin. Shunda agar ikki bir xil fermion bo'lsa, $\psi_{-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C(\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2) - \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2)) = 0$, bu ziddiyatdir. Demak,

Ikki bir xil fermion bir xil holatni egallay olmaydi.

Bu tushuncha Paulining taqiqlash prinsipi deb ataladi.

Biz pi mezonlar va fotonlar butun sonli spinlarga ega elementar zarrachalarining misollari ekanligini eslaymiz, elektronlar va protonlar esa yarim-butun sonli spinlarga ega. Shuning uchun, elektronlar va protonlar, biz bu muhokamada diqqatni jamlaymiz, fermionlardir va bir xil zarrachalarning permutatsiyalariga nisbatan antisimmetrik to'ldin funksiyalariga ega. n bir xil zarrachalar holatida, biz permutatsiya operatorlarini kiritishimiz mumkin,

$$P_{i_1 i_2 \dots i_n} \psi(r_1, r_2, \dots, r_n) = \varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_n} \psi(r_{i_1}, r_{i_2}, \dots, r_{i_n}) \quad (13.31)$$

bu yerda $i_1, i_2, \dots, i_n$ butun sonlarning $1, 2, \dots, n$ permutatsiyasi va $\varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_n}$ permutatsiya simvoli bo'lib, u mos ravishda $i_1, i_2, \dots, i_n$ $123 \dots n$ ning juft (simmetrik) yoki toq (antisimmetrik) permutatsiyasi bo'lganda $+1$ yoki -1 ga, aks holda 0 ga teng.

13.5. Geliy atomi

Vodorod atomidan tashqari yanada murakkab bo'lgan daraja geliy atomi bo'lib, u 1 va 2 raqamli etiketkalari bilan belgilab qo'yilgan ikki elektrondan iborat va yadro markaziga nisbatan fazodagi r_1 va r_2 pozitsiyalariga ega. Hamiltonian:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}, \quad (13.32)$$

bu yerda Ze yadroning zaryadi va $r_{12} = |r_2 - r_1|$. Schrödinger tenglamasi:

$$H\psi = E\psi$$

$1/r_{12}$ ga bog'liq elektron-elektron repulsiya termini mavjudligi sababli ajratilishi mumkin emas.

Afsuski, ushbu tizim va vodorod atomidan tashqari barcha boshqa tizimlar uchun aniq yechimlar mavjud emas. Shunday qilib, biz taqribiy usullarga murojaat qilishimiz kerak. Eng kuchli va muvaffaqiyatli taqribiy usullardan biri Rayleigh-Ritzusuli bo'lib, kvant mexanikasi adabiyotida oddiy «variatsion metod» sifatida tanilgan. Biz ushbu metodning qisqacha tavsifini keyingi bo'limda keltiramiz. G'oya oddiy: energiya E ni to'ldin funksiyasi mansub bo'lgan qabul qilinishi mumkin bo'lgan funksiyalar sinfi bo'yicha minimallashtirish. Ammo, endilikda bu qiyin muammoga aylanadi, chunki qabul qilinishi mumkin bo'lgan funksiyalar $L^2(R^3)$ mumkin bo'lgan spin orbitallari yoki spin orbitalarining kombinatsiyalari bo'lishi kerak va muhimrog'i, fermionlarning antisimmetrik talabini qanoatlantirishi kerak. Bunday qabul qilinishi mumkin bo'lgan funksiyalarni qidirish jarayo-

ni bizga geliy atomi uchun Schrödinger tenglamasining turli xil taqribiy usullarini o'rganishga imkon beradi.

(13.32) dagi odatiy taqribiy usullardan biri, antisimmetrik muammoni qanday hal qilishni tushuntirishga olib keladi, $1/r_{12}$ terminini e'tiborga olmasak va ajratish mumkin bo'lgan Hamiltonianni ko'rib chiqsak:

$$(H_1 + H_2)\psi(r_1, r_2) = E\psi(r_1, r_2)$$

bu yerda

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i}, \quad i = 1, 2$$

Ushbu ajratilishi mumkin bo'lgan taqribiy usul uchun to'liq funksiyasi individual bir elektronli vodorod to'liq funksiyalarining mahsuloti sifatida yozilishi mumkin; ramziy:

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \psi_{nlm}(\mathbf{r})\psi_{n'l'm'}(\mathbf{r}')$$

turli n, n', l, l', m va m' qiymatlari uchun.

Birinchidan, har bir omil faqat $1s$ orbitali bo'lgan holatni taqribiy usul sifatida ko'rib chiqaylik:

$$\varphi_{1s}(r_1) = \psi_{100}(r_1) \quad \text{va} \quad \varphi_{1s}(r_2) = \psi_{100}(r_2).$$

Shunda, ikki elektron tizimi uchun, kimdir to'liq funksiyasini taxmin qilish mumkin:

$$\varphi_{1s}(1)\varphi_{1s}(2) \equiv \varphi_{1s}(r_1)\varphi_{1s}(r_2) \quad (13.33)$$

bu tizim uchun eng past mumkin bo'lgan energiya holatiga ega bo'lganligi uchun qabul qilinadi. Bu «farqlanmaslik» mezonini qanoatlantiradi, chunki r_1 r_2 bilan almashtirilganda o'zgarmaydi va bu bir elektronning ikki barobar energiyasiga olib keladi. Ammo bu antisimmetrik emas. Agar biz $2s$ orbitallarining φ_2 to'liq funksiyasini ko'rib chiqsak, mumkin bo'lgan to'liq funksiyalari quyidagicha:

$$\varphi_{1s}(1)\varphi_{1s}(2) \quad \text{va} \quad \varphi_{1s}(2)\varphi_{1s}(1).$$

Ammo bu funksiyalar farqlanmaslik mezonini qanoatlantirmaydi: biz 1 va 2 ni almashtirish orqali bir xil funksiyani olmaymiz. Ammo quyidagi chiziqli kombinatsiyalar ushbu mezonni qanoatlantiradi:

$$(\varphi_{1s}(1)\varphi_{1s}(2) \pm \varphi_{1s}(2)\varphi_{1s}(1))/\sqrt{2} = \varphi_{\pm}^{1,2}. \quad (13.34)$$

(13.33) va (13.34) dagi uch fazoviy funksiyalar ushbu mezonni qanoatlantiradi: ular 1 va 2 elektronlari almashtirilganda o'zgarmaydi, ammo ularning barchasi

antisimmetrik emas; aslida, faqat $\varphi_-^{1,2}$ antisimmetrik: $\varphi_-^{1,2}(1,2) = -\varphi_-^{1,2}(2,1)$. Lekin biz hali spinni hisobga olganimiz yo'q.

Eslatib o'tamiz, α va β elektron spin funksiyalari bo'lib, $\alpha\left(\frac{1}{2}\right)=1, \alpha\left(-\frac{1}{2}\right)=0, \beta\left(-\right)=, \beta\left(-\frac{1}{2}\right)=1$, elektronning kvant soniga qarab. Ikki elektron tizimi uchun to'rtta spin holati mavjud; biz ularni $\alpha_1 = \alpha(1), \alpha_2 = \alpha(2), \beta_1 = \beta(1)$ deb belgilaymiz va $\beta_2 = \beta(2)$, bu yerda a spin-kvant soni $m = 1/2$ ga to'g'ri keluvchi spin holatini va β $m = -1/2$ ga to'g'ri keladi ($\alpha(1)$ belgi 1-elektronning a spin funksiyasiga to'g'ri kelishi va u 1 yoki 0 bo'lishi mumkinligini tushuniladi, bu spin 1 da $+1/2$ yoki $-1/2$ ekanligiga qarab). Ikki elektron uchun qo'shma holatlar quyidagicha bo'lishi mumkin:

$$\alpha(1)\alpha(2), \beta(1)\beta(2), (\alpha(1)\beta(2) \pm \alpha(2)\beta(1))/\sqrt{2} \quad (13.35)$$

(normalizatsiya uchun $1/\sqrt{2}$). Bularning barchasi elektronlarning almashinuviga nisbatan simmetrik, faqat $(\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1))/\sqrt{2}$ dan tashqari, u antisimmetrik.

Lekin Pauli prinsipini qo'shma orbitallarga va spinlarga qo'llash kerak: spin orbitallari. Spinlarning mahsuloti (13.35) va (13.34) dagi orbitallarning imkoniyatlarini ko'rib chiqing. Faqat holatlar

$$\varphi_+^{1,2}\sigma_+, \varphi_-^{1,2}\sigma_+, \varphi_-^{1,2}\alpha(1)\alpha(2) \text{ va } \varphi_-^{1,2}\beta(1)\beta(2),$$

bu yerda $\sigma_{\pm} = (\alpha(1)\beta(2) \pm \alpha(2)\beta(1))/\sqrt{2}$, antisimmetrik va shuning uchun elektronlar uchun spin orbitallari sifatida qabul qilinishi mumkin.

Umuman olganda, Paulining taqiqlash prinsipini qanoatlantiruvchi to'liq funksiyalari Slater determinanti deb ataladigan determinant shaklida yozilishi mumkin, bu determinantlarning quyidagi xossasidan foydalanadi: har qanday qator juftligi almashtirilganda determinantning belgisi o'zgaradi. Shu tariqa, gelying yer ($1s$) holatidagi ikki elektron uchun to'liq funksiyasi:

$$\begin{aligned} \psi(1,2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_{1s}(r_1)\alpha(1) & \varphi_{1s}(r_2)\alpha(2) \\ \varphi_{1s}(r_1)\beta(1) & \varphi_{1s}(r_2)\beta(2) \end{vmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \varphi_{1s}(r_1)\varphi_{1s}(r_2)[\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)] = \\ &= -\psi(2,1). \end{aligned}$$

Yuqoridagi determinant ushbu to'liq funksiyasini tanlash uchun Slater determinantidir. Funksiyalar

$$\chi_{1s}^{\alpha}(r_1) = \varphi_{1s}(r_1)\alpha_1(1) \quad \text{va} \quad \chi_{1s}^{\beta}(r_1) = \varphi_{1s}(r_1)\beta(1)$$

spin orbitallar bo'lib, $\psi(1, 2)$ quyidagicha ifodalanishi mumkin:

$$\psi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \chi_{1s}^{\alpha}(r_1) & \chi_{1s}^{\beta}(r_1) \\ \chi_{1s}^{\alpha}(r_2) & \chi_{1s}^{\beta}(r_2) \end{vmatrix}$$

Sleyter determinanti atomlar uchun har qanday N elektronlar soni uchun to'liq funksiyalarining taqribiy qiymatlarini hisoblash mumkin. Spin orbitallarni ifodalovchi belgilar bilan

$$\varphi_{1s}(r_1)\alpha(1) = 1s(1) \quad \text{va} \quad \varphi_{1s}(r_1)\beta(1) = \overline{1s(1)}$$

Berilliy uchun Sleyter determinanti (to'rtta elektron, ikkisi $1s$ orbitalda va ikkisi $2s$ orbitalda bo'lgan holda) quyidagicha:

$$\psi(r_1, r_2, r_3, r_4) \approx \frac{1}{\sqrt{4!}} \begin{vmatrix} 1s(1) & \overline{1s(1)} & 2s(1) & \overline{2s(1)} \\ 1s(2) & \overline{1s(2)} & 2s(2) & \overline{2s(2)} \\ 1s(3) & \overline{1s(3)} & 2s(3) & \overline{2s(3)} \\ 1s(4) & \overline{1s(4)} & 2s(4) & \overline{2s(4)} \end{vmatrix}$$

Agar har qanday ikki qator bir xil bo'lsa, determinantning qiymati 0 bo'ladi, shuning uchun bunday holat Pauli prinsipiga muvofiq mavjud bo'lishi mumkin emas. Antisimmetrik to'liq funksiyalari bilan tasvirlangan har qanday ikki elektron bir-biridan uzoqlashadi. Natijada, parallel elektronlar uzoqlashadi. Yana bir bor, biz atom orbitalida har biri har xil spinlar bilan eng ko'pi bilan ikki elektron bo'lishi mumkinligini taxmin qilamiz.

Atomning elektron tuzilishi elektron zichligi kabig'atining ketma-ketligidan iborat; har bir qobiq ma'lum bir kvant soniga ega bo'lgan orbitallardan iborat. $n=1$ bo'lgan qobiq odatda K qobiq deb ataladi, $n=2$ L qobiq, $n=3$ M qobiq va h.k. Ushbu xossalar davriy jadvaldagi elementlarning turli atom tuzilmalarini tashkil etishda asosiy ahamiyatga ega va keyingi bobda batafsilroq muhokama qilinadi.

13.6. Variatsion prinsip

Avvalroq tavsiflangan turli to'liq funksiyalari va spin orbitallar ko'p elektronli atomlar uchun faqat taqribiy qiymatlar sifatida tushunilishi kerak. Lekin ularni atomlarning energiya holatlarining yaxshi taqribiy qiymatlarini qurish uchun foydalanish mumkin, bu esa Rayleigh–Ritz metodidan foydalanish orqali amalga oshiriladi.

Biz funksiyalar fazosi V ni kiritishdan boshlaymiz:

$$\nu = \{\psi \in H^1(\mathbb{R}^{3N}) : \psi = \psi(r_1, r_2, \dots, r_N)\};$$

$$\psi \text{ ga qarama-qarshi simmetrik funksiya } (r_1, r_2, \dots, r_N)\} \quad (13.36)$$

*Variatsion teorema quyidagicha:

13.C-teorema. H kvant tizimining Hamiltonian operatori bo'lsin va E_g uning asosiy holat energiyasini bildiradi. Unda:

$$E_g \leq \langle \psi, H\psi \rangle \quad \forall \psi \in \nu \quad \langle \psi, \psi \rangle = 1. \quad (13.37)$$

Boshqacha qilib aytganda,

$$E_g \leq \langle H \rangle. \quad (13.38)$$

Isbot: $\psi = \sum_k c_k \varphi_k$, deb belgilaylik $\langle \varphi_k, \varphi_j \rangle = \delta_j$. Eslatib o'tamizki, $H\varphi_k = E_k \varphi_k$. Shunda

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \langle \psi, H\psi \rangle = \\ &= \left\langle \sum_k c_k \varphi_k, H \sum_j c_j \varphi_j \right\rangle = \\ &= \sum_k \sum_j c_k^* c_j E_j \langle \varphi_k, \varphi_j \rangle = \\ &= \sum_j |c_j|^2 E_j \\ &\geq E_g \sum_j |c_j|^2 = E_g \end{aligned}$$

Bu formula variatsion prinsip murakkabroq atomlar uchun energiyalarining Reyli-Rits aproksimatsiyalariga asos bo'ladi. V_M fermionlar uchun Pauli prinsipi-ni qanoatlantiradigan spin orbitalar majmuasi bilan to'ldirilgan V ning cheklangan o'lchamli bo'lish fazosi bo'lsin. Shunda energiyasining E_g Reyli-Rits aproksimatsiyasi E_g^M ni qanoatlantiradi.

$$E_g^M = \inf_{\psi \in \nu_M} \frac{\langle \psi, H\psi \rangle}{\langle \psi, \psi \rangle} \geq \inf_{\psi \in \nu} \frac{\langle \psi, H\psi \rangle}{\langle \psi, \psi \rangle} = E_g. \quad (13.39)$$

Messiahx [37, 771-bet] da keltirilgan klassik misolni ko'rsatamiz: Geliy atomi uchun Hamiltonian:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{|r_1 - r_2|} \right)$$

Reyli-Ris usulida, quyidagi sinov funksiyasini kiritamiz:

$$\psi_a(r_1, r_2) = \frac{a^{-3}}{\pi} e^{-(r_1 + r_2)/a}, \quad (13.40)$$

bu yerda a – variatsion parametr. ψ_a funksiyasi buzilish nazariyasiga asoslangan. Mos energiya quyidagicha:

$$E(a) = \langle \psi_a, H \psi_a \rangle / \langle \psi_a, \psi_a \rangle. \quad (13.41)$$

a parametri $E(a)$ minimal bo'ladigan qilib tanlanadi (Messiahx [37, 772-bet] ga qarang):

$$E_a \approx -2 \left(Z - \frac{5}{16} \right)^2 E_H, \quad (13.42)$$

bu yerda $Z = 1/2 \pi \epsilon_0$ va E_H – vodorod atomining asosiy energiyasi. Soniy ravishda, $E_a = -76.6 \text{ eV}$, bu esa tajribaviy aniqlangan qiymat $-76.6 \text{ eV} = E_{\text{exp}}$ ga juda yaqin keladi (Messiahx [37]da berilgan). Qayd etish kerakki, $E_a > E_{\text{exp}}$.

14-BOB. ATOM VA MOLEKULALAR STRUKTURASI

14.1. Kirish

Ushbu bobda biz atom va molekulalarning elektron tuzilmalarini umumiy oʻrganishga qisqa sarguzasht qilamiz, bu 12 va 13-boblardagi rivojlanishlar tufayli mumkin boʻlgan. Bizning maqsadimiz kimyoviy elementlarning kvant nazariyasi asosida aniqlangan elektron tuzilmasiga asoslangan tasnifini koʻrib chiqish va ushbu tuzilma xususiyatlari qanday qilib davriy jadvalda tasniflanganini koʻrib chiqishdir. Bundan tashqari, biz atom bogʻlanishlarining asosiy elementlarini va molekulalarni atomlarni birlashtirish orqali qanday yaratilishini oʻrganamiz.

14.2. Atom elementlarining elektron tuzilmasi

Vodorod atomining ψ_{nlm} orbitalari barcha atom elementlarining elektron tuzilmalarini tasniflash uchun qurilish bloklari sifatida ishlatiladi. Ular vodorod Hamiltonianining bazis funksiyalari boʻlib, ularning mos xos sonlari atomning elektron qobiqlariga mos keluvchi energiya holatlaridir. Elektron orbitalarning ayrim asosiy qoidalari va rivojlanishlarimizdan toʻgʻridan toʻgʻri kelib chiqadigan boshqa xususiyatlar shu vaqtgacha quyidagicha roʻyxatlangan:

1. Energetik qavatlarini bosh kvant soni n ($n = 1, 2, \dots$) ga muvofiq ketma-ketlikda raqamlaymiz.

2. Sferik orbitalar ($l = 0$ ga mos keladigan) ns deb belgilanadi, eng past energetik qavatda $1s$, keyingida $2s$ va hokazo. Bu xossalarni vodorod orbitalarining ψ_{nlm} xususiyatlarini koʻrib chiqib tushunish mumkin. $n = 1, l = 0, m = 0$ uchun bizda $1s$ orbitalli mavjud.

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}, \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2},$$

asosiy holat energiyasi bilan:

$$E_1 = -\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = -13.6 \text{ eV}.$$

$n = 2$ uchun bizda aynan toʻrtta orbita mavjud:

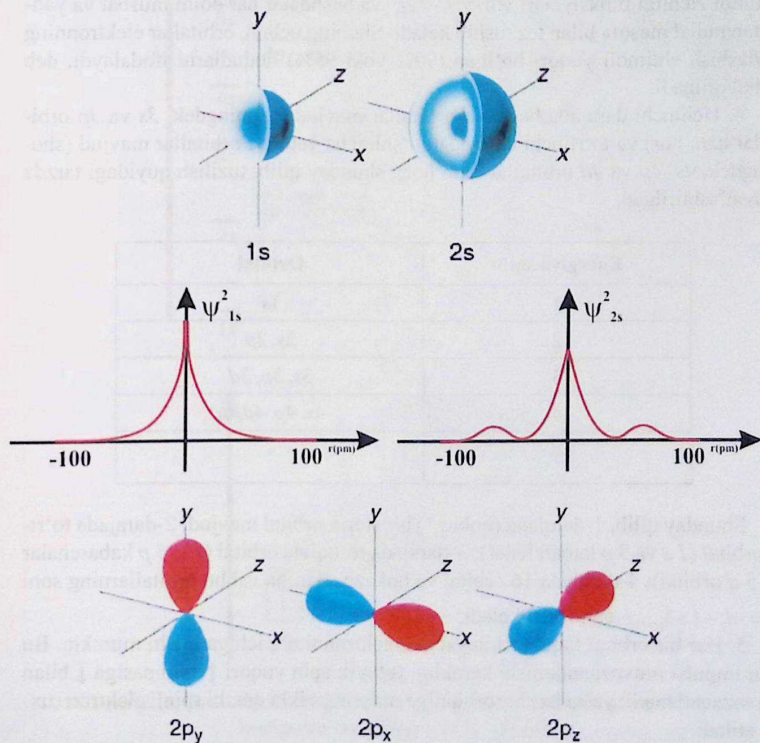
$$\psi_{200}, \psi_{210}, \psi_{211}, \psi_{21-1}.$$

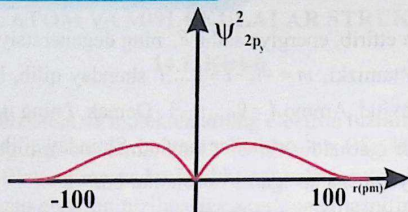
Oxirgi uchtasining chiziqli kombinatsiyalari $2p_x, 2p_y$ va $2p_z$ orbitalarini hosil qiladi. Demak, ikkinchi energiya qobigʻining degeneratsiyasi 4 ga teng va

$$E_2 = -\frac{13.6}{2^2} \text{ eV} = -3.4 \text{ eV} > E_1$$

Shu tarzda davom ettirib, energiya sathi E_n ning degeneratsiyasi n^2 ekanligini aniqlaymiz. Eslatib o'tamizki, $m = -l, -l+1, \dots, l$ shunday qilib, berilgan l uchun $2l+1$ ta m qiymati mavjud. Ammo $l = 0, \dots, n-1$. Demak, l ning n qiymati mavjud va n chi qavatda $\sum_{l=0}^{n-1} (1+2l) = n^2$ orbitalar mavjud. Shunday qilib, n -chi energetik qavatda bir xil energiyaga ega bo'lgan n^2 orbitalar bor.

3. Shuningdek, p -orbitalar 2 va undan yuqori energiya sathlarida paydo bo'ladi (faqat s -orbitalar l -energiya sathida paydo bo'ladi, chunki $l = 0, \dots, n-1$ va ular doimo o'zaro ortogonal bo'lgan uchta komponentda paydo bo'ladi: p_x, p_y, p_z). Ikkinchi energiya sathidagi p -orbitalar $2p_x, 2p_y, 2p_z$ deb belgilanadi; uchinchi sathda esa $3p_x, 3p_y, 3p_z$ va hokazo. Birinchi sathdan tashqari barcha energiya sathlarida p -orbitalar mavjud.





14.1-rasm. $1s$, $2s$ va $2p$ orbitallar va ularning mos ehtimol zichligi komponentlari, ψ_{1s}^2 , ψ_{2s}^2 va ψ_{2p}^2 . (qar. Gil [18, 55–61-betlar]); pm pikometrlarni anglatadi: 10^{-12} m

p orbitalari sharsimon loblar (14.1-rasmga qarang) bo‘laklarning qarama-qarshi tomonlarida orbitalning qarama-qarshi belgilari bilan paydo bo‘ladi. $1s$, $2s$, $2p$ va h.k. orbitalar sferik yoki sharga o‘xshash deb ataladi. Biz kuzatamizki, tegishli ehtimol zichligi funksiyalari ψ_{1s}^2 , ψ_{2s}^2 , $\psi_{2p_x}^2$ va boshqalar har doim musbat va yadrodan radial masofa bilan tez tushib ketadi. Shuning uchun, orbitalar elektronning joylashish ehtimoli yuqori bo‘lgan (90% yoki 95%) hududlarni ifodalaydi, deb qabul qilinadi.

4. Uchinchi darajada beshta d orbitalar mavjud (shuningdek, $3s$ va $3p$ orbitalar ham bor) va to‘rtinchi darajada qo‘shimcha yettita f orbitalar mavjud (shuningdek, $4s$, $4p$ va $4d$ orbitalar ham bor), shunday qilib, tuzilish quyidagi tarzda jadvashtirilgan.

Energiya sathi	Orbital
1	$1s$
2	$2s, 2p$
3	$3s, 3p, 3d$
4	$4s, 4p, 4d, 4f$
$\vdots$	$\vdots$

Shunday qilib, 1-darajada (qobiq 1) bir sferik orbital mavjud; 2-darajada to‘rtta orbital ($1s$ va $3p$ kabarchalar); 3-darajada to‘qqizta orbital ($1s$, $3p$ kabarchalar va $5d$ orbital); 4-darajada 16 orbital va hokazo. Barcha ushbu orbitalarning soni $m = -l, -l+1, \dots, l$ ga to‘g‘ri keladi.

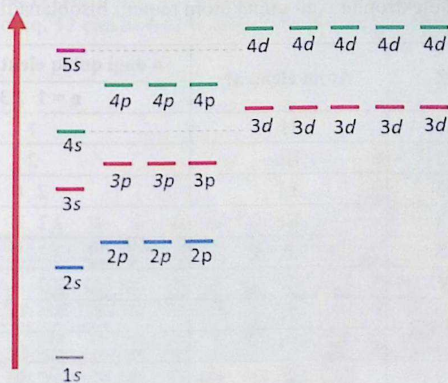
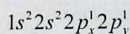
5. Har bir orbital faqat (ikkitagacha) elektronni o‘z ichiga olishi mumkin. Bu spin impulsi muvozanatlanishi kerakligi tufayli: spin yuqori $\uparrow$ spin pastga $\downarrow$ bilan muvozanatlanadi; ya‘ni har bir orbitalga maksimal ikki qarshi spinli elektron ruxsat etiladi.

6. Elektronlar past energiyali orbitallarni (yadroga yaqin bo'lganlarni) yuqori energiyali orbitallardan oldin to'ldiradi. Masalan, s orbitallar p orbitallarga nisbatan har doim biroz pastroq energiyaga ega bo'ladi, ya'ni s orbitallar p orbitallardan oldin to'ldiradi.

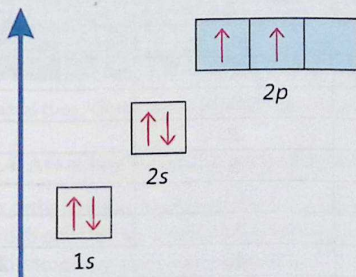
7. Umumiy elektron konfiguratsiya belgilash yordamida quyidagi qoidadan foydalaniladi

$$ns^{\alpha}n'p^{\beta}n''d^{\gamma}\dots (n, n', n'', \dots = \text{energiya darajasi}, \alpha, \beta, \gamma \geq 1),$$

shuningdek, har bir elementga uning elektron konfiguratsiyasini aniqlovchi belgi beriladi. Masalan, uglerod olti elektronga ega va uning maxsus konfiguratsiyasi



(a)



(b)

14.2-rasm. (a) Turli orbitallarning tipik energiya sathlari va (b) karbonning elektron konfiguratsiyasi $C(2,4) \sim 1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$

bo'lib, bu $1s$ orbitalda ikki elektron, $2s$ orbitalda ikki elektron, $2p_x$ va $2p_y$ orbital-larda bittadan elektron mavjudligini anglatadi (14.2-rasmga qarang).

14.3. Davriy jadval

Biz yaqinda o'rnatgan qoidalar va xususiyatlardan foydalanib, tabiatda uch-raydigan atomlarni ularning elektron tuzilmalari bo'yicha toifalashni boshlashi-miz mumkin. Bu ma'lumotlar 14.3-rasmda keltirilgan davriy jadvalda qulay tarz-da ko'rsatilgan. Ushbu klassik jadval, XVIII asrgacha bo'lgan ilk shakllar, butun olam moddasi faqat 100 dan ortiq asosiy elementlardan (bizning jadvalimizda 118) iborat ekanligini, ularning elektronlar soni, elektron tuzilishi va massasi bilan farqlanishini tan oladi. Yuqoridagi atomlar va davriy jadvalda ko'rsatilgan atom-lar vodorod uchun H , geliy uchun He kabi bitta yoki ikki harf bilan qisqartiriladi. Har bir elementdagi elektronlar soni uning atom raqami hisoblanadi va atomning

Davr	Z	Atom element	n dagi qobiq elektronlar soni
			n = 1 2 3 4
1	1	H	1
	2	He	2
2	3	Li	2 1
	4	Be	2 2
	5	B	2 3
	6	C	2 4
	7	N	2 5
	8	O	2 6
	9	F	2 7
	10	Ne	2 8
3	11	Na	2 8 1
	12	Mg	2 8 2
	13	Al	2 8 3
	14	Si	2 8 4
	15	P	2 8 5
	16	S	2 8 6
	17	Cl	2 8 7
	18	Ar	2 8 8
4	19	K	2 8 8 1
	20	Ca	2 8 8 2
	⋮	⋮	⋮

energiya qavati soni uning davri deb ataladi (shu tariqa, «davriy jadval»). Jadvalda shuningdek, atomning har bir elementning massasi, protonlar soni va uning yadrosidagi neytronlarning oʻrtacha sonining koʻpligi (berilgan element uchun, neytronlar soni oʻzgarishi mumkin va ular elementning izotoplari deb ataladi). Jadval shunday tashkil etilganki, uning qatorlari elementlarning davrlariga mos keladi. Shunday qilib, birinchi qatordagi elementlar bitta energiya qobigʻiga, ikkinchi qatordagilar ikki qobigʻiga ega va hokazo. Shunday qilib, jadvalda yettita qator mavjud, ular odatda K, L, M, N, O, P, Q deb nomlanadi. Jadvalning ustunlari guruhlar deb ataladi. Umuman olganda, bir guruhdagi elementlar tashqi orbitallarida bir xil elektronlar soniga ega, lekin istisnolar mavjud (masalan, geliyning tashqi qobigʻida ikki elektron bor, lekin 8 guruhda joylashgan). Masalan, natriy 3-davrda (uchta qobiq), 1-guruhda (uning tashqi qobigʻida bir elektron) va atom raqami 11 (11 elektron, 2 K qobigʻida, 8 L qobigʻida va 1 M qobigʻida). Xlor 3-davrda, 7a guruhda: 3 qobiq, 17 elektron (2 K qobigʻida, 8 L qobigʻida va 7 M qobigʻida).

The image shows a standard periodic table of elements. It is organized into rows (periods) and columns (groups). The elements are color-coded: Group 1 (IA) is green, Group 2 (IIA) is orange, Groups 3-10 (transition metals) are red, Groups 11-18 (post-transition metals and non-metals) are yellow, and the noble gases (Group 18) are pink. The lanthanide and actinide series are shown at the bottom in blue and green respectively. Each element cell contains its symbol, name in Russian, atomic number, and name in Latin.

14.3-rasm. Davriy jadval (Los Alamos milliy laboratoriyasi ruxsati bilan nusxalangan).

14.4. Atom bogʻlanishlari va molekularlar

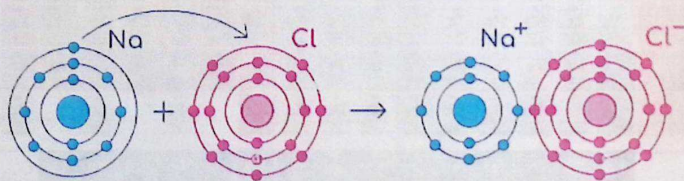
Ikkita yoki undan ortiq atomlar kuchli tarzda birgalikda ushlanganda, biz yigʻindisini molekula deb ataymiz va ularning yigʻindisini birgalikda ushlaydigan kuchlar kimyoviy yoki atom bogʻlanishlari deb ataladi. Har bir atomning boshqalar bilan birlashish xususiyati uning valentligi deb ataladi, bu uning qancha bogʻlar hosil qilishi mumkinligini oʻlchaydi. Umuman olganda, atomning valentligi uning tashqi qobigʻini toʻldirish uchun zarur boʻlgan elektronlar sonidir. Ma-

salan, vodorod atomida bir «erkin» elektron bor va unga valentlik 1 belgilanadi. U «bir valent» deb aytilgan. Ikkita vodorod atomi bilan bog'lanishi mumkin bo'lgan kislorod, H_2O hosil qilish uchun, valentligi 2 bo'ladi. Shunday qilib, atomning tashqi qobig'idagi elektronlar soni atomning valentligini aniqlaydi.

Atom bog'lanishining asosiy prinsipi shundaki, (a) atom tuzilmalari elektron qobiqlari to'liq to'ldirilmagan bo'lganda eng barqaror va (b) atomlar qobiqlarini to'ldirish uchun bir yoki bir necha elektronlarni bo'lishadi va umumiy energiya holatiga ega bo'ladi. Bog'lanishlarning bir necha turlari mavjud va biz eng keng tarqalgan tuzilmalarni quyida tasvirlaymiz.

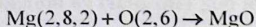
Ion bog'lanishlari. Ion yoki elektrovalent bog'lanishlar – bu bir yoki bir necha elektronlarni bir atomdan boshqasiga o'tishi natijasida ikki teskari zaryadli ionlarni hosil qilish, elektr kuchini hosil qilish va atomlarni birgalikda ushlash uchun ixtiyoriy kimyoviy bog'lanishlardir. Beruvchi atom musbat zaryadni oladi va musbat ion bo'ladi, qabul qiluvchi atom manfiy zaryadni oladi (manfiy ionga aylanadi) va biriktirilgan atomlar neytral zaryadga ega bo'ladi.

Eng keng tarqalgan misol stol tuzi: $NaCl$. Natriyning atom soni 11 bo'lib, uning birinchi qobig'ida ikki elektron ($2s, 2p, 2p, 2p$), ikkinchi qobig'ida sakkiz va tashqi qobig'ida bir $3s$ elektron bor ($Na(2,8,1)$ Na deb yoziladi). Natriy ioni tashqi qobig'idagi elektron olib tashlanganda hosil bo'ladi, $Na^+ = Na(2,8,-)$. Xlorda 17 elektron bor: $Cl(2,8,7)$ va $Cl^- = Cl(2,8,8)$. Shunday qilib, natriy va xlor birlashganda ion bog'lanish hosil bo'ladi, natijada natriy xlorid $NaCl$ hosil bo'ladi. Bu 14.4-rasmda sxemaviy tarzda ko'rsatilgan.

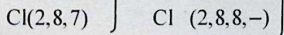
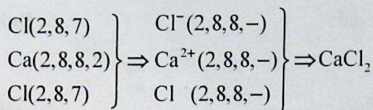
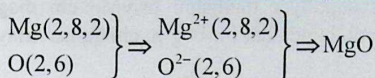


14.4-rasm. Natriy va xlorning ion bog'lanishining Bohr tasviri.
(Natriy atom raqami 11, Xlor atom raqami 17)

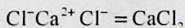
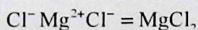
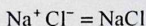
Ion bog'lanishining boshqa misollari magniy oksidi:



magniy Mg tashqi qobig'idan 2 ta elektron olib, ularni kislorod O tashqi qobig'iga qo'shish va konfiguratsiyani $(2,8)$ to'ldirish uchun, shunday qilib qobiqlar to'liq bo'lishi uchun. Kalsiy xloridi bir kalsiy atomini $Ca(2,8,8,2)$ va ikki xlor atomini $Cl(2,8,7)$ qamrab oladi, $CaCl_2$ hosil qilish uchun. Simvolik ravishda, oxirgi ikki bog'lanish quyidagicha tasvirlangan:



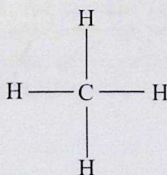
Bu bog‘lanish o‘tishlarini ilk bor turli modellari orqali tasvirlash odatiy amaliyot bo‘lib, 14.4-rasmda ko‘rsatilganidek yoki ramziy tarzda, ionlashgan atomlarning birlashishidir:



Kovalent bog‘lanishlar. Kovalent bog‘lanishlar – bu atomlar tomonidan tashqi qobig‘ini to‘ldirish uchun elektronlar juftlari bo‘lishiladigan yana bir turdagi molekular orasidagi bog‘lanish. Kovalent bog‘lanishlar yo‘nalish yoki yo‘naltilish bilan belgilanishi mumkin, chunki bog‘langan atomlar bir-biriga nisbatan o‘rnatilgan holatda qolishga moyil.

Ikkita to‘ldirilmagan qobig‘iga ega bo‘lgan atomlar bir-biriga yaqin bo‘lganda, tashqi qobig‘ning orbitallari birlashib, molekulyar bog‘lanish orbitali va anti-bog‘lanish orbitali (qaytaruvchi kuchlar ustun bo‘lishi mumkin bo‘lgan joyda) hosil bo‘lishi mumkin. Bog‘lanish orbitali ikki elektron bilan to‘ldirilganda va anti-bog‘lanish orbitali bo‘sh bo‘lganida, barqaror kovalent bog‘lanish hosil bo‘ladi. Albatta, to‘liq bog‘lanish orbitali asl orbitaldan ko‘ra barqaror. Ikkita atom orbitali «boshqa-boshga» to‘qnashganda va deyarli doiraviy kesim bilan kesishish natijasida, bog‘ ba‘zan sigma bog‘ deb ataladi va eng kuchli kovalent bog‘dir.

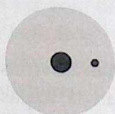
Kovalent bog‘lanishni o‘z ichiga olgan molekulaning eng keng tarqalgan misollaridan biri metan: bir uglerod atomi C(2,4) to‘rtta vodorod atomlari H(1) bilan bog‘langan; standart ramziy yozuv bilan, bir chiziqli bog‘ va bo‘lishilgan elektronni ko‘rsatadi:



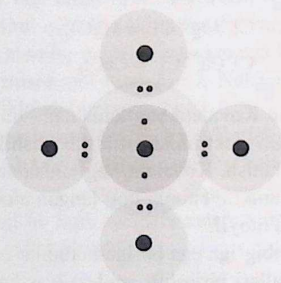
Bohrning ko‘proq murakkab, ammo aniq modeli 14.5-rasmda keltirilgan.

Yuqoridagi kabi molekulyar tuzilishni tasvirlovchi diagrammalar chiziqli diagrammalar deb ataladi, bunda har bir bog'ni chiziqli tasvirlaydi.

Vodorod

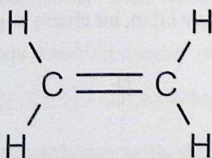


Uglerod

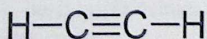


14.5-rasm. Metan hosil qilish uchun uglerod atomi va to'rtta vodorod atomining kovalent bog'lanishi

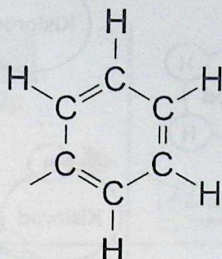
Atomning valentligi atomni ifodalovchi harf atrofidagi birdan sakkizta nuqta bilan ifodalanishi mumkin va chiziqchalar kovalent bog'larni ko'rsatadi. Klassik belgilashda biz, masalan, eten – C_2H_4 ni quyidagicha keltiramiz.



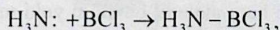
yoki etin – C_2H_2 ni:



yoki benzol – C_6H_6 ni:



yoki biz bog‘lanishni reaksiya sifatida yozamiz. Masalan, ammiak H_3N (valentligi 2) bor trixloridi BCl_3 bilan birlashadi:

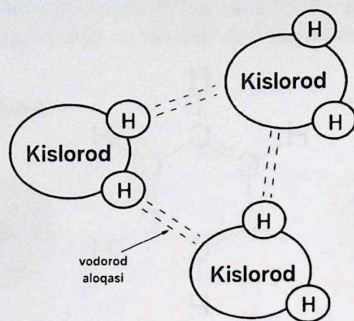


chiziq kovalent bog‘lanishni ko‘rsatadi.

Metall bog‘lanishlar. Metallarda, odatda faqat birdan uchtagacha elektronlar tashqi qobig‘ida bo‘lib, tashqi elektronlar atomlarni tark etadi va umumiy elektron bulutiga aylanadi, faqat birlashtirilgan atomlarning yadrolariga birlashtirilgan. Ushbu elektronlar harakatchanlikka ega va issiqlik yoki elektr o‘tkazuvchanligini ta‘minlaydi.

Vodorod bog‘lanishlari. Vodorodni o‘z ichiga olgan kovalent bog‘langan molekullarda, masalan H_2O , kovalent bog‘lanishlar tomonidan bo‘lishilgan elektronlar vodorod atomlaridan uzoqroq to‘planishga moyil, bu vodorod atomi atrofida kichik musbat zaryadni va uning donori (masalan, kislorod yoki azot) atrofida kichik manfiy zaryadni qoldiradi. Bir molekulaning manfiy zaryadlangan qismi musbat zaryadlangan uchiga tortiladi va vodorod bog‘lanishini hosil qiladi. Vazirning sxemasi 14.6-rasmda ko‘rsatilgan.

Shu tariqa vodorod bog‘lanishi atomlar emas, balki molekullar o‘rtasidagi bog‘lanishdir. Bu ikki atom kovalent bog‘langan elektronlarni nomutanosib ravishda bo‘lishadigan, natijada molekulaning bir qismi o‘rtacha ko‘proq elektronlarni jalb qiladigan va shu bilan biroz manfiy zaryadga ega bo‘ladigan, ikkinchi qismi esa biroz musbat zaryadga ega bo‘ladigan holatning umumiy misolidir. Elektronlarning eng ko‘p sonini jalb qiluvchi atom boshqa atomga nisbatan yuqori elektromanfiylikka ega deyiladi.



14.6-rasm. Uchta suv molekulasida ishtirokidagi vodorod bog'lanishlarining namunasi

Van der Waals bog'lanishlari. Van der Waals bog'lanishi, shuningdek, Van der Waals o'zaro ta'siri deb ham ataladi, bu atom yoki molekulyar zaryad taqsimotlari yoki dipollardan kelib chiqadigan zaif, ikkinchi darajali molekulalar orasidagi bog'lanish bo'lib, yaqin atrofdagi elektronlarning tebranish polarizatsiyalari tufayli yuzaga keladi. Ular atom yoki molekula ichidagi musbat yoki manfiy zaryadlar o'rtasida ajralish bo'lganda yuzaga keladi.

Kovalent, ion va metall bog'lanishlari birinchi darajali bog'lanishlar deb ataladi, Van der Waals va vodorod bog'lanishlari esa ikkinchi darajali bog'lanishlar deb ataladi.

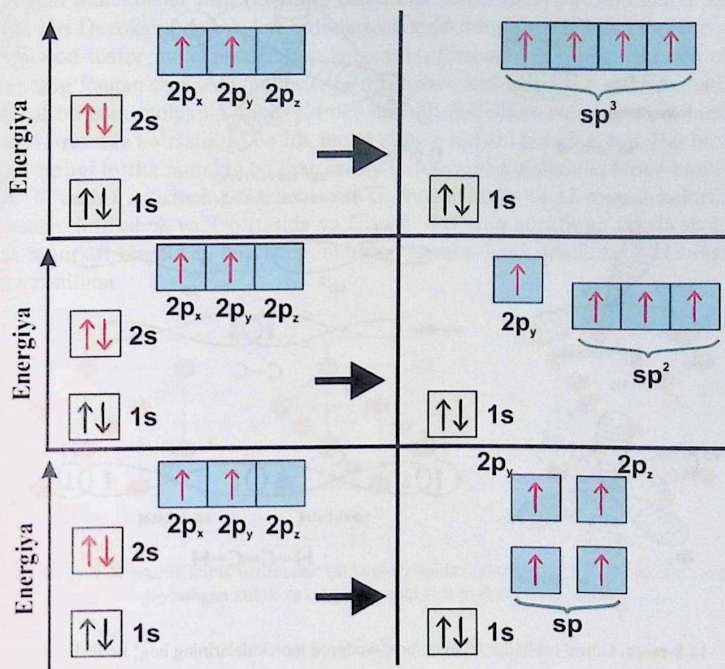
Gibridlashish. Ko'plab birikmalarda orbitallar gibridlashish deb ataladigan jarayonda aralashadi. Odatda, $2s$ va $2p$ orbitalar uch xil orbitalarni hosil qilish uchun aralashadi:

- sp^3 gibridlashuv, bunda $2s$ barcha uchta $2p$ orbitalari bilan aralashadi;
- sp^2 gibridlashuv, bunda $2s$ ikki $2p$ orbitalari bilan aralashadi;
- sp gibridlashuv, bunda $2s$ bir $2p$ orbitalari bilan aralashadi.

«Mikslash» bilan biz orbitalarning $2s + 2p_x$ va boshqalarning chiziqli kombinatsiyasi hosil bo'lishini, bu esa ma'lum birikmalarning barqaror elektron konfiguratsiyalariga mos keladigan orbital shakllarini buzishini nazarda tutamiz.

sp^3 gibridlashuvining energiya sathlari 14.7-rasmda tasvirlangan, uzunchoq orbital bilan, uning asosiy va kichik loblari bor (14.8-rasmga qarang). Ilgari tasvirlangan metan molekulasida aslida ko'rsatilgan uch o'lchamli tuzilma orqali yaratiladi, to'rtta vodorod atomi tetraedr tuzilishi o'qlari bo'ylab sp^3 orbitali to'rtta loblari bilan kuchli σ -bog'lanishni hosil qiladi. sp^2 gibridlashuvi 14.8-rasmda ko'rsatilgan uch lobli orbitalni hosil qiladi va ilgari kiritilgan alkinlar yoki eten molekulasida uch bog'lanish tuzilishini ta'minlaydi. sp gibridlashuvida ikkita yarim to'ldiril-

gan $2p$ orbitali va ikkita yarim to'ldirilgan sp orbitali mavjud. Bu tuzilma etin kabi molekulalarda bog'lanishni qo'llab-quvvatlaydi.

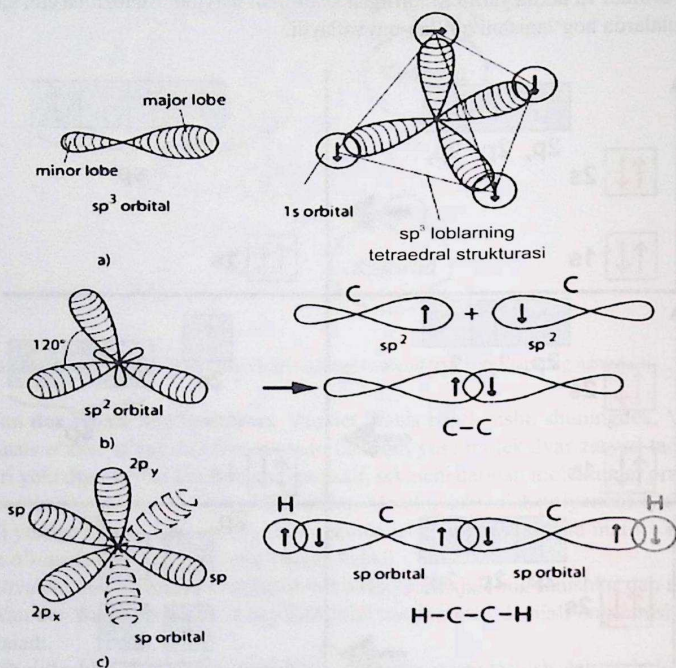


14.7-rasm. Uglerod atomining gibrid orbitalari

14.5. Molekulyar tuzilmalarga misollar

Molekulyar tuzilmalarning aniq turlari bir necha ilmiy fanlarning asoslarini tashkil qiladi, jumladan materiallar ilmi, polimer kimyosi va hujayra biologiyasi. Biz ushbu bo'limda shunday tuzilmalarning bir nechta misollarini keltiramiz.

Kristall qattiq moddalar. Biz kundalik hayotda uchraydigan ko'pchilik qattiq moddalar – metallar, ohaktosh, qum, gilim, tuz va hokazo kristall tuzilmalarga ega: atomlarning regulyar, takrorlanuvchi joylashuvi (komnata haroratida). Kristalllarda atomlar minimal energiya konfiguratsiyalarida birgalikda yaqin joylashgan va hujayralarda metallik yoki kovalent bog'langan atomlarning takrorlanuvchi klasterlarida tashkil topgan to'rtburchak hosil qiladi. Bunday kristall tuzilmalarning fizik xususiyatlarini o'rganish kristallografiya deb ataladi.

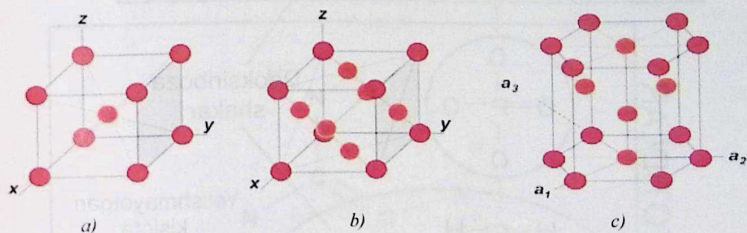


14.8-rasm. Gibrid orbitalalar bilan uglerod-vodorod molekularining bog' tuzilishi

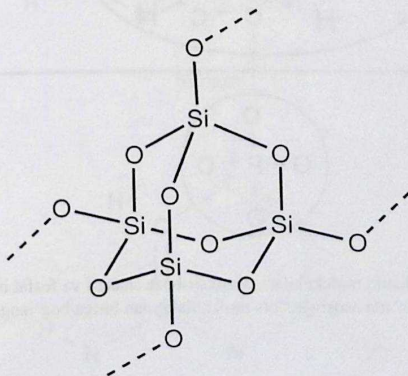
Materiyada 14 turdagi kristall tuzilmalar mavjud bo'lib, ular orasida eng sodalari har burchagida atomlar joylashgan kubik birliklardir. Bu toifada, qo'shimcha atomlar kubik birlik ichida joylashtirilib, uning barqarorligini ta'minlaydi. Ko'pchilik metallar kubik to'r tuzilmalariga ega va ulardan bir nechtasi quyidagi shakllarda bo'lishi mumkin: kubik, tana-markazlashgan kubik (bcc), kub ichidagi atomlar bilan yoki yuza-markazlashgan kubik (fcc), kub yuzalardagi atomlar bilan. Boshqa kristall qattiq moddalar yanada murakkab to'r tuzilmalariga ega, masalan, geksagonal yaqin joylashgan (hcp), shaklan geksagonal va diagonallar bo'ylab atomlar bilan. Ushbu to'r molekularining sxemalari 14.9-rasmda keltirilgan.

Amorf qattiq moddalar. Molekulalardan iborat qattiq materiallar atomlari umumiy tartibli bo'lmagan, umumiy davriyliksiz, umumiy sxemada bo'lgan materiallar amorf qattiq moddalar deb ataladi. Masalan, shisha va ayrim plastiklar. 14.10-rasmda SiO_2 (kvars) ko'rsatilgan, bu amorf qattiq moddadir.

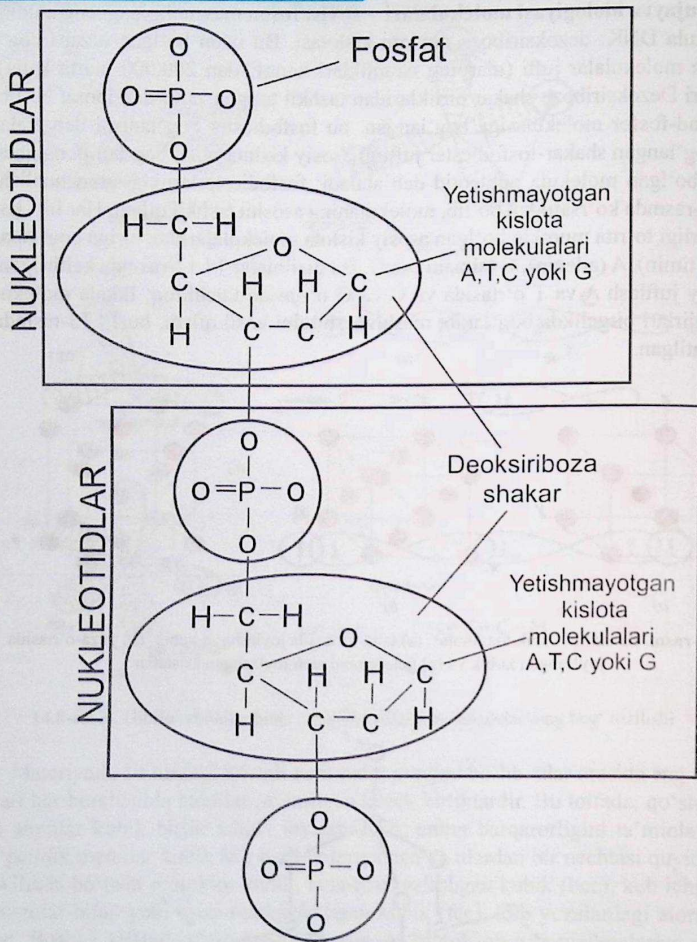
Hujayra biologiyasi molekulari – DNK. Inson mavjudligidagi eng muhim molekula DNK: dezoksiriboza nuklein kislotasi. Bu uzun bo‘lgan o‘zaro bog‘langan molekular jufti (ularning uzunliklari kenglikdan 200,000 marta katta), har biri Dezoksiriboza shakar birliklaridan tashkil topgan zanjirdan iborat bo‘lib, kislorod-fosfor molekulasiga bog‘langan, bu fosfodiester bog‘lanishi deb ataladi. Bog‘langan shakar-fosfodiester juftligi asosiy kislota bilan bog‘lanib, natijada hosil bo‘lgan molekula nukleotid deb ataladi; fosfodiesterlarning atom tuzilishi 14.11-rasmda ko‘rsatilgan bo‘lib, molekulaning asosini tashkil qiladi. Har bir shakar birligi to‘rtta mumkin bo‘lgan asosiy kislota molekularidan biriga bog‘lanadi: T (timin), A (adenin), C (sitozin) va G. Bu tuzilmalar 14.12-rasmda keltirilgan. Asosiy juftlash A va T o‘rtasida va C va G o‘rtasida kuchliroq. Ikkala molekula zanjirlari birgalikda bog‘lanib, mashhur spiralni hosil qiladi, bu 14.13-rasmda ko‘rsatilgan.



14.9-rasm. Kristallik kubik tuzilmalar: (a) tana-o‘rtasida joylashgan kubik, (b) yuza-o‘rtasida joylashgan kubik va (c) geksagonal zich joylashgan kristallar

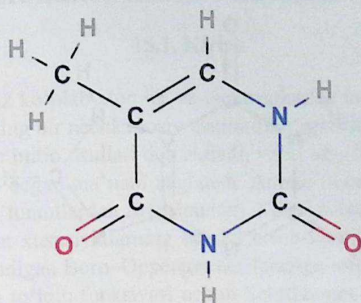


14.10-rasm. SiO_2 (kvars) molekulyar tuzilishi

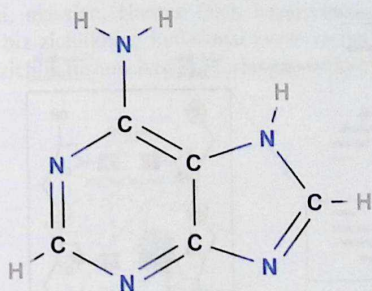


14.11-rasm. DNK nukleotid molekulari, dezoksiriboza shakari va fosfat birliklaridan iborat bo'lib, to'rtta asosiy kislota molekularidan biriga bog'langan

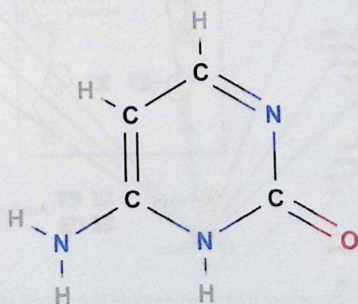
Tiamin



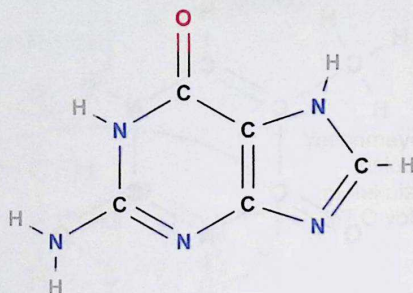
Adenin



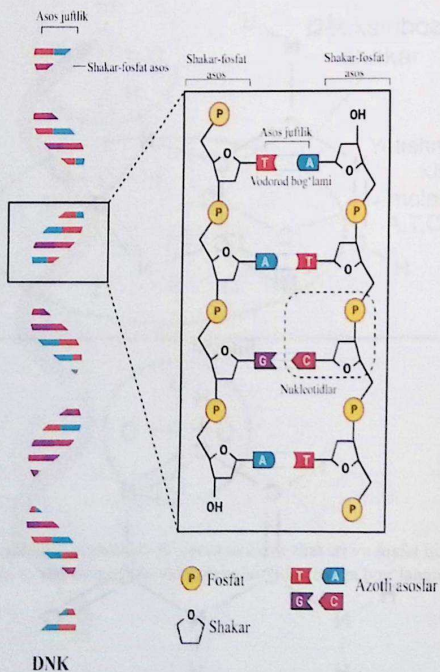
Sitozin



Guanin



14.12-rasm. To'rtta asosiy kislota molekulari: T, A, C va G

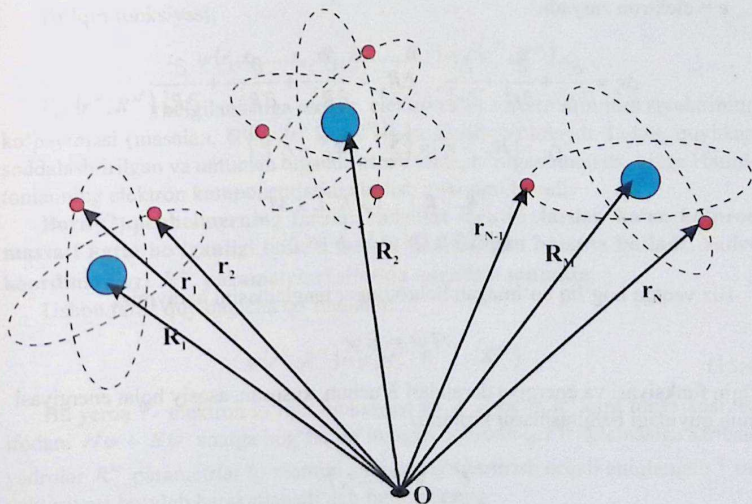


14.13-rasm. DNK ikki marta spirali, asosiy kislotalarning bog'lanishini ko'rsatmoqda

15-BOB. BOSHLANG'ICH MA'LUMOTLAR, TAQIRIBIY USULLAR VA ZICHLIK FUNKSIONAL NAZARIYASI

15.1. Kirish

Ushbu bobda biz ko'plab atomlar va elektronlardan tashkil topgan kvant tizimlarini o'rganishning bir necha asosiy usullarini o'rganishga kirishamiz. Ushbu usullar ko'pincha ab initio usullari deb ataladi, ya'ni «boshlang'ich asoslaridan» yoki «bir boshidan» degan ma'noni anglatadi. Ammo ularning barchasida farazlar yoki empirik ma'lumotlardan foydalaniladi. Misol uchun, biz bu yerda ko'rib chiqayotgan elektron xususiyatlarning barcha hisob-kitoblarida keyingi bo'limda muhokama qilinadigan Born–Oppenheimer faraziga asoslanamiz. Darhaqiqat, bunday tizimlarning to'liq funksiyasi uchun Schrödinger tenglamasini aniq yechish mutlaqo mumkin emasligi sababli, biz Rayleigh–Ritz yondashuvidan foydalangan holda asosiy holat energiyalarining eng yuqori aniqlikdagi taqribiy qiymatlarini aniqlaymiz. Biz bunday tizimlar uchun bir qancha fundamental to'liq funksiyasi usullarini, masalan, Hartree–Fock nazariyasini muhokama qilamiz. Lekin eng muhimi, biz zichlikning funksional nazariyasiga kirishni ham taqdim etamiz, bu elektron zichlik tushunchasiga asoslangan to'liq funksiyasi usullariga kuchli muqobildir.



15.1-rasm. M yadro va N elektrondan tashkil topgan molekulyar sistema

15.2. Born-Oppenheimer yaqinlashishi

Endi biz M atomlari va N elektronlarning umumiy sonidan tashkil topgan umumiy molekulyar tizimni ko'rib chiqmoqchimiz, masalan 15.1-rasmda ko'rsatilgan holatga qaraymiz. Bu $(N + M)$ – tana muammosi. M yadrolari O markazdan chiquvchi $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_M$ radius vektorlari, N elektronlar esa $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$ radius vektorlari orqali aniqlanadi. Yadrolarning zaryadlari $Z_K e, K = 1, 2, \dots, M$. Bu umumiy molekulyar tizim uchun norelyativistik Hamiltoniandir.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_{\mathbf{r}_i} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{K=1}^M \frac{1}{M_K} \Delta_{\mathbf{R}_K} + \sum_{K=1}^M \left(-\sum_{i=1}^N \frac{Z_K e^2}{4\pi \epsilon_0 r_{Ki}} + \sum_{L>K} \frac{Z_K Z_L e^2}{4\pi \epsilon_0 R_K} \right) + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r_{ij}}. \quad (15.1)$$

Bu yerda biz odatdagi belgilashlarni qo'llaymiz:

m = elektron massasi,

M_K = K yadrosining massasi,

eZ_K = K yadro zaryadi,

e = elektron zaryadi,

$$\Delta_{\mathbf{r}_i} = \frac{\partial^2}{\partial r_{i1}^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_{i2}^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_{i3}^2}, \quad \Delta_{\mathbf{R}_K} = \frac{\partial^2}{\partial R_{K1}^2} + \frac{\partial^2}{\partial R_{K2}^2} + \frac{\partial^2}{\partial R_{K3}^2},$$

$$r_K = |\mathbf{R}_K - \mathbf{r}_i| = \left\{ \sum_{j=1}^3 |\mathbf{R}_K - \mathbf{r}_j|^2 \right\}^{1/2},$$

$$R_K = |\mathbf{R}_K - \mathbf{R}_L|, \quad 1 \leq K, L \leq M,$$

$$r_i = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, \quad 1 \leq i, j \leq N.$$

Biz vaqtga bog'liq bo'lmagan Schrödinger tenglamasini qaraymiz:

$$H\psi = E\psi,$$

to'liq funksiyasi va energiya darajalari E uchun, xususan, asosiy holat energiyasi uchun quyidagi belgilashlarni kiritamiz:

$$\mathbf{r}^N = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N),$$

$$\mathbf{R}^M = (\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_M),$$

(15.1) dagi Hamiltonianni qisqacha shunday yozish mumkin:

$$H = T_e(\mathbf{r}^N) + T_M(\mathbf{R}^M) + V_{df}(\mathbf{r}^N, \mathbf{R}^M) + V_M(\mathbf{R}^M) + V_e(\mathbf{r}^N), \quad (15.2)$$

Bu yerda T_e va T_M elektron va yadro kinetik energiya hadlari ((15.1) ning o'ng tomonidagi birinchi ikkita hadlar), V_{eM} – bog'langan elektron-yadro potentsiali, V_{MM} – yadroviy Coulomb potentsiali va V_{ee} – (15.1) dagi oxirgi had elektron Coulomb potentsialidir. Xususan,

$$T_e(\mathbf{r}^N) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_{r_i},$$

$$T_M(\mathbf{R}^M) = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{K=1}^M \frac{1}{M_K} \Delta_{R_K},$$

$$V_{df}(\mathbf{r}^N, \mathbf{R}^M) = -\sum_{K=1}^M \sum_{i=1}^N \frac{Z_K e^2}{4\pi \epsilon_0 r_{K_i}}, \quad (15.3)$$

$$V_M(\mathbf{R}^M) = -\sum_{K=1}^M \sum_{L>K}^M \frac{Z_K Z_L e^2}{4\pi \epsilon_0 R_K}, \quad V_e(\mathbf{r}^N) = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r_{ij}}.$$

To'lqin funksiyasi,

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_N, R_1, R_2, \dots, R_M) = \psi(\mathbf{r}^N, \mathbf{R}^M),$$

$V_{df}(\mathbf{r}^N, \mathbf{R}^M)$ belgilanishiga asosan, elektron va yadro to'lqin funksiyalarining ko'paytmasi (masalan, $\psi = \psi_1(\mathbf{r}^N) \psi_2(\mathbf{R}^M)$) ga ajratib bo'lmaydi. Lekin, quyidagi soddalashtirilgan va umuman olganda asosli faraz, berilgan nuqtada, bizga Hamiltonianning elektron komponentlarini ajratish imkonini beradi:

Born-Oppenheimerning farazi: Yadrolar elektronlardan ko'ra ko'proq massasi katta bo'lganligi bois, u fazoda fiksirlangan holatda bo'ladi. Yadro koordinatalari $\mathbf{R}^M$ parametrlari sifatida qaralishi mumkin.

Ushbu faraz quyidagicha qo'llaniladi:

$$\psi(\mathbf{r}^N, \mathbf{R}^M) = \psi_e(\mathbf{r}^N, \mathbf{R}^M) \chi(\mathbf{R}^M) \quad (15.4)$$

Bu yerda ψ_e elektron to'lqin funksiyasi va χ – yadro to'lqini funksiyasi. Bu ifodani $H\psi = E\psi$ vaqtga bog'liq bo'lmagan Schrödinger tenglamasiga kiritdik, yadrolar $\mathbf{R}^M$ parametrlar to'plamini shunday o'zgartirish orqali aniqlangan τ traektoriyasi bo'ylab harakatlanadi deb faraz qilamiz.

$$\langle \psi, \psi \rangle_r = \int_{\mathbb{R}^{3N}} \psi_e^* \psi_e d^{3N}r = 1 \quad \forall \mathbf{R}^M \in \tau,$$

va bu ham

$$\langle \chi, \chi \rangle_R \equiv \int_{\mathbb{R}^{3M}} \chi^* \chi d^{3M} R = 1.$$

Keyin, berilgan R^M uchun, biz bor

$$E \psi_e \chi = H_{elec} \psi_e \chi + H_{nuc} \psi_e \chi, \quad (15.5)$$

bu yerda H_{elec} va H_{nuc} elektron va yadroviy Hamiltonianlar,

$$\begin{aligned} H_{elec} &= T_e(\mathbf{r}^N) + V_{Bf}(\mathbf{r}^N, \mathbf{R}^M) + V_e(\mathbf{r}^N), \\ H_{nuc} &= T_M(\mathbf{R}^M) + V_M(\mathbf{R}^M), \end{aligned} \quad (15.6)$$

va $\psi_e = \psi_e(\mathbf{r}^N, \mathbf{R}^M)$. Elektron uchun Schrödinger tenglamasi

$$E_{elec}(\mathbf{R}^M) \psi_e(\mathbf{r}^N, \mathbf{R}^M) = H_{elec} \psi_e(\mathbf{r}^N, \mathbf{R}^M), \quad (15.7)$$

ekanligidan (15.5) dan quyidagi hosil bo'ladi:

$$E = E_{elec}(\mathbf{R}^M) + \frac{H_{nuc} \chi}{\chi}. \quad (15.8)$$

Demak, yadro uchun Schrödinger tenglamasini quyidagicha yozish mumkin:

$$E_\chi = (T_M(\mathbf{R}^M) + V_M(\mathbf{R}^M) + E_{elec}(\mathbf{R}^M)) \chi. \quad (15.9)$$

Elektron uchun xos qiymat masalasining yechimi (15.7) energiya $E_{elec}(\mathbf{R}^M)$ ni aniqlaydi va $\mathbf{R}^M$ parametriga bog'liq va $E_{elec}(\mathbf{R}^M)$ funksiyasi esa Born-Oppenheimer sirtini aniqlaydi. Har bir energiya darajasi E_{elec}^n uchun shunday sirt mos keladi va (15.9) e'tiborga olsak, berilgan $\mathbf{R}^M$ uchun yadrolararo potensial quyidagi ko'rinishga ega

$$V_M(\mathbf{R}^M) = V_M(\mathbf{R}^M) + E_{elec}(\mathbf{R}^M). \quad (15.10)$$

Berilgan sirtlar uchun uchun $E_{elec}(\mathbf{R}^M)$ sirtidagi yadro dinamikasi $\Psi(\mathbf{R}^M, t)$ to'liq funksiyasi uchun vaqtga bog'liq Schrödinger tenglamasi bilan tasvirlash mumkin.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{R}^M, t) = (T_M(\mathbf{R}^M) + V_M(\mathbf{R}^M)) \Psi(\mathbf{R}^M, t).$$

Yadro tizimi vaqt o'tishi bilan sekin o'zgarib borar ekan, taqqoslash uchun elektron tizim mohiyatan to'satdan reaksiya beradi va elektron tizim R^M parametrlarining belgilangan qiymati bilan aniqlanadi.

Ko'p atomli, molekulyar kvant mexanikasidagi deyarli har bir hisob Born–Oppenheimer faraziga asoslanadi va biz uni ushbu bobda keyingi barcha ishlanmalarda qo'llaymiz. Umuman olganda, yadrolar fazoda fiksirlanganligi sababli va faqat elektron xususiyatlar qiziqish uyg'otadi deb faraz qilamiz, shuning uchun tizimning Hamiltoniani (15.7) elektronning Hamiltoniandir. Shunday qilib, bundan keyin, Hamiltonian tomonidan

$H = H_{elec} = T_e + V_{eM} + V_{ee}$, asosiy holat energiyasi deganda biz $E = E_{elec}$ tushunamiz va yadrolarning koordinatalari o'zgarmas parametrlardir.

15.3. Hartree va Hartree–Fock usullari

Ko'p atomli tizimlarning asosiy holat energiyasi uchun o'zgaruvchan muammoning hal etishda, Rayleigh–Ritz yaqinlashuvidan foydalanish, Hartreening 1928-yilda ushbu mavzu bo'yicha ishini e'tirof etish maqsadida Hartree usuli deb nomlanadi [23]. Ko'p o'tmay Fock [17] tomonidan ushbu yondashuvga o'zgartirish kiritildi, buning natijasida Hartree–Fock usuli paydo bo'ldi. Bu usullar to'liq-funksiya usullari deb ataladigan taqribiy usullar sinfiga kiradi.

Born–Oppenheimer faraziga quyidagiga ega bo'lamiz:

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^M \frac{Z_k e^2}{4\pi \epsilon_0 r_{ik}} - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r_{ij}} \\ &= T_e(\mathbf{r}^N) + V_{eM}(\mathbf{r}^N) + V_{ee}(\mathbf{r}^N) = \\ &= H_{elec}. \end{aligned} \quad (15.11)$$

$V_{eM}(\mathbf{r}^N, \mathbf{R}^M) = V_{eM}(\mathbf{r}^N)$ bilan keyinchalik biz bir nechta soddalashtirilgan yozuvlarni kiritamiz. $Z_k e$ zaryadlari berilgan qo'zg'almas yadrolarga to'g'ri keladigan potensial maydonni $v = v(\mathbf{r})$ belgilaymiz:

$$v(\mathbf{r}) = - \sum_{K=1}^M \frac{Z_K e^2}{4\pi \epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{R}_K|}, \quad (15.12)$$

va operatorni $h = h(\mathbf{r})$ bilan belgilaymiz:

$$h(\mathbf{r}) = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + v(\mathbf{r}). \quad (15.13)$$

bundan tashqari,

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (15.14)$$

foydalanib elektron Hamiltonian yozilishi mumkin:

$$H = \sum_{i=1}^N \left(h(\mathbf{r}_i) + \sum_{j>i}^N U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right). \quad (15.15)$$

Ko'ramizki, $h(\mathbf{r}_i)$ elektron i uchun bir elektronli o'zaro ta'sir qilmaydigan Hamiltonian va N o'zaro ta'sir qilmaydigan elektronlar uchun Hamiltonian:

$$H_{\text{non}} = \sum_{i=1}^N h(\mathbf{r}_i). \quad (15.16)$$

15.3.1. Hartree usuli

An'anaviy Hartree usulining asosiy g'oyasi o'zaro ta'sirlashmaydigan tizim orbitallarining ko'paytmasini asosiy funksiyalar sifatida ishlatishdir:

$$h(\mathbf{r}_i) \varphi_i(\mathbf{r}_i) = \varepsilon_i \varphi_i(\mathbf{r}_i), \quad (15.17)$$

va

$$\psi_H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \varphi_1(\mathbf{r}_1) \varphi_2(\mathbf{r}_2) \dots \varphi_N(\mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N \varphi_i(\mathbf{r}_i). \quad (15.18)$$

ψ_H yaqinlashuvi Hartree to'liq funksiyasi va (15.18) dagi orbitallarning ko'paytmasini Hartree ko'paytmasi deb ataladi. Keyin energiya $\sum_{i=1}^N \varepsilon_i$ bo'ladi va elektron-elektron o'zaro ta'siri e'tiborga olinmaydi. Bu Hartree usulining oddiy shakli deb ataladi. To'liq Hartree usulida elektron-elektron o'zaro ta'siri Hamiltonianga elektron-elektron potensialini qo'shish orqali kiritiladi. Bitta elektron uchun biz quyidagiga ega bo'lamiz:

$$\left(h(\mathbf{r}_i) + \sum_{j>i}^N U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right) \hat{\varphi}_i(\mathbf{r}_i) = \hat{\varepsilon}_i \hat{\varphi}_i(\mathbf{r}_i), \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (15.19)$$

Odatda, (15.19) tenglamalar takroriy jarayonda hisobga olingan -1 boshqa elektronlarning o'zaro ta'siri bilan bir vaqtning o'zida bitta elek-

tron hal qilinadi. To'liq funksiyasi $\psi_H = \prod_{i=1}^N \hat{\psi}_i(\mathbf{r}_i)$ va umumiy energiya $\langle \psi_H, \sum_{i=1}^N (h(\mathbf{r}_i) + \sum_{j>i}^N U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)) \psi_H \rangle$ ko'rinishga ega bo'ladi.

15.3.2. Hartree–Fock usuli

Ajablanarli emaski, Hartree usuli to'liq funksiyasining noto'g'ri yaqinlashishiga olib kelishi mumkin, chunki u Pauli prinsipiga rioya qilmaydi: ikki elektron bir xil pozitsiyani egallaganida, to'liq funksiyasi yo'q bo'lishi kerak va u elektron pozitsiyalarining antisimmetrik funksiyasi bo'lishi kerak. Bu kamchilik Slater determinantlari yordamida yaratilgan antisimmetrik bazaviy funksiyalardan foydalanadigan Hartree–Fock usulida ko'rib chiqiladi. Shu maqsadda, har bir elektronning r_i fazoviy koordinatalariga qo'shimcha ravishda, biz $\sigma = \alpha$ yoki $\sigma = \beta$ koordinatasini beramiz, bu yerda α va β spin koordinatalari bo'lib, 13-bobda muhokama qilingan $(\mathbf{r}, \sigma) = \mathbf{x}$ ni bildiradi. Spin orbitallari endi ortonormal bir zarracha to'liq funksiyalari va spinlarning ko'paytmasi bo'lib, ular quyidagicha belgilanadi:

$$\chi_i(\mathbf{x}) = \chi_i((\mathbf{r}, \sigma)) = \varphi_i(\mathbf{r})\sigma_i(s), \quad (15.20)$$

bu bilan s elektronning r dagi spini ekanligini aniqlandi. Biz Pauli tamoyilini qondirishni talab qilamiz. Shunday qilib, taqribiy to'liq funksiyasining antisimmetriyasini ta'minlash uchun global elektron to'liq funksiyasini Sleyter determinanti sifatida hisoblashda (15.20) dan foydalanamiz:

$$\psi_H = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \chi_1(\mathbf{x}_1) & \chi_2(\mathbf{x}_1) & \dots & \chi_N(\mathbf{x}_1) \\ \chi_1(\mathbf{x}_2) & \chi_2(\mathbf{x}_2) & \dots & \chi_N(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \chi_1(\mathbf{x}_N) & \chi_2(\mathbf{x}_N) & \dots & \chi_N(\mathbf{x}_N) \end{vmatrix}. \quad (15.21)$$

Biz ta'kidlaymizki, boshlang'ich to'liq funksiyasi uchun Sleyter determinantidan foydalanish fermionlarning antisimmetik xususiyatiga olib keladi va agar ikkita elektron aynan bir xil bo'lsa ($\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_j$) yo'qolib, farqlanmaslik mezonini qondiradi. Olingan to'liq funksiyasi ψ_{HF} haqiqiy elektron asosiy holat energiyasining ((13.39) ga ko'ra) yuqori chegarasiga olib kelishi mumkin. φ_i orbitallari qanday hisoblanganligini ko'rsatish kerak.

Hartree-Fockning energiyasi taqriban

$$E_{HF} = (\psi_{HF}, H_{HF}) = \sum_{s_1, \dots, s_N} \sum_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}^{3N}} \frac{1}{N!} \det |\chi_i^*(\mathbf{x}_j)| (h(r_i))^+ + \sum_{j>i} U(r_i, r_j) \det |\chi_i(\mathbf{x}_j)| d^{3N} r. \quad (15.22)$$

ga teng bo'ladi.

Hartree–Fock usulida fazoviy orbitalar bo'shlig'ida E_{HF} minimallashtiriladi, bunda $\int_{\mathbb{R}^{3N}} \psi_{HF}^* \psi_{HF} d^{3N} r = 1$ ishlab chiqarish cheklovlari Schrödinger tenglamasining bir elektronli versiyasiga olib keladi. Algebradan chuqur o'rganganimizdan so'ng (qarang: Marder [36], Leach [33] yoki Ratner va Schatz [39]), biz xos son – bazis funksiya aniqlash masalasiga kelimiz.

$$\varepsilon_i \varphi_i(r) = \left(h(r_i) + \sum_{j=1}^N J_i(\varphi_j) \right) \varphi_i(r) - \sum_{j=1}^N K_i(\varphi_j, \varphi_i) \varphi_j(r), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (15.23)$$

bu yerda

$$J_i(\varphi_j) = \int_{\mathbb{R}^{3N}} \frac{e^2 |\varphi_j(r')|^2}{4\pi \varepsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^{3N} r',$$

$$K_i(\varphi_j, \varphi_i) = \int_{\mathbb{R}^{3N}} \frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi_j^*(r') \varphi_i(r') d^{3N} r'.$$

(15.23) sistema Hartree–Fock tenglamalari deb ataladi. Mana $J_i(\varphi_j)$ i va j zaryadlari orasidagi itarilishni ifodalaydi va Coulomb integrali deyiladi, u almashinish integrali deb ataladigan $K_i(\varphi_j, \varphi_i)$ to'liq funksiyasining antisimmetriyasidan kelib chiqadi. Yagona elektron orbitalar uchun (15.23) ni yechishda umumiy energiya quyidagi munosabat yordamida hisoblab chiqiladi:

$$E_{HF} = \sum_{i=1}^N \left(\varepsilon_i - \sum_{j=1}^N (2J_i - K_i) \right),$$

$$J_{ij} = \langle \varphi_i, J_i(\varphi_j) \varphi_i \rangle, \quad K_{ij} = \langle \varphi_i, K_i(\varphi_j, \varphi_i) \varphi_i \rangle.$$

Shunday qilib, E_{HF} Hartree usulidagi kabi oddiygina orbital energiyalar yig'indisi emas: endi tuzatish mavjud ($J_{ij} - K_{ij}$). Biz xususiylar qiymat masalasi (15.23) chiziqli emasligini aniqlaymiz: orbital φ_i uchun yechim boshqa elektronlarning orbitalarini o'z ichiga oladi. O'z-o'zidan izchil maydon (SCF) yonda-

shuvi deb ataladigan ushbu muammoni hal qilishning klassik strategiyasi φ_i (yoki aslida χ_i) sinov yechimlari to'plamini tanlash va Kolumb va almashish shartlarini hisoblashdir. So'ngra olingan Hartree–Fock tenglamalari bo'yicha yechimlarni hisoblanadi, ikkinchi yechimlar to'plamini keltiriladi, ular tuzatilgan Coulomb va almashuv Coulomb integralini hisoblashda ishlatiladi. Ushbu ketma ket yaqinlashish jarayoni davom ettiriladi, har bir yaqinlashishda kamroq o'zgaruvchi umumiy energiya hosil qilish uchun mo'ljallangan, pirovardida hisoblangan energiya deyarli o'zgarishsiz qoladi. Keyin orbitalar o'zaro ustuvor deb ataladi.

15.3.3. Rutan tenglamalari

Har bir spin orbital χ_i uchun biz quyidagi kengaytmadan foydalanamiz:

$$\chi_i = \sum_{\alpha=1}^K c_{\alpha i} \hat{\chi}_{\alpha}, \quad (15.24)$$

bu yerda $\hat{\chi}_{\alpha}$ – cheklangan o'lchovli yaqinlashishuvchi bazis funksiyalari. Matritsani S bilan belgilaymiz:

$$S_{\alpha\beta} = \int_{\mathbb{R}^3} \hat{\chi}_{\alpha}^* \hat{\chi}_{\beta} d\mathbf{r} d\sigma, \quad 1 \leq \alpha, \beta \leq K. \quad (15.25)$$

Ortogonallik sharti, $\int_{\mathbb{R}^3} \hat{\chi}_{\alpha}^* \hat{\chi}_{\beta} d\mathbf{r} d\sigma = \delta_{ij}$, $1 \leq i, j \leq N$, munosabatga olib keladi:

$$C^* S = I, \quad (15.26)$$

Bu yerda C – (15.24) koeffitsiyentlar matritsasi va I – $N \times N$ o'ziga xoslik matritsasi: $C = [c_{ia}]$.

D matritsa quyidagicha aniqlanadi:

$$D = C C^*, \quad (15.27)$$

va zichlik matritsasi deb ataladi. Hartree-Fock energiya ifodasiga (15.24) kiritish va $D^* = D$, $\text{tr}(SD) = N$, $DSD = D$ cheklavlarga rioya qilgan holda $E_{\text{HF}}(D)$ ni minimallashtirish koeffitsiyentlarda chiziqli bo'lmagan tenglamalar tizimini beradi.

$$F(D)C = \varepsilon SC, \quad (15.28)$$

Bu yerda

$$F = \left\{ \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \hat{\chi}_{\alpha}^* \mathcal{F} \hat{\chi}_{\beta} d\mathbf{r} d\sigma \right\}. \quad (15.29)$$

$F \cdot 2J_{ij} - K_{ij}$ va $\varepsilon = \text{diag}(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_N)$ atamalariga mos keladi. (15.28) tenglamalar Roothaan (yoki Roothaan-Hall) tenglamalari deb ataladi. Ruqsat etilgan nuqtali yaqinlashish yordamida, odatda (15.28) yechishga harakat qilinadi.

Ushbu usulda: dastlabki C_0 ni tanlanadi, $F(C_0 C_0^*) C_1$ tuzatish uchun yechish (15.28) ni hisoblanadi va mos C olinmaguncha davom ettiriladi. Bu yaqinlashish jarayoni har doim ham bir-biriga yaqinlashavermaydi (Qarang: Cancs [12]), shu sababli mukammallashtirilgan yaqinlashish sxemalardan foydalanish kerak bo'lishi mumkin.

15.4. Zichlikning funksional nazariyasi

W.Kohn [32] ga ko'ra, Hartree kabi to'liq funksiyasi usullari – masalan, Fock usuli kichik molekulyar tizimlar uchun ajoyib natijalar berishi mumkin bu yerda kimyoviy aktiv elektronlarning umumiy soni 10 dan oshmaydi. Bu raqamni kattalik tartibini keng ko'lamli hisoblash tizimlaridan foydalanib bir daraja oshirish mumkin bo'lsa-da, bu unchalik muhim emas, chunki ko'p atomli kvant muammosi to'la qonli muqobil hal qilmasdan taraqqiyotga erishish mumkin emas. Bunday yondashuvlar oilasi zichlik funksional nazariyasi tushunchasiga asoslangan, bunda to'liq funksiyasi tizim uchun moddiy nuqta holatining yagona skalyar qiymatli funksiyasi bo'lgan elektron zichlikni qidirish bilan almashtiriladi.

15.4.1. Elektron zichligi

N elektronli kvant tizimini ko'rib chiqaylik, har birining holati r_i , $i = 1, 2, \dots, N$ radius vektori bilan aniqlangan. To'liq funksiyasi ψ vektorlarning antisimmetrik funksiyasi bo'ladi:

$$\psi = \psi(r_1, r_2, \dots, r_N),$$

va mos keladigan ehtimollik zichligi funksiyasi

$$\psi^* \psi = |\psi(r_1, r_2, \dots, r_N)|^2 = \rho(r_1, r_2, \dots, r_N).$$

Endi, r ixtiyoriy nuqtaning radius vektori bo'lsin. 1-elektronning r da bo'lish ehtimoli chegaraviy ehtimollik bilan aniqlangan:

$$P_1(r) = \int_{R^{3(N-1)}} \rho(r, r_2, r_3, r_4, \dots, r_N) d^{3N-3}r$$

Xuddi shunday, 2-elektronning r da bo'lishining chegaraviy ehtimolligi

$$P_2(r) = \int_{R^{3(N-2)}} \rho(r, r, r_3, r_4, \dots, r_N) d^{3N-5}r,$$

3-elektronniki esa r holatidadir.

$$P_3(\mathbf{r}) = \int_{R^{3N-3}} \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) d^{3N-3}r,$$

va hokazo. Endi $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$ bo'lgan N ta pozitsiyalarning antisimmetrik funksiyasi. Shunday qilib, $|\psi|^2$ har qanday ikkita ketma-ket vektorning koordinatalari o'zgarishi bilan o'zgarish qolishi kerak:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \dots, \mathbf{r}_N) &= \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_4, \dots, \mathbf{r}_N) = \\ &= \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \dots, \mathbf{r}_N) = \dots = \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \dots, \mathbf{r}_N). \end{aligned}$$

Demak, N elektronlardan birortasining r da bo'lish ehtimoli

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \mathbb{P}_i(\mathbf{r}), \quad (15.30)$$

yoki

$$n(\mathbf{r}) = N \int_{R^{3N-3}} |\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 d^{3N-3}r. \quad (15.31)$$

Bu yerda $d^{3N-3}r = d^2r_2 d^2r_3 \dots d^2r_N$ va $d^3r_i = dr_i dr_{i2} dr_{i3}$, $i = 2, 3, \dots, N$ ni bildiradi.

Skayar maydon $n(\mathbf{r})$ elektron zichligi deyiladi. Shubhasiz, uning r dagi qiymati N elektronlarning r da joylashganligining umumiy ehtimoli yoki, aniqrog'i, $\rho(\mathbf{r})d^3r$ cheksiz kichik hajmdagi elektronlarning ehtimollik qiymati d^3r . Bu zaryad zichligi bilan ham aniq bog'liq, chunki har bir elektron b ning manfiy zaryadiga ega. To'liqin funksiyasining o'zidan farqli o'laroq, elektron zichligini rentgen kristallografiyasi yordamida o'lchash mumkin. Shuni ta'kidlaymizki, biz n ta rifa spin effektlarini qo'shishimiz mumkin bo'lgan $\mathbf{r}_i$ o'rniga aylanish koordinatasi $\mathbf{x}_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$ qo'llash natijasida quyidagini hosil qilamiz:

$$n(\mathbf{x}) = N \sum_{S_N} \int_{R^{3N-3}} |\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)|^2 d^{3N-3}x.$$

Elektron zichligi bilan bog'liq ba'zi bevosita identifikatsiyalar quyidagi lemmada berilgan.

15.1-lemma (15.31) tomonidan berilgan n uchun bizda

$$\int_{R^3} n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N. \quad (15.32)$$

bor. Agar v potensial (15.12) bo'lsa,

$$\left\langle \psi, \sum_{i=1}^N v(\mathbf{r}_i) \psi \right\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} v(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (15.33)$$

ni olamiz. Hartree to'liqin funksiyasi (15.18) uchun o'zaro ta'sir potentsiali (15.14) va $\psi = \psi_H$ bo'lsin. So'ngra

$$\left\langle \psi, \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \psi \right\rangle = \frac{c}{2} \left(1 - \frac{1}{N} \right) \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \quad (15.34)$$

bu yerda

$$c = (e^2 / 4\pi \epsilon_0).$$

Isbot: (i) (15.31). (ii) ga kelish uchun biz buni tasvirlaymiz:

$$\begin{aligned} \left\langle \psi, \sum_{i=1}^N v(\mathbf{r}_i) \psi \right\rangle &= \int_{\mathbb{R}^{3N}} \psi^* \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) v(\mathbf{r}_1) d^{3N} \mathbf{r} + \\ &+ \int_{\mathbb{R}^{3N}} \psi^* \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) v(\mathbf{r}_2) d^{3N} \mathbf{r} + \dots + \int_{\mathbb{R}^{3N}} \psi^* \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) v(\mathbf{r}_N) d^{3N} \mathbf{r} = \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} v(\mathbf{r}_1) \left(\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \psi^* \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N \right) d\mathbf{r}_1 + \\ &+ \int_{\mathbb{R}^3} v(\mathbf{r}_2) \left(\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \psi^* \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N \right) d\mathbf{r}_2 + \dots \\ &+ \int_{\mathbb{R}^3} v(\mathbf{r}_N) \left(\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \psi^* \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_{N-1} \right) d\mathbf{r}_N. \end{aligned}$$

Undan keyin

$$\begin{aligned} \left\langle \psi, \sum_{i=1}^N v(\mathbf{r}_i) \psi \right\rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} v(\mathbf{r}_1) n(\mathbf{r}_1) \frac{1}{N} d\mathbf{r}_1 + \int_{\mathbb{R}^3} v(\mathbf{r}_2) n(\mathbf{r}_2) \frac{1}{N} d\mathbf{r}_2 + \\ &+ \dots + \int_{\mathbb{R}^3} v(\mathbf{r}_N) n(\mathbf{r}_N) \frac{1}{N} d\mathbf{r}_N = \dots + \int_{\mathbb{R}^3} v(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \end{aligned}$$

$\int_{\mathbb{R}^{3N}} |\psi|^2 d^{3N} \mathbf{r} = 1$ ekanligini ta'kidlab, quyidagiga ega bo'lamiz:

$$\begin{aligned} \left\langle \psi, \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \psi \right\rangle &= \\ &= \int_{\mathbb{R}^{3N}} \left(\sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{c}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \psi^* \psi(\mathbf{r}^N) \int_{\mathbb{R}^{3N}} \psi^* \psi(\mathbf{u}^N) d^{3N} \mathbf{u} \right) d^{3N} \mathbf{r}. \end{aligned}$$

Yig'indidagi birinchi had ($i = 1, j = 2$) keyin

$$c \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \left(\int_{\mathbb{R}^{3N-6}} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \prod_{i=1}^N |\varphi_i(\mathbf{r}_i)|^2 \prod_{j=1}^N |\varphi_j(\mathbf{u}_j)|^2 \right)$$

$$d^{3N} u dr_3 dr_4 \dots dr_N) dr_1 dr_2,$$

Shuni ta'kidlashimiz mumkin:

$$n(\mathbf{r}_1) = N \int_{\mathbf{R}^{3N-3}} \prod_{i=1}^N |\varphi_i(\mathbf{r}_i)|^2 dr_2 dr_3 \dots dr_N = N \int_{\mathbf{R}^3} \int_{\mathbf{R}^{3N-6}} \prod_{i=1 \atop (i \neq 2)}^N |\varphi_i(\mathbf{r}_i)|^2 |\varphi_2(\mathbf{u}_2)|^2 du_2 dr_3 \dots dr_N$$

va xuddi shuningdek:

$$n(\mathbf{r}_2) = N \int_{\mathbf{R}^3} \int_{\mathbf{R}^{3N-6}} \prod_{j=1 \atop (j \neq 2)}^N |\varphi_j(\mathbf{u}_j)|^2 |\varphi_2(\mathbf{r}_2)|^2 du_1 du_3 \dots du_N$$

ga kamayganini ko'ramiz:

$$c \int_{\mathbf{R}^3} \int_{\mathbf{R}^3} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \frac{n(\mathbf{r}_1) n(\mathbf{r}_2)}{N} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

Endi yig'indidagi har bir atamani xuddi shu tarzda ko'rib chiqsak, qolgan shartlarni jamlab, r va r' dan soxta integratsiya o'zgaruvchilari sifatida foydalan-sak, biz (15.34) ga erishamiz, chunki $\sum_i \sum_{j>i}^N$ da $N(N-1)/2$ variantlar mavjud. Taq-riban (15.34) elektron-elektron o'zaro ta'sir energiyasining elektron zichligining funksionali sifatida tasvirlanadi, $n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(\mathbf{r})|^2$ o'rtacha maydon taqribiy qiyma-ti deb ataladi va $N(N-1)/2 \approx N^2/2$ ga almashtirilishi va qo'sh integral koeffitsiyenti N ga bog'liq bo'lmagan $c/2$ ga kamayishi uchun tizimdagi barcha mumkin bo'lgan juftlik o'zaro ta'sirlari bo'yicha yig'indini hisobga olish ustunlik qiladi. Potensial maydon

$$v_H(n) = c \int_{\mathbf{R}^3} \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'$$

Hartree potentsiali deb ataladi va yuqorida aytib o'tilgan yig'indilar konvensi-yasiga ko'ra, umumiy elektron-elektron o'zaro ta'sir energiyasi quyidagi funksio-nal bilan yaqinlashadi:

$$\frac{1}{2} \langle v_H(n), n \rangle = \frac{c}{2} \int_{\mathbf{R}^3} \int_{\mathbf{R}^3} \frac{n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (15.35)$$

15.4.2. Hohenberg-Kohn teoremasi

Kvant mexanikasiga katta hissa $n(r)$ elektron zichligining elektronlarning to'liq elektron tuzilishini aniqlashda hal qiluvchi omil ekanligini ko'rsatishga qaratilgan edi. Shu sababli, joylashuvning bitta skalyar-funksiyasi ko'p o'lchamli to'liq funksiyasini $\psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ butun tizimning dinamik holatini to'liq aniqlovchi omil sifatida almashtirishi mumkin. Asosiy g'oya shundan iboratki, $v = v(r)$ tashqi potensial mavjud bo'lib, u yadro-elektron energiyasini aniqlaydi, bu Hohenberg-Kohn teoremasida aks ettirilgan:

15.A-teorema: Tashqi potensialdagi cheklangan elektronlar tizimining asosiy holatidagi elektron zichligi $n(r)$ potensialni faqat bir doimiygacha aniqlaydi. Bundan tashqari, elektron zichligining funksionali mavjud bo'lib, u asosiy holat zichligida minimumga ega.

Isbot: Biz birinchi navbatda asosiy holatdagi elektron zichligida minimal bo'lgan energiya funksional mavjudligini ko'rsatamiz. Shubhasiz, ma'lum bir zichlik n hosil qilishi mumkin bo'lgan ko'plab to'liq funksiyalari bo'lishi mumkin. n hosil qiluvchi shunday to'liq funksiyalarining pastki fazosini ν_n belgilaylik. $\hat{Q}$ dinamik operatori uchun n ga bog'liq tegishli qiymatni aniqlaymiz,

$$\langle Q \rangle_n = Q[n] = \inf_{\psi \in \nu_n} \langle \psi, \hat{Q} \psi \rangle. \quad (15.36)$$

15.1-lemmaning (ii) qismidan (eslab qoling (15.33)), potensial $v(r)$ ning $n(r)$ ga ta'siri quyidagicha ifodalanadi:

$$\int_{\mathbb{R}^3} v(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \left\langle \psi, \sum_{i=1}^N v(\mathbf{r}_i) \psi \right\rangle.$$

$E[n]$ funksionalni bildirsin.

$$E[n] = Q[n] + \int_{\mathbb{R}^3} v(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Keyin, agar

$$\tilde{Q} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}_i} + \sum_{j>i} \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r_{ij}} \right),$$

bo'lsa biz

$$E(n) = \langle \psi, (\tilde{Q} + v) \psi \rangle,$$

ga ega bo'lamiz va $\tilde{Q} + v = H$ sistemaning Hamiltoniani. Shunday qilib, agar E_0 asosiy holat energiyasi bo'lsa, biz 13-bobning variatsion prinsipidan bilamiz:

$$E[n] \leq E_0.$$

n_0 asosiy holatning elektron zichligi ψ_0 va mos keladigan to'liq funksiyasi bo'lsin. (15.36) dan biz quyidagini olamiz:

$$\mathcal{Q}[n_0] \leq \langle \psi_0, \tilde{\mathcal{Q}}[n_0] \psi_0 \rangle.$$

Shunday qilib,

$$\begin{aligned} & \langle \psi_0, \tilde{\mathcal{Q}}[n_0] \psi_0 \rangle + \int_{\mathbb{R}^3} v(\mathbf{r}) n_0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = E[n_0] \leq \\ & \leq \left\langle \tilde{\mathcal{Q}}[n_0] + \sum_{i=1}^N v(\mathbf{r}_i) \right\rangle = E_0, \end{aligned}$$

demak, $E[n_0] = E_0$.

Biz elektron zichligining energiya funksional $E[n]$ mavjudligini aniqladik, u asosiy holat zichligi n_0 da minimal bo'ladi, har bir n zichlik uchun yagona (doimiy chegarada) $v(\mathbf{r})$ potensial mavjud deb faraz qilamiz. Ushbu o'ziga xoslik ustunligini ko'rsatish uchun biz, aksincha, bir xil asosiy holat zichligiga mos keladigan ikkita v_1 va v_2 potentsiallari mavjudligini taxmin qilamiz. Agar v_1 va v_2 mos keladigan Hamiltonianlar bo'lsa va ψ_1 va ψ_2 mos ravishda bu Hamiltonianlar uchun degenerativ bo'lmagan asosiy holat to'liq funksiyalari bo'lsa, asosiy holat energiyalari qanoatlantiriladi.

$$\begin{aligned} E_1 &= \langle \psi_1, H_1 \psi_1 \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} n(\mathbf{r}) v_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \langle \psi_1, (T_e + V_e) \psi_1 \rangle, \\ E_2 &= \langle \psi_2, H_2 \psi_2 \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} n(\mathbf{r}) v_2(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \langle \psi_2, (T_e + V_e) \psi_2 \rangle. \end{aligned}$$

Ammo keyin

$$\begin{aligned} E_1 &< \langle \psi_2, H_1 \psi_2 \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} n(\mathbf{r}) v_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \langle \psi_2, (T_e + V_e) \psi_2 \rangle = \\ &= E_2 + \int_{\mathbb{R}^3} n(\mathbf{r}) (v_1(\mathbf{r}) - v_2(\mathbf{r})) d\mathbf{r}. \end{aligned}$$

Xuddi shuningdek,

$$E_2 < \langle \psi_1, H_2 \psi_1 \rangle = E_1 + \int_{\mathbb{R}^3} n(\mathbf{r}) (v_2(\mathbf{r}) - v_1(\mathbf{r})) d\mathbf{r}.$$

Oxirgi ikkita tengsizlikni qo'shish natijasida qarama-qarshilik hosil bo'ladi:

$$E_1 + E_2 < E_2 + E_1,$$

Shunday qilib, bir xil zichlik $n(\mathbf{r})$ ga olib kelishi mumkin bo'lgan doimiy v_1 ga teng bo'lmagan v_2 potensial mavjud bo'lishi mumkin emas.

Biz ta'kidlaymizki, Hamiltonianning har qanday elektronlar tizimi uchun asosiy holati elektron zichligi bilan (doimiy miqdorga) aniqlanishi haqiqatini Ho-

henberg–Kohnning birinchi teoremasi deyiladi. Hohenberg–Kohnning ikkinchi teoremasi shuni ta’kidlaydiki, berilgan tashqi potensial maydonda asosiy holati tegishli energiya funksionalini minimallashtirish orqali topilishi mumkin. Biz endi odatdagi variatsion usulni $E[n]$ ni maqbul sinov zichliklari, $\tilde{n}$ bo’yicha minimalashtiruvchini izlash uchun ishlatishimiz mumkin.

15.4.3. Kohn–Sham nazariyasi

Elektron tizimlari uchun Kohn–Sham nazariyasini ishlab chiqish Hartree va Hartree–Fock usullari kabi formulaga asoslangan bo’lib, u nointeraktiv elektronlar tizimlaridan boshlanadi. Ammo u nazariyani kinetik energiyaga tuzatishlar qo’shish orqali kengaytiradi, agar almashish-korrelyatsiya energiyasi ma’lum bo’lsa, individual elektron tenglamalarini shunday o’zgartiradiki, ular tizimning aniq tavsifini beradi. Shunday qilib, biz N nointeraktiv elektronlardan iborat tizimdan boshlaymiz, ularning har biri orbitada χ_i joylashgan bo’lib, u Hamiltonian bilan aniqlanadi,

$$H = \sum_{i=1}^N h(\mathbf{r}_i) \quad (15.37)$$

bu yerda h (15.13) da aniqlangan. Ushbu operator aniq o’zga bazis funksiyaga ega bo’lib, bu yagona elektron tenglamalari uchun holatlarning determinantidan tuzilgan,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + v_c(\mathbf{r}) \right) \psi_i = \varepsilon_i \psi_i, \quad (15.38)$$

bu yerda v_c nointeraktiv tizim uchun potensial bo’lib, i fazoviy va spin kvant sonlarini ifodalashi mumkin. Nointeraktiv tizimning umumiy energiyasi quyidagicha:

$$E_{ii} [n] = T_{ii} [n] + \int_{\mathbb{R}^3} n(\mathbf{r}) v_c(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (15.39)$$

bu yerda [15.30 ga qarang]:

$$T_{ii} [n] = \sum_{i=1}^N \left\langle \psi_i, -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} \psi_i \right\rangle, \quad (15.40)$$

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \mathbb{P}_i(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\mathbf{r})|^2, \quad (15.41)$$

bu yerda T_{ii} nointeraktiv tizimning umumiy kinetik energiyasini ifodalaydi. (15.41) tenglamasi bir-elektron orbitallar ψ_i ortonormal (ya’ni, $\langle \psi_i, \psi_j \rangle = \delta_{ij}$) taxmin asosida kelib chiqadi. Keyin,

$$\begin{aligned}
P_i(\mathbf{r}) &= \int_{\mathbb{R}^3} \psi_1^* \psi_1 d^3 r_1 \int_{\mathbb{R}^3} \psi_2^* \psi_2 d^3 r_2 \times \dots \\
&\times \int_{\mathbb{R}^3} \psi_i^* \psi_i(\mathbf{r}) d^3 r_i \int_{\mathbb{R}^3} \psi_{i+1}^* \psi_{i+1} d^3 r_{i+1} \times \dots \times \int_{\mathbb{R}^3} \psi_N^* \psi_N d^3 r_N \\
&= 1 \times 1 \times \dots \times |\psi_i|^2 \times 1 \times \dots \times 1 = |\psi_i|^2.
\end{aligned}$$

Biz $E_{non}[n]$ ni $\int_{\mathbb{R}^3} n d\mathbf{r} = N$ sharti bilan minimallashtirishni xohlaymiz. Lagrangianini quyidagicha kiritamiz:

$$\mathcal{L}([\bar{n}] | \bar{\mu}) = E_{non}[\bar{n}] - \bar{\mu} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \bar{n} d\mathbf{r} - N \right),$$

bu yerda $\bar{\mu}$ Lagrangian ko'paytiruvchisi hisoblanadi. $T_{non}[n]$ ning Gateaux (variation) hosilasi quyidagicha aniqlanadi:

$$\langle DT_{non}[n] | \bar{n} \rangle = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{1}{\theta} (T_{non}[n + \theta \bar{n}] - T_{non}[n])$$

Bu yerda $\langle \cdot \rangle$ elektron zichliklari fazosida qo'sh qavsni bildiradi va L^2 ichki mahsul emas. Shunday qilib, minimallashtiruvchi 11 da quyidagi tenglama mavjud:

$$\langle DT_{non}[n] + v_c(\mathbf{r}) - \mu, \bar{n} \rangle = 0 \quad \forall \bar{n}.$$

Shunday qilib, Lagrangian ko'paytirgichi quyidagicha bo'ladi:

$$\mu = v_c(\mathbf{r}) + \mathcal{D}_{ii}[n] \quad (15.42)$$

bu yerda μ nointeraktiv tizimning kimyoviy potentsiali deb ataladi. (15.38) tenglamasini ψ_i^* ga ko'paytirib, integrallashtirilganda (tegishli spinlar yig'indisi bilan) nointeraktiv energiyani quyidagicha beradi: $E[n] = \sum_{i=1}^n \mathcal{E}_i$.

To'liq o'zaro ta'sirli tizimning aniq energiyasi quyidagicha ifodalanadi:

$$E[n] = T[n] + \int_{\mathbb{R}^3} v(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + J[n], \quad (15.43)$$

bu yerda:

$$J[n] = \left\langle \psi, \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \psi \right\rangle. \quad (15.44)$$

Biz endi nointeraktiv kinetik energiyaga tuzatmani quyidagicha aniqlaymiz:

$$E_x[n] \equiv T[n] - T_{ii}[n] + J[n] - \frac{c}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \quad (15.45)$$

bu yerda o'ng qo'ldagi oxirgi a'zo elektron-elektron o'zaro ta'sir energiyasining Hartree yaqinlashishi sifatida tan olinadi, bu (15.35) da berilgan. $E_x[n]$ funksional almashish-korrelyatsiya energiyasi deb ataladi. Bu Hartree–Fock tenglamalaridagi almashish energiyasi K_f ni eslatadi, ammo ma'nosi va tuzilishida sezilarli farq qiladi.

Istalgan zichlik $\bar{n}(\mathbf{r})$ uchun o'zaro ta'sir qiluvchi elektronlar tizimining aniq energiyasi quyidagicha bo'ladi:

$$E[\bar{n}] = T_{\bar{n}}[\bar{n}] + \int_{\mathbb{R}^3} v(\mathbf{r})\bar{n}(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \frac{c}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\bar{n}(\mathbf{r})\bar{n}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' + E_x[\bar{n}]. \quad (15.46)$$

Shunga mos Hohenberg–Kohnning variatsion muammosi quyidagicha ifodalanadi:

$$\left[\begin{array}{c} \bar{n} \\ \mu \end{array} \right] \rightarrow \left\{ \begin{array}{c} \bar{n} \\ \mu \end{array} \right\}; \int_{\mathbb{R}^3} \bar{n}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N \right\}. \quad (15.47)$$

Shunday qilib, Lagrangian multiplikatori bo'ladi

$$L(\bar{n}, \mu) = E[\bar{n}] - \mu \left(\int_{\mathbb{R}^3} \bar{n} d\mathbf{r} - N \right),$$

Endi $E[\bar{n}]$ (15.46) bilan berilgan bo'lsa, biz Lagrangian ko'paytmasi uchun yangi kimyoviy potensialni olamiz,

$$\mu' = v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) + D_{\text{non}}[\bar{n}(\mathbf{r})], \quad (15.48)$$

bu yerda

$$v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = v(\mathbf{r}) + c \int_{\mathbb{R}^3} \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + v_x(\mathbf{r}), \quad (15.49)$$

va

$$\langle DE_{\text{xc}}[\bar{n}], \bar{n} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} v_{\text{xc}}(\mathbf{r}) \bar{n}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (15.50)$$

(15.48) va (15.50) da D ilgari aniqlangan variatsion yoki Gâteaux hosilasini bildiradi.

Endi biz fundamental kuzatishni amalga oshiramiz: (15.48) dagi kimyoviy potensial μ' shakli o'zaro ta'sir qilmaydigan kimyoviy potensial μ (15.42) bilan bir xil, bundan tashqari, **o'zaro ta'sir qiluvchi zarralar v_e o'rniga v_{eff}** potensial maydonida harakat qilmoqda. Shunday qilib, minimallashtiruvchi zichlik $n(\mathbf{r})$ ni yagona elektron tenglamalar tizimini yechish orqali aniqlash mumkin:

$$\left(\frac{\hbar}{m} \nabla + v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right) \tilde{\varphi}_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \tilde{\varphi}_i(\mathbf{r}), \quad 1 \leq i \leq N,$$

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\tilde{\varphi}_i(\mathbf{r})|^2, \quad (15.51)$$

$$v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = v(\mathbf{r}) + c \int_{\mathbb{R}^3} \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + v_x(\mathbf{r}).$$

Bu tenglamalar Kohn-Sham tenglamalari deb ataladi.

Tegishli asosiy holat energiyasini olish uchun biz (15.51) $\tilde{\varphi}_i^*$ ni da integrallashda $\tilde{\varphi}_i$ ortonormal ($\int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\varphi}_i^2 d\mathbf{r} = 1$) ekanligidan foydalanamiz va N ustidan yig'indi hosil qilamiz.

$$T_{\text{non}}[n] + \int_{\mathbb{R}^3} v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i. \quad (15.52)$$

Ushbu natijani (15.46) ga kiritish mumkin:

$$E[n] = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i + E_x[n(\mathbf{r})] - \int_{\mathbb{R}^3} v_x(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \frac{c}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (15.53)$$

Ko'ramizki, E_x va v_x ni tashlab, yuqoridagi energiya funksional va Kohn-Sham tenglamalari Hartree-Fock tenglamalari ko'rinishiga tushadi. Kohn [32] (15.51) ga Hartree-Fock tenglamalarining «aniqlanishi» sifatida murojaat qiladi.

Kohn-Sham nazariyasi elektron zichligi «o'zaro ta'sir qilmaydi» deb faraz qiladi. v ko'rinishli nointeraktiv: aniq to'liq funksiyasi bilan bir xil zichlikni hosil qiladigan potensial mavjud bo'lishi kerakligini anglatadi.

Kohn-Sham zichligi funksional nazariyasining kaliti $E_x[n]$ almashinuv-korrelyatsiya energiyasidir, bu umuman noma'lum. E_x ga xos elektron tuzilmalar uchun ko'plab yarimempirik ifodalar taklif qilingan. Misollardan biri mahalliy zichlikning yaqinlashuvi bo'lib, unda $E_x^{LDA} = \int_{\mathbb{R}^3} e_x n d\mathbf{r}$ va bir xil elektron gaz uchun almashinuv korrelyatsiyasi zichligi (qarang: Kohn va Sham [30]). Boshqa shakllar uchun qarang: Gill, Adamson va Pople [19].

III QISM. STATISTIK MEXANIKA

16-BOB. ASOSIY TUSHUNCHALAR: ANSAMBLAR, TAQSIMLASH FUNKSIYALARI VA O'RTACHA QIYMATLAR

16.1. Kirish

Statistik mexanika – bu moddiy jismlarni tashkil etuvchi mikroskopik tarkibiy qismlar, atomlar yoki molekulalarning dinamik harakati asosida materiyaning massaviy yoki makroskopik xususiyatlarini tavsiflashga bag'ishlangan amaliy fizikaning bo'limi. Uning eng muhim ilovalari orasida termodinamika, issiqlik va haroratning makroskopik nazariyasi mavjud, ammo u mikroskopik hodisalarga gazlar, suyuqliklar va qattiq materiallarning makro xususiyatlariga qanday olib kelishi haqida fundamental natijalar beradi. Shunday qilib, statistik mexanika dahshatli savolga javob beradi: tez harakatda trillionlab zarrachalarning xatti-harakati (masalan, Avogadroning bir moldagi atomlar soni) materiya bilan har kuni aloqada bo'lgan ommaviy hodisalarga qanday olib kelishi mumkin? Biz muvozanatdagi tizimlar uchun klassik statistik mexanikaning elementlarini tuzamiz, bu tushunchani biz darhol ishlab chiqamiz.

Bu yerda bizning asosiy e'tiborimiz oddiy harorat darajalarida (mutlaq nolga yaqin emas yoki relyativistik ta'sir muhim bo'lishi mumkin bo'lgan juda yuqori astronomik darajalarda bo'lmagan) materiyaning muvozanat xususiyatlari bilan bog'liq bo'lgan klassik statistik mexanikaga qaratilgan. Xulosa qilib aytganda, muvozanat xususiyatlari – bu atom yoki molekulyar darajadagi hodisalarga nisbatan ancha uzoqroq vaqt oralig'ida kuzatadigan jismlarning makroskopik xususiyatlari. Muayyan haroratda muvozanat xususiyatlari ma'lum vaqt oralig'ida (masalan, mikrosoniyalar yoki soniyalar yoki daqiqalar) doimiy bo'lib ko'rinsada, biz bilamizki, mikroskopik darajada materiallar shiddatli harakatlarda sodir bo'ladigan juda ko'p atom yoki molekulalardan iborat va u femtosekund yoki nanosekundlardan ortiqdir. Shunday qilib, makro-vaqt shkalasi barcha amaliy maqsadlar uchun mikro-vaqt shkalasiga nisbatan cheksizdir.

Kengroq miqyosda biz kuzatayotgan holat atom miqyosidagi hodisalarning qandaydir o'rtacha ta'siridir. Statistik mexanikaning maqsadlaridan biri o'rtacha qiymatlarni qanday hisoblash va tushunish mumkinligi haqida g'oyalarni taqdim etishdir.

O'rtacha xususiyatlarni aniqlash asosni ishlab chiqishda biz muvozanat holatiga odatda mikrovaqt shkalasi bilan solishtirganda juda uzoq bo'lishi mumkin bo'lgan o'tish davridan keyin erishilishini yodda tutamiz. Misol uchun, ikkita

jism, issiqlik muvozanati holatiga erishgunga qadar, dam olish vaqti deb ataladigan ma'lum vaqt oralig'ida kontakt almashinuvi energiyasini olib keldi va bu nuqtada ular bir xil haroratga ega. Statistik mexanika kontekstida bu harorat nimani anglatishi keyingi ishlanmalarda paydo bo'ladi.

16.2. Hamiltonian mexanikasi

Hamiltonian mexanikasi klassik muvozanat statistik mexanikasini muhokama qilish uchun eng tabiiy asosni taqdim etadi. Bu doirada biz harakatdagi N zarrachalarning fizik sistemasini qo'zg'almas mos yozuvlar tizimiga nisbatan ko'rib chiqamiz. Tizimning t vaqtidagi mikroholati tizimni tashkil etuvchi zarrachalarning oniy joylashuvi va momentlari bilan belgilanadi:

N pozitsiya koordinata vektorlari: $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N$.

N impuls koordinata vektorlari: $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N$.

Koordinata juftlari to'plami,

$$\{\mathbf{q}_i(t), \mathbf{p}_i(t)\}_{i=1}^N$$

fazo deb ataladigan $6N$ o'lchamli $\mathcal{H}$ fazoviy nuqta sifatida qaraladi.

Formulada $\mathbf{q}_i$ va $\mathbf{p}_i$ belgilari t vaqtidagi i zarrachaning pozitsiya vektorini va impuls vektorini bildiradi: bu yerda, agar harakatda geometrik cheklovlar mavjud bo'lsa, umumlashtirilgan koordinatalarga mos keladi va $i = 1, 2, \dots, M < N$. Qo'zg'almas Dekart koordinata sistemasidan foydalanamiz va koordinatalar komponentlarini quyidagicha nomlaymiz: $q_1, q_2, q_3 - \mathbf{q}_1, q_4, q_5, q_6 - \mathbf{q}_2, \dots$ ning dekart komponentlari. va q_{n-2}, q_{n-1}, q_n esa $\mathbf{q}_n, n = 3N$ ga teng, shuning uchun $\mathcal{H}$ ning t vaqtidagi nuqtasi belgilanadi.

$$\{\mathbf{q}_i(t), \mathbf{p}_i(t)\}_{i=1}^N = (q_1, q_2, \dots, q_n, p_1, p_2, \dots, p_n) \equiv (q, p)$$

Bundan keyin $\mathcal{H}$ sistemadagi zarrachalarning umumlashtirilgan koordinatalari sonini bildiradi. Mikroholatlarning bir parametrlil oilasi,

$$(q(t), p(t)), \quad t \geq 0$$

$\mathcal{H}$ dagi yo'lining trayektoriyasi va holatlarning vaqt o'zgarishi tezligi deyiladi.

Trayektoriya bo'ylab – faza tezligi:

$$\mathbf{v}(t) = (\dot{\mathbf{q}}(t), \dot{\mathbf{p}}(t))$$

$$\dot{\mathbf{q}}(t) = \frac{d\mathbf{q}(t)}{dt} = \left(\frac{dq_1(t)}{dt}, \dots, \frac{dq_n(t)}{dt} \right) \quad (16.1)$$

$$\dot{\mathbf{p}}(t) = \frac{d\mathbf{p}(t)}{dt} = \left(\frac{dp_1(t)}{dt}, \dots, \frac{dp_n(t)}{dt} \right) \quad (16.2)$$

Tizim odatda R^3 da cheklangan V hajm bilan chegaralangan deb faraz qilinadi, shuning uchun aniqlanayotgan nuqta $\mathcal{H}$ dagi cheklangan hududda qolishi kerak.

16.2.1. Hamiltonian va harakat tenglamalari

Har bir bunday dinamik sistema uchun ikki marta differensiallanadigan funksional: $H: \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}$ mavjud deb faraz qilamiz.

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{and} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (16.3)$$

H funksionali, biz II qismda aniqlagan tizimning Hamiltonianidir. Bu yerda (16.3) harakat tenglamalaridir. Nima uchun H funksiyasi II qismda keng ko'rib chiqilganligi haqida keyinroq to'xtalib o'tamiz. Nima uchun (16.3) harakat tenglamalarini aniqlashga kelsak, bu shartlar bilan to'g'ridan to'g'ri Lagrangian dinamikasi bilan bog'lanish mumkin. Dinamik tizimning Lagrangian L – kinetik energiya K va ichki energiya U o'rtasidagi farqni bildiradi:

$$L(q, \dot{q}) = K - U, \quad (16.4)$$

harakat tenglamalari esa Euler – Lagrange tenglamalarida mujassamlangan.

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (16.5)$$

Ushbu tizimda ma'lum bir simmetriyani ta'minlash uchun biz $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ ni umumiy p_i momenti sifatida aniqlaymiz va Legendre formulasini kiritamiz:

$$H(q, p) = \sum_{i=1}^n q_i \dot{p}_i - L(q, \dot{q}) \quad (16.6)$$

bu yerda H – Hamiltonian funksiyasi bo'lib, harakat tenglamalari (16.3), (16.6) va (16.5) dan olinishi mumkin.

Hamiltonianning Newton dinamikasidan $m_1, m_2, m_3 = m_{(1)}$ birinchi zarracha, $m_4, m_5, m_6 = m_{(2)}$ ikkinchi zarra uchun va hokazo massali zarralar tizimini Newton dinamikasidan standart misoli:

$$H(q_1, q_2, \dots, q_n, p_1, p_2, \dots, p_n) = \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m_{(i)}} + V(q_1, q_2, \dots, q_n) = H(q, p),$$

bu yerda $V(q_1, q_2, \dots, q_n)$ – sistemaning potensial energiyasi ((10.13) va ketma-ketlikdagi formulalarni eslang).

Tizim dinamikasining Hamiltonian aniq tavsifi: n erkinlik darajasiga ega sistema uchun tizim $(q(t), p(t))$ trayektoriyalar bo'ylab harakatlanadi, uning komponentlari (16.3) harakat tenglamalarining yechimlari bo'ladi.

16.3. Faza funksiyalari va o'rtacha vaqt

Moddiy jismni hosil etuvchi atomlardan tashkil topgan, makromexanik xossalari qiziq bo'lgan cheksiz ko'p zarralar sistemalari uchun, biz cheksiz ko'p harakat tenglamalarining to'liq yechishga imkoniyat kamligini bilamiz. Birinchidan, muammoni tavsiflovchi kerakli ma'lumotlar noma'lum yoki to'liq emas (masalan, chegaraviy va boshlang'ich shartlar) va ikkinchidan, tizimning cheksiz ko'pligi to'la yechim olish imkoniyatini qoldirmaydi. Bu yerda, statistik mexanika makroskopik muvozanat holatini aniqlash uchun to'liq yechimni faqat o'rtacha qiymatlaridan foydalanganligimiz tufayli, ushbu qiyinchiliklarni yengib o'tishga imkon paydo bo'ladi.

O'rtacha qiymatlarni hisoblashga zamin yaratish uchun biz N zarralar tizimining t vaqtidagi mikroholatiga $(q(t), p(t))$ bog'liq bo'lgan har qanday xossasini tavsiflash uchun faza funksiyasi tushunchasini kiritamiz. Shunday qilib, F faza funksiyasi $\mathcal{H}$ faza fazosidan $\mathbb{R}$ ga (yoki vektor qiymatli funksiyalar uchun $\mathbb{R}^d$ ga, $d = 2, 3, \dots$) o'tish xaritasidir. Faza funksiyalariga misol sifatida Hamiltonianning o'zi, $H(q, p)$, umumiy kinetik energiya, $\kappa(q, p) = \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m_{(i)}}$ va boshqalar kiradi.

Endi har qanday faza funksiyasi $F(q, p)$ makroskopik vaqt shkalasi bilan solishtirganda faza fazosida istalgan trayektoriya bo'ylab tez o'zgaradi. Masalan, kristalli metall namunasi soniyalar ichida makroskopik o'lchovlarga duchor bo'lishi, uning panjara tebranishlari davri esa nanosekundlar (10^{-9} sek) bo'lishi mumkin. O'rtacha vaqt makro o'lchovda o'lchanadi:

$$F_{\text{avg}}(t, t_0) = \frac{1}{t} \int_{t_0}^{t_0+t} F(q(\tau), p(\tau)) d\tau$$

Makro va mikro-vaqt shkalalari orasidagi katta farq tufayli yuqoridagi o'rtacha t dan makro-vaqt mohiyatan mustaqil bo'ladi va $t \rightarrow \infty$ sifatida $\lim F_{\text{avg}}(t, t_0)$ bilan almashtirilishi mumkin. Bu o'rtachani F bilan belgilaymiz:

$$\bar{F} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T F(q(\tau), p(\tau)) d\tau \quad (16.7)$$

(16.7)dagi integralning haqiqiy hisobi, afsuski, makroskopik tizim uchun hali ham aniqlanmagan, chunki trayektoriya $(q(t), p(t))$ juda ko'p erkinlik darajalarini o'z ichiga oladi. Bundan tashqari, dastlabki shartlar noma'lum. Ushbu qiyinchiliklar ko'pincha keyingi bo'limda muhokama qilinadigan ergodik farazni kiritish orqali ko'plab tizimlar uchun yengib o'tiladi.

16.4. Ansambllar, ansambl o'rtacha qiymatlari va ergodik tizimlar

Tizimlar ansambli konsyepsiyasi o'rtacha vaqtni hisoblashning ibtidoiy tushunchasiga kuchli alternativa beradi. G'oya shundan iboratki, ma'lum bir makroskopik sharoitda tizimning ba'zi jismoniy xususiyatlari, odatda, bu xususiyatning uzoq muddatli oraliqdagi o'rtacha qiymati vaqt ko'rsatkichi sifatida qabul qilingan, buning o'rni uchun ushbu qiymat, ko'plab qisqa muddatli kuzatishlar ketma-ketligining o'rtacha qiymati sifatida e'tiborga olinishi mumkin. Bir xil tizimning mikroholati esa berilgan makroholatga kirishi (yoki mos keladigan) mumkin bo'lgan holatlarga qarab o'zgaradi. Ansambl yondashuvida biz uzoq vaqt davomida tizimda ketma-ket eksperimentlar o'tkazishdan farqli o'laroq, replikalar to'plamida bir vaqtning o'zida ko'plab tajribalarni amalga oshirishni konsyepsiyalashtiramiz.

Replika – bu xuddi shu Hamiltonian tomonidan boshqariluvchi tizimning ko'rinishlaridan biri.

Tizimning barcha holatlari to'plami ansambl deb ataladi, bu atama J.W. Gibbs tomonidan kiritilgan. Klassik statistik mexanika holatlarini tasvirlash uchun boshqa atamalardan foydalanadi, masalan, tizimning (mumkin bo'lgan) mikroholatlari.

Boltzmann zichlik yoki taqsimot $\varrho = \varrho(q, p, t)$ funksiyasi tushunchasini kiritgan deb hisoblanadi, u $dqdp$ hajm elementida t vaqtidagi nuqtalar sonini aniqlaydi. Zichlik funksiyasi t vaqtida barcha mumkin bo'lgan holatlar bo'yicha taqsimoti ansambl a'zolarining taqsimlanishini xarakterlaydi. U holda $\int \varrho dq dp = n_j - \mathcal{H}$ ning J kichik to'plamidagi a'zolar soni. Biz ϱ ni $\int \varrho dq dp = 1$ bo'lishi uchun normallashtirishimiz mumkin. Bu xususiyatlar tufayli biz p ni ehtimollik taqsimoti funksiyasi va $\varrho(q, p, t)$ u holda (q, p) holatning t vaqtida $dqdp$ elementida yuz berish ehtimoli. ϱ makrotizimga kirish mumkin bo'lgan holatlar bo'yicha zichlikni belgilashini va ϱ ning makroholatning (q, p) F fazasi funksiyasining o'rtacha ansamblidagi $dqdp$ hajmida yotganligi ehtimolini tavsiflovchi ehtimollik taqsimotiga ekvivalent ekanligini qabul qilsak: $\mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R} - \varrho$ zichlikka mos keladigan F ning kutilgan qiymati:

$$\langle F \rangle = \int_G F(q, p) \varrho(q, p) dq dp. \quad (16.8)$$

Ansamblning o'rtachasi $F = F(q, p)$ faza funksiyasining o'rtacha fazasi deb ham ataladi.

Klassik statistik mexanikada ko'pchilik odatda Gibbsga tegishli bo'lgan farazga asoslanadi, vaqt o'rtacha $\bar{F}$ (16.7) ansambl o'rtacha $\langle F \rangle$ (16.8)ga to'g'ri keladi:

$$\bar{F} = \langle F \rangle \quad (16.9)$$

(16.9) mos keladigan tizimlar ergodik tizimlar deb ataladi va (16.9)ning bajarilishi haqidagi faraz ergodik farazdir.

Ergodik tizim $\mathcal{H}$ dagi zarrachaning trayektoriyasi energiya yuzasidagi barcha nuqtalarni cheksiz vaqt oralig'ida $(-\infty, +\infty)$ kesib o'tgan tizimga tengdir.

Afsuski, 1913-yilda Rosenthal [64] va Plancherel [63] hech qanday jismoniy tizimlar ergodik bo'lmashligini isbotladilar. Ammo bu g'oya haqiqiy kuzatishlar bilan yaxshi mos keladigan kuchli xulosalarga olib kelganligi sababli, «deyarli barcha jismoniy tizimlar mohiyatan ergodikdir» (Lebowitz [58]) g'oyasi kvaz-ergodik tizimlar tushunchasini mustahkamladi: ular uchun nuqta trayektoriyasi energiya yuzasidagi har bir nuqtaga o'zboshimchalik bilan yaqinlasha oladi (Ehrenfest va Ehrenfest [50]).

Ergodik tizimlar uchun o'rtacha fazalar trayektoriyaning boshlang'ich nuqtasidan mustaqil bo'lishi va trayektoriya haqida aniq ma'lumotga muhtoj bo'lmashligi mumkinligini ko'rsatish mumkin (masalan, Weiner [66]). Xususan, $\mathcal{H}$ fazali fazoning $\mathcal{G}$ mintaqasida χ_G esa uning xarakteristik funksiyasini bildirsin,

$$\chi_G(a, p) = \begin{cases} 1, & \text{agar } (a, p) \in G, \\ 0, & \text{agar } (a, p) \notin G \end{cases} \quad (16.10)$$

so'ngra, ergodik tizimlar uchun quyidagi kelib chiqadi

$$\hat{\chi}_G = \int_{\mathcal{H}} \chi_G \varrho dq dp = \int_G \varrho dq dp = \lim_{T \rightarrow \infty} T^{-1} \int_0^T \chi_G d\tau = t_G \quad (16.11)$$

bu yerda t_G sistemaning $\mathcal{G}$ mintaqasida o'tkazgan vaqti cheksiz miqdorini ifodalaydi. Natija trayektoriyaning boshlang'ich nuqtasiga bog'liq emas. Shunday qilib, bizda quyidagicha:

ϱ ning $\mathcal{H}$ ning $\mathcal{G}$ ost to'plamiga integrali sistemaning $\mathcal{G}$ dagi vaqti-ning ulushini bildiradi.

$\varrho \geq 0$ va $\int_{\mathcal{H}} \varrho dq dp = 1$ bo'lishi talab qilinadi. Bundan tashqari, xarakteristik funksiya $\chi_G(t)$ ning t vaqt o'zgarishi oralig'ida $\chi_G(t) \in (0; 1)$ bajariladi. N. Bu yerda faqat o'rtacha $\hat{\chi}_G = \bar{\chi}_G$ qiziqish uyg'otadi, shuning uchun 1 va 0 segmentlarining tartibi natijaga ta'sir qilmasdan almashtirilishi mumkin. Shunday qilib, bu o'rtachalarni sistema trayektoriyasini aniqlamasdan olish mumkin. Ushbu kuzatishlar ergodik sistemalar uchun ϱ ning asosiy ahamiyatini va uning aniq shaklini ochib beradi.

Klassik statistik termodinamik sistemalar uchun taqsimlash funksiyalari ϱ ni chiqarish bilan bog'liq bo'lib, odatda (ko'p hollarda uchta) makroskopik xossalalar (hajm V , zarralar soni N , energiya E va h.k.) sistemaga qo'yiladigan chek-

lovlarni ifodalaydi. Bu $\mathcal{Q}$ ning statistik termodinamikaning klassik ansambllariga tegishli ifodalarga olib keladi. Biz bu misollarni 16.6, 16.7 va 16.8-bo'limlarda muhokama qilamiz.

Umuman olganda, muayyan ansambl turi uchun taqsimot funksiyasi ϱ_{ens} ni ko'paytma shaklida yozish mumkinligini ta'kidlaymiz (qarang: Allen va Tildesley [45, 37-bet] yoki McQuarrie [59]).

$$\varrho_{ens}(q, p) = \Omega_{ens}^{-1} \omega_{ens}(q, p) \quad (16.12)$$

bu yerda $\varrho_{ens}(q, p)$ taqsimot funksiyasining normallashtirilmagan shakli $\varrho_{ens}(q, p)$ va Ω_{ens} ansambl uchun taqsimlanish funksiyasi; masalan, uzluksiz holat uchun:

$$\Omega_{ens} = \int_{\mathcal{H}} \omega_{ens}(q, p) dq dp \quad (16.13)$$

Ω_{ens} ansamblni aniqlovchi makroskopik xossalarning funksiyasi bo'lib, masalan, (N, V, E) (molekular soni, sistemaning hajmi, umumiy energiyasi) yoki (N, V, T) va hokazo. Funksiya

$$\Pi_{ens} = -k_B \Omega_{ens} \quad (16.14)$$

ansamblning termodinamik potentsiali deb ataladi va odatda ma'lum bir ansambl uchun termodinamik muvozanatda minimal qiymatni aniqlaydi.

Muvozanatdagi sistemalar uchun umumiy qo'llanmalarda uchraydigan ansambllar turli xil sistemalar ansambllari alohida qiziqish uyg'otadi. Mikrokanonik ansambl izolatsiyalangan sistemalarni o'z ichiga olgan makrotarkiblarni (N, V, E) uchlik orqali tavsiflaydi, bu yerda N, V va E makrosistemani aniqlovchi o'zgarmas parametrlar bilan ifodalanadi.

- **Mikrokanonik ansambl – Izolatsiyalangan tizim** – (N, V, E) bilan tavsiflanadi.

Ushbu ansambllarning va ularga mos keluvchi taqsimot funksiyalarining son-sanoqsiz ko'pligidan eng muhim bo'lgan ikki klassik ansambl:

- **Kanonik ansambl – Yopiq izotermal tizim** – (N, V, T) bilan tavsiflanadi;

- **Katta kanonik ansambl – Ochiq izotermal sistema** – (μ, V, T) bilan tavsiflanadi.

Bu yerda N – sistemadagi zarralar umumiy soni, V – uning hajmi, E – umumiy energiya, T – harorat va μ – kimyoviy potentsial.

Keyingi bo'limlarda biz izolyatsiyalangan tizimlarni muhokama qilamiz va yuqorida keltirilgan uchta klassik ansamblni 16.6, 16.7 va 16.8-bo'limlarda batafsil bayon qilamiz.

16.5. Izolyatsiyalangan tizimlarning statistik mexanikasi

Ushbu bo'limda «izolatsiyalangan tizimlar» bilan cheklanamiz, ular aslida klassik statistik mexanikaning asosiy e'tiborida turadi. Tizim faqat uning fazo koordinatalariga (sistemadagi umumlashtirilgan koordinatalar va impulsar) bog'liq bo'lgandagina va tizimdan tashqaridagi zarralardan mustaqil bo'lgandagina izolyatsiyalangan deb ataladi. Fazaviy fazo $\mathcal{H}$ shu sababli tizimning har qanday mumkin bo'lgan yo'llarini o'z ichiga oladi, ular kinematik cheklavlarni qanoatlantirishi kerak. Bu yo'llarning bir qismi harakat tenglamalarini qanoatlantiradi va dinamik jihatdan mumkin bo'lgan trayektoriyalar deb ataladi va bu qismda tizimning bir vaqtidagi holati orqali keyingi vaqtidagi holatini aniqlanadi. Harakat tenglamalari birinchi tartibli oddiy differensial tenglamalar bo'lgani uchun:

Izolyatsiyalangan tizimlardagi dinamik jihatdan mumkin bo'lgan trayektoriyalar bir-birini kesib o'tmaydi va faqat bir va yagona dinamik jihatdan mumkin bo'lgan trayektoriya $\mathcal{H}$ fazosidagi har bir nuqtadan o'tadi.

Izolyatsiyalangan tizimlar uchun zichlik funksiyasi ϱ bilan bog'liq muhim xususiyat quyidagi teorema bilan berilgan.

16.A-teorema (Liouville teoremasi): Izolyatsiyalangan Hamiltonian sistemasi faza fazosidagi taqsimot funksiyasi ϱ ansamblarning har qanday harakati trayektoriyasi bo'ylab o'zgarmasdir.

Isbot: Fazoda $\mathcal{H}$ ni hajmini $\dot{U}$ deb belgilaylik va $\partial \dot{U}$ ni $\dot{U}$ ni o'rab turuvchi sirt deb olaylik. $\varrho dq dp = \varrho d\omega$ ni qolish tezligi:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\omega} \varrho d\omega,$$

va tizim nusxalaridan o'tayotganimizda $\dot{U}$ dan tashqariga chiqayotgan nuqtalar umumiy tezligi:

$$\int_{\partial \omega} \varrho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d\sigma,$$

bu yerda $\mathbf{v} = (\dot{q}, \dot{p})$ tezlik vektori, $\mathbf{n}$ $\partial \omega$ sirtning tashqi normal birligi va $d\sigma$ sirt elementi. Divergensiya teoremasiga ko'ra, bizda:

$$\int_{\partial \omega} (\varrho \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} d\sigma = \int_{\omega} \text{div}(\varrho \mathbf{v}) d\omega,$$

bu yerda

$$\begin{aligned} \text{div}(\varrho \mathbf{v}) &= \sum_{i=1}^{2n} \frac{\partial}{\partial y_i} (\varrho v_i) \quad (\text{bu yerda } y_i = q_i, y_{i+n} = p_i, v_i = \dot{q}_i, v_{i+n} = \dot{p}_i, i = 1, 2, \dots, n) \\ &= \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial \varrho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \varrho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \sum_{i=1}^n \underbrace{\varrho \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} \right)}_{=0} = \{ \varrho, H \} \end{aligned}$$

bu yerda

$$\{\varrho, H\} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial \varrho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \varrho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \quad (16.15)$$

$\{ \dots \}$ belgilanishi **Poisson qavs deb ataladi**, shuning uchun izolyatsiyalangan Hamiltonian sistemasida «fazo oqimi» $p\mathbf{v}$ ning divergentsiyasi $\{\varrho, H\}$ Poisson qavsiga mos keladi.

Davom ettirib, quyidagiga ega bo'lamiz:

$$\int_{\omega} \frac{\partial \varrho}{\partial t} d\omega = - \int_{\omega} \text{div}(\varrho \mathbf{v}) d\omega$$

yoki

$$\int_{\omega} \left(\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \text{div}(\varrho \mathbf{v}) \right) d\omega = 0$$

Bu faqatgina ixtiyoriy ω uchun amal qilishi mumkin, agar

$$\frac{d\varrho}{dt} = \frac{d\varrho}{dt} + \text{div}(\varrho \mathbf{v}) \equiv \frac{d\varrho}{dt} + \{\varrho, H\} = 0 \quad (16.16)$$

Shunday qilib, ϱ har qanday trayektoriya bo'ylab o'zgarmasdir, ya'ni harakat tenglamalarini qanoatlantiruvchi (q, p) nuqtalar to'plami uchun.

Umuman olganda, bu yerda qiziqish uyg'otadigan tizimlar statsionar deb aytiladi, ya'ni ϱ aniq vaqtga t bog'liq emas. Shunday bo'lsa,

$$\left. \frac{d\varrho}{dt} \right|_{(q,p)} = 0 \quad (16.17)$$

sharti tizimning muvozanatiga tegishli sifatida qaraladi. Biz bunday tizimlar uchun taqsimot funksiyalarini qidirishimiz mumkin, shunda berilgan Hamiltonian uchun:

$$\{\varrho, H\} = 0 \quad (16.18)$$

16.1-qisqa xulosa (Liouville teoremasiga ko'ra) Liouville teoremasida tasvirlangan statsionar tizimlar hajmini saqlaydi.

Isbot: Agar ϱ doimiy bo'lsa, $\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \varrho \text{div}(\mathbf{v}) = 0$ bo'ladi, bu esa $\text{div} \mathbf{v} = 0$ ekanligini anglatadi (8.2 ga eslatma). Keyingi natija ham asosiy ahamiyatga ega.

16.B-teorema (Doimiy energiya sirtlari): Izolyatsiyalangan Hamiltonian tizim Hamiltoniani E doimiy bo'lgan trayektoriya bo'ylab harakat qiladi va E tizimning umumiy energiyasi sifatida aniqlanadi.

Isbot: H ning trayektoriya bo'ylab o'zgarishi quyidagicha:

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = 0$$

Shunday qilib, H doimiydir. Biz bu doimiy qiymatni E ga teng deb belgilaymiz. Agar H aniq vaqtga bog'liq bo'lmasa, izolyatsiyalangan tizimning n erkinlik darajasidagi trayektoriyasi

$$H(q, p) = E \quad (16.19)$$

bo'lgan $(2n-1)$ – o'lchamli gipersirt $S(E)$ bilan cheklanadi.

Liouville teoremasini yana bir bor ifodalashning boshqa bir usuli shundaki, $\mathcal{J}_0 \subset \mathcal{H}$ manifoldning fazo hajmi shunchaki $M = \int_{\mathcal{J}_0} dq dp$ bo'lib, bu $\mathcal{J}_0$ ning o'lchovidir. Harakat tenglamalari $\mathcal{J}_0$ ni $t=0$ da $\mathcal{J}_t$ ga o'tkazadi. Liouville teoremasining xulosasiga ko'ra:

t vaqtida $\mathcal{J}_t$ ning o'lchovi $\mathcal{J}_0$ ning o'lchovi bilan bir xil bo'ladi.

Shunda $\mathcal{J} \subset \mathcal{H}$ ning invariant manifoldi (yoki quyi fazosi) deb ataladi. Biz shuni ta'kidlaymizki, (16.16) sharti quyidagicha yozilishi mumkin:

$$L_Q = 0 \quad (16.20)$$

bu yerda L Liouvilning operatori:

$$L = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_q + \mathbf{F} \cdot \nabla_p \quad (16.21)$$

$\frac{\mathbf{p}}{m}$ – tezlik maydoni, ∇_q – pozitsiya koordinatalariga nisbatan gradiyent

$\left(\frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_q = \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial}{\partial q_i} \right)$, $\mathbf{F} \cdot \nabla_p$ – kuch maydoni va ∇_p – impuls gradiyenti $\mathbf{F} \cdot \nabla_p = \sum_i \dot{p}_i \frac{\partial}{\partial p_i}$. Agar biz buni muvozanatdan tashqari holatlarga umimlashtirsak va zarralar to'qnashuvlarini hisobga olsak, (16.20) quyidagi ko'rinishni oladi:

$$L_Q = \left(\frac{\partial \varrho}{\partial x} \right)_{coil} \quad (16.22)$$

bu yerda – zarralar to'qnashuvlari sababli Q o'zgarishining vaqt bo'yicha o'zgarish sur'ati. (16.22) tenglama Boltzmannning tenglamasi deb ataladi va gazlar kinetik nazariyasining asosidir. Biz bu tenglama va uning ahamiyatini keyinroq batafsil muhokama qilamiz.

16.6. Mikrokanonik ansambl

Mikrokanonik ansamblda bir trayektoriya faza fazosidagi har bir nuqtadan o'tadi. Quyidagi tasavvur qilinadi:

Barcha mikroholatlar bir xil to'g'rilikda, bir xil chastotada, berilgan makroholatga (N, V, E) mos keladigan barcha mumkin bo'lgan holatlar bo'yicha taqsimlanadi.

Boshqacha aytganda, bu bo'limda keyinroq ko'proq ma'noga ega bo'ladigan holda, ansambldan tasodifiy tanlangan mikroholat (N, V, E) holatida topilish ehtimoli tizimdagi barcha mikroholatlar uchun bir xildir. Klassik holda, bu «to'g'ri ehtimollar prinsipi» deb ataladi.

Mikrokanonik ansambl fiksirlangan hajm V , fiksirlangan zarrachalar soni N (masalan, molekularlar) va fiksirlangan energiya E ga ega bo'lganlari ajratib olingan tizimga to'g'ri keladi. Bu holda, Q doimiy energiya sirtida $S(E)$ bilan bir xil, lekin boshqa joyda $\mathcal{H}$ ga teng bo'ladi. Ammo bu tanlovda ba'zi texnik qiyinchiliklar mavjud (qarang: Veiner [66]). Buning o'rniga, biz δ_E kengligi bo'lgan $\sum(E, \delta_E)$ qobig'ini aniqlaymiz:

$$\Sigma(E, \delta_E) = \{(q, p) \in \mathcal{H}, E_0 \leq H(q, p) \leq E_0 + \delta_E\}$$

Biz quyidagicha belgilash kiritamiz:

$$\varrho_\delta(q, p) = \begin{cases} o'zgarmas, & \text{agar } (q, p) \in \Sigma(E, \delta_E), \\ 0, & \text{boshqa hollarda.} \end{cases} \quad (16.23)$$

Bu (16.17)ni qanotlantiradi va F ning har qanday faza funksiyasining o'rtacha fazasini $\hat{F} = \lim_{\delta E \rightarrow 0} \int_{\mathcal{H}} F \varrho_\delta dq dp$ kabi aniqlanish mumkin. Ushbu chegaraviy jarayon bilan aniqlangan taqsimot funksiyasi mikrokanonik taqsimot va ansambl mikrokanonik ansambl deb ataladi. Eng oddiy chegaraviy taqsimotni quyidagicha ifodalash qabul qilingan:

$$\varrho(q, p) = \Omega^{-1} \delta(H(q, p) - E), \quad (16.24)$$

bu yerda Ω mikrokanonik taqsimot funksiyasi deb ataladi va $\Omega(N, V, E)$ bilan belgilanadi.

Ushbu chegaraviy jarayondan qo'shimcha xususiyat kelib chiqadi. E energiya uchun ma'lum bir darajani tanlaymiz, shunday qilib, $E \geq 0$ va $\mathcal{H}$ faza fazosining $H(0) = 0$ kelib chiqadi. $V(E)$ ifoda to'plamining hajmini bildiradi. $V E = \{(q, p) : H(q, p) \leq E\}$. Shunda gipersferada joylashgan fazo hajmi quyidagicha aniqlanadi:

$$V(E) = \int_{\mathcal{H}} h(E - H(q, p)) dq dp \quad (16.25)$$

bu yerda h – Hevisayd funksiyasi.

$$h(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x \leq 0. \end{cases}$$

Khinchin strukturaviy funksiyasi $K(E)$ quyidagicha aniqlanadi:

$$K(E) = \frac{dV(E)}{dE} = \int_{\mathcal{H}} \delta(E - H(q, p)) dq dp \quad (16.26)$$

bu yerda δ Dirac delta taqsimoti ($\int_{\mathcal{H}} K(E)$ ning taqsimot ekanligini va integral-lanuvchi funksiya emasligini ta'kidlaydi). K ni hisoblash qiyin bo'lishi mumkinligi sababli, biz uning uchun Laplace operatsion hisob formulasidan foydalanamiz:

$$\Omega(\beta) = \int_0^\infty K(E) e^{(-\beta E)} dE = \int_0^\infty \int_{\mathcal{H}} \delta(E - H(q, p)) dq dp e^{(-\beta E)} dE = \int_{\mathcal{H}} e^{(-\beta H(q, p))} dq dp \quad (16.27)$$

bu yerda β haqiqiy son. $\Omega(\beta)$ funksiyasi 16.7-bo'limda kanonik ansambl uchun taqsimot funksiyasi sifatida yana paydo bo'ladi.

16.6.1. Kompozit tizimlar

Mikrokanonik ansamblarni o'rganishda ko'zda tutilgan fizik sharoit shundan iboratki, izolyatsiya qilingan tizim hajmi V va zarrachalar soni N fiksirlangan bir makroholatda bo'ladi va E tizimning turli xil mikroholatlari (nuxsala-ri) natijasida yuzaga keladigan umumiy makroskopik energiyadir. (N, V, E) uchligi tizimning makroholatini ifodalaydi, bunda E bir qobiq $\Sigma(E, \delta_E)$ ichida biroz o'zgarishi mumkinligi tushuniladi.

Shunday qilib, mikrokanonik ansambl uchun biz ikkita ajratib olingan tizimni ko'rib chiqamiz, A va B , makroholatlarda (N_A, V_A, E_A) va (N_B, V_B, E_B) . Biz ikkala tizimni ham o'tkazuvchan devor orqali aloqaga keltiramiz, bunda hajmlar V_A va V_B va zarrachalar soni N_A va N_B o'zgarmaydi, lekin tizim komponent-lari energiyalari E_A va E_B o'zgaradi. Birlashgan tizimning umumiy energiyasi quyidagicha:

$$E_{A+B} = E_A + E_B + E_{AB} = \text{doimiy} = C \quad (16.28)$$

bu yerda E_{AB} kompozit tizim muvozanatga erishganda o'zaro ta'sir energiyasini belgilaydi. E_A va E_B ning qiymati $\bar{E}_A$ va $\bar{E}_B$ bo'ladi.

$\bar{E}_B = C - (E_A + E_{AB})$. Birlashtirilgan tizimning Hamiltoniani $A+B$ fazo fazosining mahsulotida aniqlanadi $\mathcal{H}_A \times \mathcal{H}_B$. Birlashtirilgan tizimning Hamiltoni-ani [66]

$$H_{A+B}(y_A, y_B) = H_A(y_A) + H_B(y_B) + H_{AB}(y_A, y_B) \quad (16.29)$$

bu yerda $y_A = (q_A, p_A)$, agar A ajratib olingan bo'lsa, H_A A tizimning Hamilto-niani, $y_B = (q_B, p_B)$ va $H_B - B$ ajratib olingan holdagi Hamiltonian. H_{AB} belgi-lash orqali A va B o'rtasidagi o'zaro ta'sirlar aniqlanadi.

Ikkita tizim, A va B , agar H_{AB} faza fazosida hisoblashda cheksiz kichik bo'lsa, o'zaro zaif ta'sirda bo'ladi H_{A+B} . Weiner [66] H_{AB} ni bunday tizimlar uchun hajm integralida e'tibordan chetda qolishi mumkinligini ta'kidlaydi, ammo H_{AB} $A+B$ dagi trayektoriyalarda sezilarli ta'sir ko'rsatishi mumkin. Aniqlik, bunday tizimlar uchun faza fazosini o'rtacha olish uchun:

$$H_{A+B}(y_A, y_B) \approx H_A(y_A) + H_B(y_B) \quad (16.30)$$

Shu kabi zaif o'zaro ta'sirli tizimlar uchun Khinchin strukturaviy funksiyasi $K_{A+B}(E)$ subsistemalarning strukturaviy funksiyalarining o'ramasidir.

$$K_{A+B}(E) = \int_0^E K_B(E - E_A) K_A(E_A) dE_A \quad (16.31)$$

Buni E ga nisbatan $V_{A+B}(E)$ sohasining hajmi $\{(y_A, y_B) \in H_{A+B} : H_A(y_A) + H_B(y_B) \leq E\}$ ni ta'kidlash orqali aniqlash mumkin:

$$\int_{V_E^A} V_B(E - H(y_A)) dy_A = \int_0^E V_B(E - E_A) K_A(E_A) dE_A.$$

Ushbu oxirgi integralni E ga nisbatan farqlash va $V_B(0) = 0$ ekanligini ta'kidlash (16.31) ni beradi. To'liq ma'lumot uchun Weiner [66] ga qarang.

Ansamblidagi mikroholatlar berilgan makroholatga mos kelmasligi mumkinligi haqidagi g'oya muhimdir. Berilgan makroholatga mos keladigan mikroholatlar soni Ω uning to'plami deb ataladi. Bu klassik statistik mexanikada va tizimning muvozanat tushunchasi birgalikda muhim rol o'ynaydi. Makroholatlar sonini kvant mexanikasi kontekstida energiya darajasi E ning degeneratsiyasi sifatida tasavvur qilish mumkin.

Katta N uchun bu degeneratsiya juda yuqori bo'ladi va turli energiya darajalari bir-biriga juda yaqin bo'ladi, shuning uchun ular deyarli uzluksiz o'zgaradi.

Biz fizik tizimning mumkin bo'lgan mikroholatlarning ortib borishi orqali rivojlanib, mumkin bo'lgan mikroholatlarning eng katta soniga ega bo'lgan makroholatda to'xtaymiz. Ikkita makroholatni solishtirganda, eng katta mikroholatlar soniga mos keluvchi eng katta ehtimollik ta'minlangan makroholat eng katta ehtimoliy holatga mos keladi. Bu, o'z navbatida, eng katta ehtimoliy holat, bu yerda Ω maksimum bo'lgan holatdir, bu holatda tizim o'z vaqtining ko'p qismini tashkil qiladi va biz bu holatni tizimning muvozanat holati deb bilamiz. Mikroholatlarning teng ehtimollik tamoyili, muvozanat tizimi uchun makroholatning ehtimoli $P_j = 1/\Omega$ ekanligini qabul qilishimizga olib keladi, shuning uchun Ω mikrokanonik taqsimot funksiyasi $\Omega(N, V, E)$ dir.

Mikrokanonik ansambl uchun ikkita tizim, $A+B$ ning birikmasi to'plamlar ko'paytmasidir:

$$\Omega_{A+B}(E_A, E_B) = \Omega_A(E_A) \Omega_B(E_B) = \Omega_A(E_A) \Omega_B(E - E_A),$$

bu yerda $E = E_A + E_B = \text{doimiy}$. Shunday qilib, birlashgan to'plam A tizimi-ning energiyasi funksiyasi sifatida yozilishi mumkin. Birlashgan tizimning muvozanat holatida maksimum bo'lganligi sababli, bizda quyidagicha:

$$\frac{\partial \Omega_{A+B}}{\partial E_A} = \frac{\partial \Omega_A(E_A)}{\partial E_A} \cdot \Omega_B(E_B) + \Omega_A(E_A) \frac{\partial \Omega_B(E_B)}{\partial E_B} \cdot \frac{\partial E_B}{\partial E_A} = 0.$$

Bundan $E_A = \bar{E}_A$ va $E_B = \bar{E}_B$ bo'lsa, ikkita tizim birlashganda, muvozanatga erishadi:

$$\frac{\partial \ln \Omega_A(\bar{E}_A)}{\partial E_A} = \frac{\partial \ln \Omega_B(\bar{E}_B)}{\partial E_B} \quad (16.32)$$

qayta belgilaymiz:

$$\frac{\partial \ln \Omega(E)}{\partial E} = \beta \quad (16.33)$$

Bundan, muvozanatdagi ikkala tizim uchun β umumiy bo'ladi. Shunday qilib, β miqdori ikkala tizimning termodinamik harorati bilan bog'liq. Odatda $\beta = 1/kT$ shaklida yoziladi, bu yerda k Boltzmann doimiysi deb ataladi.

($k = 1.3806 \times 10^{-16} \text{ erg} / ^\circ K$) va T absolyut haroratdir.

(16.12), (16.13) va (16.24)ga qaytsak, mikrokanonik ansambl uchun mikrokanonik taqsimot funksiyasi quyidagicha ifodalanishi mumkin:

$$\Omega = \kappa \int_{\mathcal{H}} \delta(H(q, p) - E) dq dp \quad (16.34)$$

bu yerda $\kappa = N! h^{3N}$ (h – Planck doimiysi) molekularning ajralmasligini boshqarish uchun mo'ljallangan omil (Allen va Tildesley [45]ga qarang). (16.14)da termodinamik potensial Π_{ens} bo'lsa, bu yerda, (Boltzmann konstantasining teskari qiymati) S , entropiyaning teskari qiymati:

$$S = k \ln \Omega. \quad (16.35)$$

Ushbu natijaning variatsion talqini klassik termodinamikada muhim ahamiyatga ega. Agar biz muvozanat makroholatiga mos keladigan barcha mavjud holatlarni aniqlasak va bitta yoki bir nechta kichik tizimlarni cheklasak, $N = N^*$, $V = V^*$, $E = E^*$, u holda $\Omega(N^*, V^*, E^*) \leq \Omega(N, V, E)$, demak $S(N, V, E) \geq S(N^*, V^*, E^*)$, bu shuni anglatadiki, haqiqiy cheklanmagan holatda, entropiya maksimal qiymatga erishadi. Ushbu $S(N, V, E) \geq S(N^*, V^*, E^*)$ tengsizlik termodinamikaning ikkinchi qonunidir. Ushbu natijaning klassik talqini shundan iboratki, termodinamik muvozanatda molekula-

lyar tuzilmaning tasodifiyligi yoki tartibsizligi maksimal darajada erishadi, demak, katta entropiya katta tartibsizlikdir.

16.7. Kanonik ansambl

Kanonik ansamblda, fiksirlangan N va V ga ega bo'lgan fizik tizim harorat T bo'lgan cheksiz issiqlik rezervuariga joylashtirilgan deb tasavvur qilinadi. Tizim izotermik va yopiq bo'lsa, ya'ni atrof- muhit bilan modda almashmashtiruvchi ro'y bermaydi, ushbu shartda T mumkin bo'lgan mikroholatlar uchun muvozanatda erishilgan parametrlar to'plamida doimiy qiymatidir. Mikroholatlar faqat o'sha holatning energiya funksiyasi bo'ladi; ya'ni, ansambl a'zolari berilgan T uchun faqat energiya almashinuvini amalga oshirishi mumkin.

Qaytadan mikroholatlarning Ω umumiy soni tushunchasiga qaytaylik. Elementar ehtimollikda, voqealar ketma-ketligi umumiy soni mumkin bo'lgan natijalar sonining yig'indisidir. Agar ma'lum bir A hodisa n_A marta yuz berishi mumkin bo'lsa va hodisaning boshqa turi $B - n_B$ marta yuz berishi mumkin bo'lsa, unda mumkin bo'lgan hodisalar umumiy soni $n_A n_B$ ga teng. Keyingi navbatda, umumiy energiya E ni taqsimlaydigan N ta bir xil tizimlar ansamblini ko'rib chiqamiz va n_k energiyasi E_k bo'lgan tizimlar sonini belgilaydi. $\{n_k\}$ sonlar to'plami quyidagicha shartlarni bajaradi:

$$\begin{aligned}\sum_k n_k &= N, \\ \sum_k n_k E_k &= \mathcal{E}.\end{aligned}\tag{16.36}$$

Ushbu tizimlar ansamblini ko'rib chiqishning bir usuli bu turli xil elektron orbitallari yoki tizimdagi atomlarning elektron qobiqlari bilan bog'liq kvant energiya darajalari bilan bog'liq bo'lgan kompleks molekulyar-atomistik tizimlardir. E_k energiyalari Schrödinger tenglamasida Hamiltonianning yuqori degeneratsiyalangan o'z qiymatlari yoki kompleks molekularlarning sof energiyasi bilan bog'liq bo'lishi mumkin. Demak, energiya darajasi E_k bo'lgan ko'plab holatlar yoki n_k tizimlar bo'lishi mumkin.

N soni ansamblning a'zolari sonini, ya'ni ilgari ta'riflangan mikroholatlar sonini anglatadi. Har qanday $\{n_k\}$ energiya sonlari tizimning mumkin bo'lgan amalga oshirilishini ifodalaydi. Agar (16.36) cheklovlariga amal qilinsa, umumiy tizimning turli holatlari n_k sonlarini va ularga mos keluvchi E_k energiyalarini qayta tartibga solish orqali ko'plab turli xil taqsimotlarni olish mumkin. Ushbu ansambl to'plamining ko'pligi ushbu taqsimotlarning nechta turli usullarda o'rni va bu quyidagicha berilgan bo'lishini anglatadi:

$$\Omega = \frac{N!}{n_1! n_2! \dots}\tag{16.37}$$

Barcha mumkin bo'lgan holatlar teng ehtimollikka ega bo'lgan faraz ostida, berilgan $\{n_k\}$ taqsimotlar to'plamining paydo bo'lish chastotasi Ω ga proporsionaldir; va, ilgari keltirilgan dalillarga ko'ra, eng katta ehtimollik bu Ω maksimum bo'lgan holat bo'ladi. Muvozanat holatini topish masalasi shunday qilib, (16.36) cheklovlarga bo'ysungan holda Ω ni maksimal darajada oshiradigan taqsimotni $\{n_k\}$ topish masalasiga kamayadi. An'anaviy ravishda, bu jarayon diskret tizimlar uchun amalga oshiriladi va keyin uzluksiz taqsimot funksiyalari-ga kengaytiriladi.

Ikki soddalashtirish darhol amalga oshirilishi mumkin: (1) Manipulyatsiya qilinadigan miqdorlarning hajmini kamaytirish uchun biz Ω o'rniga $\ln \Omega$ ni ishlaymiz (mahsulotlarni yig'indilarini kamaytirish uchun) va (2) *Stirling* formulasidan foydalanamiz Katta faktoriallarning logarifmlarini taxminan hisoblash uchun: $\ln(n!) \approx n \ln n - n$. Shunday qilib, (16.36)ga bo'ysungan holda biz quyidagi funksionalning maksimumini topishni istaymiz:

$$\Upsilon(\mathbf{n}) = \Upsilon(n_1, n_2, \dots) = N \ln N - \sum_k n_k \ln n_k, \quad (16.38)$$

Biz cheklovlarni Lagrangian ko'paytuvchilari usuli yordamida kiritamiz. Lagrangian quyidagicha beriladi:

$$\mathcal{L}(\mathbf{n}, \alpha, \beta) = \Upsilon(\mathbf{n}) + \alpha(\mathcal{N} - \sum_k n_k) + \beta(\mathcal{E} - \sum_k n_k E_k), \quad (16.39)$$

bu yerda α va β Lagrangian ko'paytuvchilari bo'lib, kritik nuqtalar quyidagi tenglamalarni qanoatlantiradi:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}(n^*, \alpha^*, \beta^*)}{\partial n_k} &= \frac{\partial \Upsilon(\mathbf{n}^*)}{\partial n_k} - \alpha^* - \beta^* E_k = 0, \quad \forall k, \\ \mathcal{N} - \sum_k n_k &= 0, \\ \mathcal{E} - \sum_k n_k E_k &= 0. \end{aligned}$$

va

$$\frac{\partial \Upsilon(\mathbf{n}^*)}{\partial n_k} = -\ln n_k^* - 1,$$

bo'lganligidan, quyidagi ifoda hosil bo'ladi:

$$\ln n_k^* = -(1 + \alpha^*) - \beta^* E_k.$$

Shunday qilib,

$$n_k^* = \exp(-(1 + \alpha^*) - \beta^* E_k) = C \exp(-\beta^* E_k),$$

bu yerda C – o'zgarmas. Cheklov shartlari $\sum_k n_k^* = N$ bo'lishini talab qiladi, shuning uchun

$$C = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_k \exp(-\beta^* E_k), \quad (16.40)$$

va

$$\frac{n_k^*}{\mathcal{N}} = \text{davlat ehtimoli } n_k^* = \frac{\exp(-\beta E_k)}{\sum_k \exp(-\beta E_k)},$$

bu yerda β ni β^* o'rniga yozdik, bu cheklov bilan bog'liq ko'paytuvchi ($\mathcal{E} = \text{doimiy} = \sum_k n_k E_k$) ning yagona qiymati ekanligini qabul qilishimiz kerak. U holda bizda

$$\mathcal{E} = \sum_k E_k n_k^* = \frac{\mathcal{N} (\sum_k E_k \exp(-\beta E_k))}{\sum_k \exp(-\beta E_k)}$$

aniqlangan

$$U = \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{N}} = \langle E_k \rangle = \sum_k E_k P_k, \quad (16.41)$$

bu yerda P_k diskret taqsimot funksiyasi,

$$P_k = \frac{\exp(-\beta E_k)}{\sum_k \exp(-\beta E_k)} \quad (16.42)$$

va $\langle E_k \rangle$ energiya holatlarining ansambl o'rtacha qiymatidir. Uning miqdori ansamblidagi har bir tizimning o'rtacha energiyasidir. Taqsimot P_k ansambl uchun diskret Boltzmann taqsimotidir.

Endi biz energiya darajalari E_k ansamblarning faza funksiyalari bo'lgan uzluksiz taqsimlangan tizimlarni ko'rib chiqamiz, bu yerda umumiy energiya E doimiydir. Bu holda, biz E_k ni faza funksiyasi $u = u(q, p)$, bu aslida mikroholat (q, p) uchun Hamiltonianga mos keladi. Boltzmann taqsimot funksiyasi quyidagicha:

$$\varrho = C \exp(-\beta H(q, p)) \quad (16.43)$$

bu yerda C , $\int_{\mathcal{H}} \varrho \, dq \, dp = 1$, shart asosida tanlab olinadi. Shunday qilib, (16.42) o'rniga quyidagini olamiz:

$$\varrho(q, p) = \frac{\exp(-\beta H(q, p))}{\int_{\mathcal{H}} \exp(-\beta H(q, p)) \, dq \, dp} \quad (16.44)$$

Biz eslaymizki, β raqami (16.33 ga qarang) harorat T bilan bog'liq: $\beta = 1/kT$. Qiziqarli tomoni shundaki, (16.42)ning natijasi sifatida (16.44)ni asoslash uchun dalil keltirish mumkin, bu ansambl o'rtacha qiymati $\bar{Q}$ (ya'ni,

“ $\langle Q \rangle$ ”ni kuzatiladigan faza funksiyasi bilan bog‘laydi, bu kuzatiladigan kvant tizimining mos keluvchi kutilgan (yoki kutilayotgan) qiymati bilan bog‘laydi. Ushbu bog‘lanishni amalga oshirishdagi quyidagi qadamlar Frenkel va Smit [52] ning tavsifiga amal qiladi:

– Q kuzatiladigan kattalik bo‘lsin, kvant tizimida kvant Hamiltonian H bilan va $\langle Q \rangle$ uning kutilayotgan qiymatini bildiradi:

$$\langle Q \rangle = \langle \psi, Q\psi \rangle \quad (16.45)$$

bu yerda $\langle \cdot, \cdot \rangle$ ifodasi $\mathbb{R}^3$ da L^2 ichki ko‘paytmasini bildiradi, hamda ψ to‘liq funksiyasidir.

– Q ansamblning o‘rtacha qiymati quyidagicha bo‘ladi:

$$\bar{Q} = \frac{\sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right) \langle \psi_n, Q\psi_n \rangle}{\sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}$$

bu yerda yig‘indi ushbu statistik o‘rtachaga hissa qo‘shadigan barcha kvant holatlari bo‘yicha olinadi. Chunki

$$E_n = \langle \psi_n, H\psi_n \rangle$$

bu yerda ψ_n endi E_n ga mos keluvchi holatlar va biz yozishimiz mumkin:

$$\bar{Q} = \frac{\sum_n \langle \psi_n, \exp(-H/kT) Q \psi_n \rangle}{\sum_n \langle \psi_n, \exp(-H/kT) Q \psi_n \rangle} = \frac{\text{Tr} \exp(-H/kT) Q}{\text{Tr} \exp(-H/kT)}$$

bu yerda Tr operatorning izini bildiradi. Eslatib o‘tamiz, ψ_n joylashgan fazoni xarakterlash uchun ishlatiladigan bazisdan mustaqil aniqlanadi.

$H = \kappa + U$ bo‘lgani uchun biz o‘z holatlarini kinetik energiya K (impuls operatorining xos holatlari) va ichki energiya U ga mos ravishda konseptual ravishda bo‘lamiz. Impulsning xos holatlari K operatorining xos funksiyalaridir. Keyinchalik, biz quyidagini ta’kidlaymiz:

$$\begin{aligned} \exp(-\beta\kappa) \exp(-\beta U) &= \exp(-\beta(\kappa + U)) + \mathcal{O}([\kappa, U]) = \\ &= \exp(-\beta H) + \mathcal{O}([\kappa, U]), \end{aligned}$$

bu yerda $[\kappa, U]$ operator K va U uchun kommutativ bo‘lib, u $\hbar$, Planck konstantasiga proporsionaldir. Shunday qilib, $\hbar \rightarrow 0$ bo‘lganda, biz quyidagiga ega bo‘lamiz:

$$\text{Tr} \exp(-\beta H) \cong \text{Tr} \exp(-\beta\kappa) \text{Tr} \exp(-\beta U).$$

– $x_n \bar{U}$ energiya operatorining xos vektorlarining asosiy bo'lsin va r_m K uchun asosiy bo'lsin. Shunda

$$\begin{aligned} \text{Trex}p(-\beta H) &= \sum_n \sum_m \underbrace{\langle x_n, \exp(-\beta U) x_n \rangle}_{\exp(-\beta U(q))} \underbrace{\langle x_n, r_m \rangle}_{V^{-N}} \times \underbrace{\langle r_m, \exp(-\beta K) r_m \rangle}_{\exp\left(-\beta \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}\right)} = \\ &= \frac{1}{h^{dN} N!} \int_{\mathcal{H}} \exp\left(-\beta \left(\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + U(q)\right)\right) dq dp \end{aligned}$$

bu yerda V – tizim hajmi, N – zarrachalar soni, yig'indilar integrallar bilan almashtirilgan va d – domenning o'lchami ($d = 1, 2$ yoki 3)

– Shunga o'xshash, biz $\text{Trex}p(-\beta H) \bar{Q}$ ning chegarasini hosil qilamiz. Muxtasar qilib aytganda, biz quyidagilarga ega bo'lamiz:

$$\bar{Q} = \langle \bar{Q} \rangle = \frac{\int_{\mathcal{H}} \exp(-\beta H(q, p)) \bar{Q}(q, p) dq dp}{\int_{\mathcal{H}} \exp(-\beta H(q, p)) dq dp}$$

Shundan keyin biz o'rtacha qiymatni $\bar{Q}$ bilan $\langle \bar{Q} \rangle$ deb belgilaymiz, chunki bu va kvantning kutilayotgan qiymati (16.45) bilan hech qanday chalkashlik bo'lmasligi kerak.

(16.41)ga qaytsak, tizimning «ichki» energiyasi U , talqin bilan (agar biz tizimning makroskopik kinetik energiyasini muvozanatda Nollga teng deb olsak), Hamiltonian ansamblning o'rtacha qiymati: $u(q, p) = H(q, p)$

$$U = \langle H \rangle = H(q, p) \varrho(q, p) dq dp \quad (16.46)$$

16.8. Katta kanonik ansambl

Katta kanonik ansambl kanonik ansamblning yanada umumiy lashtirilgan shakli bo'lib, tizim T haroratda issiqlik rezurvarida bo'ladi, lekin energiya va zarrachalar almashinuviga imkoniyat mavjud bo'ladi. Shunday qilib, zarrachalar soni N o'zgarishi mumkin, lekin odatda ular o'rtacha qiymat atrofida tebranadi. Zarrachalar almashinuvi kimyoviy potensial deb ataladigan potensial μ bilan tavsiflanadi. Keyin yoki μ yoki T yoki ikkalasi ham o'zgarishi mumkin.

Katta kanonik ansambl kanonik ansamblar to'plamidan iborat bo'lib, ularning har biri termodinamik muvozanatda, lekin N ning barcha mumkin bo'lgan qiymatlarini oladi va har biri bir xil β ga ega. Taqsimot funksiyasi quyidagicha:

$$\varrho(q, p) = \Omega(\mu, V, T) \exp(-\beta(H(q, p) - \mu N)) \quad (16.47)$$

bu yerda μ kimyoviy potensial va

$$\Omega(\mu, V, T) = \sum_N \int_{\mathcal{H}} \exp(-\beta(H(q, p) - \mu N)) dq dp \quad (16.48)$$

Katta kanonik ansambl uchun termodinamik potensial $\beta = 1/kT$ va pV ning negativ ko'paytmasi bo'lib, bu yerda p termodinamik bosim va V hajm bo'ladi.

$$pV = kT \ln \Omega(\mu, V, T) \quad (16.49)$$

Bu yerda A tizim N_A zarrachalar va E_A energiyadan iborat bo'lib, katta rezervuar B ga joylashtiriladi va B bilan zarrachalar va energiyani almashadi. Ma'lum vaqt o'tgach, birlashtirilgan tizimning A va B komponentlari umumiy harorat T va umumiy kimyoviy potensial μ ga ega bo'ladi. Har qanday vaqtda muvozanat holatiga o'tish jarayonida har doim quyidagilar mavjud:

$$N_B + N_A = N = \text{doimiy} \text{ va } E_A + E_B = E_{A+B} = \text{doimiy},$$

va rezervuar A dan ancha katta deb taxmin qilinganligi sababli, faqat N_A va E_A qiziqish uyg'otadi. (16.36) bilan o'xshashlikda, muvozanat holatida ehtimollik to'plami $\Omega_B(N_B, E_B) = \Omega_B(N - N_A, E_{A+B} - E_A)$. (16.47)ni hosil qilish (16.42) va (16.44)ga olib keladigan argumentlarga o'xshash dalillardan kelib chiqadi. Biz amallarni batafsil bajarishni mashq sifatida qoldiramiz (qarang: 7 va 8-mashqlar, III-bobda). (16.47)ning muqobil hosil qilishlarini statistik mexanika bo'yicha aksariyat matnlarda topish mumkin (masalan, [46, 49, 55, 56, 59, 62, 65, 66]).

Ta'kidlangan ansambllar muvozanat statistik mexanikasi klassik ansambllariga misol bo'lib, nazariyaning boshqa ilovalarida tegishli bo'lishi mumkin bo'lgan boshqa ansambllarni ham qurish mumkin edi. Ushbu mavzular statistik mexanika matnlarida muhokama qilingan, masalan, [48, 59].

16.9. Qo'shimcha: molekulyar dinamika haqida qisqacha ma'lumot

Molekulyar dinamika atomlar yoki molekulalarning tizimlari uchun matematik modellar sinfiga tegishli bo'lib, bunda

1. Har bir atom (yoki molekula) moddiy nuqta sifatida R^3 da tasvirlangan va va unga nuqtaviy massa tayinlangan;
2. Moddiy nuqtalari tizimining harakati Newton mexanikasi tomonidan belgilanadi;
3. Umuman olganda, tizimga kirib chiqadigan massa uzatilmaydi deb hisoblanadi.

Ushbu asosiy farazlarga qo'shimcha ravishda, deyarli barcha molekulyar dinamika (MD) hisob-kitoblarida quyidagilar ham taxmin qilinadi:

a. Elektronlar asosiy holatda (elektron harakatlari hisobga olinmaydi) va konservativ kuch maydoni mavjud bo'lib, u faqat atomlar yoki molekularlarning pozitsiyalarining funksiyasi hisoblanadi (shu bilan, Born–Oppenheimer taxminiga muvofiq, atom yadrolarining pozitsiyalari o'zgarganda, elektronlar asosiy holatda qoladi);

b. Konservativ kuch maydonlari atomlararo yoki molekulararo potentsiallar V tomonidan aniqlanadi va uzoq muddatli ta'sirlar (umuman olganda) e'tibordan chetda qoladi yoki ta'sir kuchlarini lokalizatsiya qilish uchun «chegaralangan» radiuslar ishlatiladi;

c. Chegaraviy shartlar (odatda) davriy deb taxmin qilinadi.

Molekulyar dinamika odatda fizik tizimlarning gazlar, suyuqliklar yoki qattiq jismlar kabi termokimyoviy va termomexanik xossalarning vaqt bo'yicha o'rtacha qiymatlarini hisoblash uchun ishlatiladi.

16.9.1. Newtonning harakat tenglamalari

Shunday qilib, molekulyar dinamikada biz $\mathbb{R}^3$ dagi N diskret nuqtalarning to'plamini ko'rib chiqamiz, bu atom yoki molekular joylarini cheklangan sohada ifodalovchi nuqtalar $\Omega \in \mathbb{R}^3$, har biriga massa m_i va har biri ma'lum bir nuqtadan nisbatan radius vektori r_i bilan joylashgan, $i = 1, 2, \dots, N$. Har bir bunday zarrachaning harakati Newtonning ikkinchi qonuni bilan boshqariladi:

$$m_i \left(\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} \right) = \mathbf{F}_i, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (16.50)$$

bu yerda $\mathbf{F}_i$ – bu zarraga ta'sir etayotgan kuchlarning umumiy yig'indisi, i zarra-si tizimdagi boshqa zarrachalar bilan o'zaro ta'sirini ifodalaydi. Ushbu atomlararo kuchlar hamisha konservativ bo'lishi kerak deb hisoblanadi:

Quyidagi potentsialni $V = V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ kiritamiz:

$$\mathbf{F}_i = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad 16.51$$

Shunday qilib, oxirida

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} + \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (16.52)$$

(16.52)-ga $\mathbf{r}_i(0)$ va $d\mathbf{r}_i(0)/dt$ dagi boshlang'ich shartlar va $\partial\Omega$ bo'yicha chegara shartlarini qo'shishimiz kerak, bular, odatda, tizim harakatining umumiy davriy namunasini ifodalash uchun tanlanadi $\mathbb{R}^3$. (16.52) yechimlari $\{\mathbf{r}_i(t)\}_{i=1}^N$ uchun $t \in [0, T]$ orada tizimning dinamikasi aniqlanadi. Bir marta ma'lum bo'lganidan so'ng, tizimning boshqa fizik xususiyatlari, masalan, $\mathbf{r}_i$ va

dr_i/dt funksiyalari bilan tasvirlangan ansambl o'rtacha qiymatlari hisoblani-shi mumkin. Dinamik tizimning xulq-atvori tavsifi inersial koordinata tizimining o'zgarishlariga va belgilangan vaqt doirasida o'zgarmas bo'lishi kerak.

Kvant tizimlarida bo'lganidek, molekulyar dinamika tenglamalarini pozitsiya-impuls juftliklari $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ fazoda va tizim Hamiltonianiga nisbatan ifodalash mumkin,

$$H(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N; \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_i + V(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N) \quad (16.53)$$

bu yerda $\mathbf{q}_i \equiv \mathbf{r}_i$. Shunday qilib, (16.52) o'rniga, bizda $2N$ birinchi darajali ti-zimlar mavjud, bu (16.53)da tasvirlangan.

16.9.2. Potensial funksiyalar

Molekulyar dinamikaning eng qiyin jihatlaridan biri atom-molekulyar tizim uchun mos potensial funksiya V ni aniqlashdir. Ko'pincha bunday potentsiallar umumiy shaklda bo'lib, quyida keltirilgan (belgilashlarga qaytsak $\mathbf{q} = \mathbf{r}$):

$$V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i=1}^N V_1(\mathbf{r}_i) + \sum_{i,j=1; j>i}^N V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_{i,j,k=1; k>j>i}^N V_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots, \quad (16.54)$$

bu yerda V_s s - tartibli potensial deb ataladi. Birinchi tartibli potensial:

$$V_1(\mathbf{r}_1) + V_1(\mathbf{r}_2) + \dots + V_1(\mathbf{r}_N)$$

tashqi kuch maydoni tufayli paydo bo'lgan potensial energiya ikkinchi tartibli potensialdir:

$$V_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + V_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) + \dots + V_2(\mathbf{r}_{N-1}, \mathbf{r}_N)$$

zarralarining juft-juft ta'sirini ifodalaydi; uchunchi tartibli potensial uch zarralar o'zaro ta'sirini ifodalaydi va hokazo. Lennard-Jones potentsiali:

$$V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = 4\varepsilon \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6, \quad r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \quad (16.55)$$

bu yerda σ atom yoki $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j$ da joylashgan molekulaning atom strukturasiga bog'liq bo'lgan doimiy va ikkinchi tartibli potensial kabi ε potentsialning mini-mumdagi energiyasi ekanligi yaxshi ma'lum.

Molekulyar dinamika modellarini qo'llaydigan kompyuter simulyatsiyalarida potentsiallarning taqribiy shakllari juda katta hisoblash muammolarini soddalash-

tirish uchun qo'llaniladi. Masalan, N zarralarining faqat juft-juft o'zaro ta'sirlari uchun, $\partial V / \partial r_i$ kuch $(N^2 - N) / 2$ bandlarni o'z ichiga oladi. Odatdagi soddalashtirish har bir zarra atrofida R kesish radiusini joriy qilish va faqat shu radius ichidagi qo'shni zarralar bilan o'zaro ta'sirlar kiritilishi kerak. Qirqilgan juft-juft potentsial shunda:

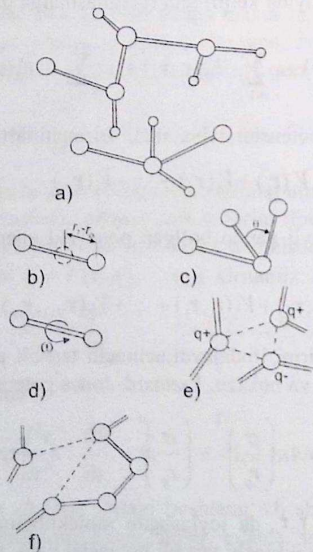
$$V_{cut-off}(r) = \begin{cases} f(r)V(r), & r \leq R, \\ 0, & r > R, \end{cases}$$

bu yerda $r = r_{ij}$ va $f(r) = 0$ da 1 dan $r = R$ ga o'tishi bilan 0 ga o'zgaradigan yumshoq kesish funksiyasidir.

Uzun molekulyar zanjirlardan iborat molekularlar tarmog'i uchun potentsial energiya funksionalining umumiy shakli deb tasvirlangan.

$$V(r^N) = \sum_{i=1}^{N_w} \frac{k_i}{2} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{0i})^2 + \sum_{i=1}^{N_a} \frac{\kappa_i}{2} (\theta_i - \theta_{0i})^2 + \sum_{i=1}^{N_t} \frac{\kappa_i^t}{2} (1 + \cos(i\omega - \gamma))^2 +$$

$$+ \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \left(4\epsilon_{ij} \left(\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right) + \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right)$$



16.1-rasm: a) Molekula zanjirlari va yon molekularlar tarmog'i, turli xil bog'lanishlar bilan bog'langan; b) Kovalent bog'lanishning cho'zilishi; c) Aylanma harakat; d) Buriqish; e) Bog'lanmagan Coulomb o'zaro ta'sirlari; f) Zaif van der Vaals bog'lanishlari

Bu yerda birinchi atama N_{co} kovalent bog'lanishlarning cho'zilishi bilan bog'liq bo'lib, bog'ning qattiqligi k_i , ikkinchi atama esa bir bog' uzunligi tutashgan joyda bir bog'ning ikkinchisiga nisbatan aylanishi natijasida aylanish qarshiligiga mos keladi, uchinchi atama bog' o'qida torsion aylanishi tufayli yuzaga keladi va yakuniy atama ikkita qismdan iborat: *van der Waals* bog'lanishlarining bog'lanmagan o'zaro ta'siri, 12-6 *Lennard-Jones* potentsiali bilan ifodalangan va bog'lanmagan *Coulomb* o'zaro ta'sirlari yaqin atrofdagi turli molekulalardagi atomlar yoki molekulalar juftliklaridan yoki bir xil molekuladagi uchta bog' uzunligidan kamida ajratilgan atomlar yoki molekulalardan kelib chiqishi mumkin. Parametrlar $k_i, \kappa_i, \kappa_i^t, \epsilon_{ij}, \gamma$ va σ_{ij} alohida ko'rsatmalardan ta'minlanishi yoki hisoblab chiqilishi kerak $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ va hokazo.

16.9.3. Dinamik tizimning sonli yechimi

Molekulalararo potentsiallar qo'limizda bo'lganda, biz tizim harakati tenglamalarini integratsiyalash uchun sonli sxemalarga murojaat qilamiz. Shu maqsadga eng mashhur sonli sxemalardan biri Verlet algoritmi hisoblanadi. Turli maydonlar vaqtga nisbatan analitik ekanligini hisobga olib, quyidagicha yozamiz:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \Delta t \mathbf{v}(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{a}(t) + \frac{\Delta t^3}{6} \mathbf{b}(t) + \frac{\Delta t^4}{24} \mathbf{c}(t) + \dots,$$

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \Delta t \mathbf{a}(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{b}(t) + \frac{\Delta t^3}{6} \mathbf{c}(t) + \dots,$$

$$\mathbf{a}(t + \Delta t) = \mathbf{a}(t) + \Delta t \mathbf{b}(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{c}(t) + \dots,$$

$$\mathbf{b}(t + \Delta t) = \mathbf{b}(t) + \Delta t \mathbf{c}(t) + \dots$$

Qatorlarni chegaralash:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \Delta t \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \mathbf{a}(t),$$

$$\mathbf{r}(t - \Delta t) = \mathbf{r}(t) - \Delta t \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \mathbf{a}(t).$$

Ushbu ifodalarni qo'shganimizda, tezlikni yo'q qilamiz va quyidagini olamiz:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = 2\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t - \Delta t) + \Delta t^2 \mathbf{a}(t) \quad (16.56)$$

Tezliklar markaziy ayirma taqribiy formulasidan foydalangan holda hisoblanishi mumkin:

$$v(t) = \frac{1}{2\Delta t}(\mathbf{r}(t + \Delta t) - \mathbf{r}(t - \Delta t)) \quad (16.57)$$

Tezlanishlar quyidagicha beriladi:

$$\mathbf{a}(t) = \frac{\mathbf{F}(t)}{m} \quad (16.58)$$

Ushbu algoritm «boshlang'ich shartlarni»ni talab qiladi: berilgan $\mathbf{r}(0)$ va $\mathbf{a}(0)$ bo'lsa, biz $\mathbf{r}(-\Delta t) = \mathbf{r}(0) + \frac{1}{2}\Delta t^2\mathbf{a}(0) - \Delta t\mathbf{v}(0)$ ni hisoblashimiz va $\mathbf{v}(0) \approx -\Delta t\mathbf{a}(\Delta t)$ formulani ishlatishimiz mumkin.

Berilgan trayektoriyalar $(\mathbf{r}_1(t), \dots, \mathbf{r}_N(t); \mathbf{p}_1(t), \dots, \mathbf{p}_N(t))$ uchun $t = 0, \Delta t, \dots, n\Delta t$ ma'lum bo'lsa, biz tizimning makroskopik xususiyatlarini vaqt bo'yicha berilgan chekli vaqt oralig'ida $[0, \tau]$ o'rtacha hisoblash orqali hisoblaymiz. Shunday qilib, agar $F = F(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)) \equiv F(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ molekula-atom koordinata juftliklarining biror funksiyasi bo'lsa, biz quyidagini hisoblaymiz:

$$\bar{F} \approx \frac{1}{\tau} \int_0^\tau F(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)) dt \approx \frac{1}{\tau} \sum_{i=1}^n F(\mathbf{q}(i\Delta t), \mathbf{p}(i\Delta t)) \Delta t.$$

17-BOB. STATISTIK MEXANIKANING ASOSLARI: KLASSIK TERMODINAMIKA

17.1. Kirish

Klassik termodinamika issiqlik va haroratni o'rganadi va energiya almashinuvi makroskopik miqyosda, ya'ni tenglik holatida yoki kvazistatik jarayonlarga duch kelgan tizimlarda sodir bo'lishini o'rganadi. Oldingi bobda ta'kidlanganidek, fizik tizimlarning makroskopik xatti-harakati tabiiy holda yoki mikroskopik hodisalarni o'lchashga mo'ljallangan asboblardan orqali bizning odatiy sezgilarimiz bilan talqin qilishimiz mumkin bo'lgan hodisalarda kuzatiladi. Ushbu bobda biz katta zarrachalar, atomlar va molekularlar tizimlarining statistik mexanikasi va 1-qismda ishlab chiqilgan mexanika va termodinamikaning faza-bo'yicha o'rtalashtirilgan tenglamalari orasidagi bog'liqlikni o'rnatamiz.

Biz oldingi bobda shuni ta'kidladikki, qiziqish bilan kuzatilayotgan fizik tizimlarda sodir bo'ladigan hodisalar kamida ikki xil vaqt o'lchovida sodir bo'ladi: molekulyar (mikroskopik) darajadagi hodisalar juda tez, ba'zida femtosekundlar (10^{-15} soniya) yoki nanosekundlar (10^{-9} soniya) chastotada sodir bo'ladi, makroskopik miqyosda kuzatadigan hodisalar esa juda sekin vaqt oralig'ida – mikrosekundlar, soniyalar, daqiqalar yoki hatto soatlar yoki undan ham uzoq davom etadi. Biz bu hodisalarni makro-vaqtda kvazi-statik jarayonlar sifatida tasvirlaymiz. Bu jarayonlar bir jismni yoki aniqrog'i, bir jismning nuqtalarini doimiy ravishda termodinamik muvozanat holatlari ketma-ketligi orqali olib boradi, ularning har biri ilgari muhokama qilingan muvozanat statistik mexanikasi bilan boshqariladi. Shunday qilib, makro-vaqt o'zgaruvchisi bir muvozanat holatidan boshqasiga o'tishda belgilash vaqti sifatida xizmat qiladi, bu har qanday sekin makro-vaqt miqyosida sodir bo'ladi. Bu jarayonlardagi inersiya ta'siri (tizim massasiga bog'liq bo'lganlar) ba'zan ahamiyatsiz bo'ladi va shuning uchun makroskopik kinetik energiya ko'pincha nolga teng deb qabul qilinadi yoki ideal gazning kvazi-statik tebranishlari kabi mustaqil ko'rib chiqishlardan hisoblab chiqiladi.

Ushbu bobning maqsadlaridan biri, bu vaqtga qadar qamrab olingan statistik mexikaning o'rtalashtirilgan ansambllari va 1-qismda muhokama qilingan tutash muhit mexanikasini bog'lash bo'yicha kirish darajasida tavsiflanishini yakunlashdir. Biz makro cheklavlarning kvazi-statik jarayonlarga ta'sirini, Weirning izidan borib [66] va mos Gibbs munosabatlarini taqdim etamiz. Monte Carlo va Metropolis usullarining qisqa sharhlari beriladi. Ular bu nazariyalardan

ni maxsus qo'llanmalarda amalga oshirish vositasi sifatida taqdim etganlar. Biz tadqiqotni statistik mexanikadan bir masalaning qisqa sharhi, ya'ni gazlar kinetik nazariyasini boshqaradigan Boltzmann tenglamalarining o'rganilishi bilan yakunlaymiz. Bu statistik mexanika modellari va 1-qismda muhokama qilingan davomli gaz va suyuqlik dinamikasi o'rtasida klassik bog'lanishni ta'minlaydi.

17.2. Energiya va termodinamikaning birinchi qonuni

Klassik fizika bo'yicha, energiya tushunchasi fizik tizimning o'ziga xos xususiyati bo'lib, tizimning, xususan, tizimdagi kuchlar, mexanik ish qilish yoki tizimni isitish yoki sovitish qobiliyatini belgilaydi. Ish, albatta, kuch va masofaning ko'paytmasi, ya'ni $\int F dq$ bo'ladi, issiqlik esa ikki yoki undan ortiq tizimlar o'rtasidagi energiya almashinuvi haroratlardagi farq tufayli yuzaga kelishini o'lchashdir.

Energiya potentsialga o'xshash; vaqt bir lahzasi ichida o'zgarish sodir bo'lganda, energiyaning o'zgarishi ish bajarilishiga yoki issiqlik miqdori ajralishiga aylanadi. Makrosistemadagi umumiy energiya yig'indisi quyidagicha ifodalaniadi:

$$E = \kappa + U$$

bu yerda κ kinetik energiya va U tizimning ichki energiyasidir. Kinetik energiya tizimning harakatga asoslangan holda ish qilish qobiliyatini tavsiflaydi, ya'ni inersiya kuchlarining bajargan ishi, ya'ni massa $\times$ tezlanish, harakatning har bir birlik vaqt uchun amalga oshirilishidir. Ichki energiya esa ichki mexanik kuchlarning ish qilish qobiliyatidir. Agar $\dot{W}$ kuchlarning ish bajarish tezligini, P mexanik quvvatni (4.16-rasmni eslang) va $\dot{Q}$ issiqlikning qizdirish yoki sovutish tezligini (bu issiqlik oqimi deb ataladi) belgilasa, unda:

$$\frac{d}{dt} (\kappa + U) = \dot{W} + \dot{Q} \quad (17.1)$$

Biz ushbu munosabatni termodinamikaning birinchi qonuni deb tan olamiz (bu yerda $P = \dot{W}$ 1-qismda qamrab olingan (5.3-rasmni eslang)).

Kvazi-statik termodinamik jarayonlar uchun, $\dot{\kappa}$ $\dot{U}$ ga nisbatan nol yoki ahamiyatsiz bo'lib va energiyaning sekin o'zgarishlari bir makroskopik muvozanat holatidan boshqasiga o'tishini ta'minlaydi, shunda (17.1) quyidagi shaklga keladi:

$$\dot{U} = \dot{W} + \dot{Q} \quad (17.2)$$

Biz yuqoridagi nuqtalar (*) makroskopik vaqt miqyosiga nisbatan vaqt tezliklarini ifodalaydi deb ta'kidlaganmiz. Biz keyingi o'rinlarda birinchi qonunni statistik mexanika nuqtayi nazaridan qayta ko'rib chiqamiz.

17.3. Kvazi-statik jarayonlarda ish bajarilish tezligining statistik mexanika talqini

Endi kvazi-statik jarayonlarni statistik mexanika orqali tavsiflashga qaytamiz. Bizga ma'lumki, qiziqarli fizik hodisalar ikki (yoki undan ortiq) miqyosda sodir bo'lishi mumkin: mikroskopik miqyosda, ilgari muhokama qilingan fazoviy koordinata-impuls juftliklarida (q, p) tavsiflanadi.

Makroskopik hodisalar va ular tizimga tashqi ta'sir ko'rsatadigan sharoitlar tomonidan belgilangan cheklovlardir. Biz muhitga mos keladigan tizimni tasavvur qilamiz (qattiq jism, suyuqlik yoki hatto gaz) va har bir nuqtada kinematik o'zgaruvchi/ari orqali aniqlaymiz, ular $G_1, G_2, \dots, G_k$ yoki soddalik uchun shunchaki G deb belgilanadi. Bu yerda G_1 nuqtada mahalliy hajm o'zgarishi v ni, deformatsiya gradiyentini $G_1 = E_{11}, G_2 = E_{22}, \dots$ yoki deformatsiya tenzorining komponentini, $G_3 = C_{33}$, yoki deformatsiya gradiyentini $G_j = F_{ij}, j=1, 2, 3$ ifodalashi mumkin. G lar nazorat qilinadigan kinematik o'zgaruvchilar deb ataladi.

Gamilton funksiyani mikroholatlar (q, p) va kinematik o'zgaruvchilar G funksiyasi sifatida yozish g'oyasi makro va mikro holatlar o'rtasida mustahkam bog'lanishni ta'minlaydi va bu Weiner [66] va statistika termodinamikasi bo'yicha adabiyotlarda boshqa joylarda ham keltirilgan. Shu sababli, biz endi Hamiltonian uchun quyidagini yozamiz:

$$H = H(q_1, q_2, \dots, q_n, p_1, p_2, \dots, p_n); G_1(t), G_2(t), \dots, G_k(t) = H(q, p; G(t)),$$

$$G(t) = (G_1(t), G_2(t), \dots, G_k(t)) \quad (17.3)$$

bu yerda t kvazistatik jarayonlar uchun makro vaqt parametri hisoblanadi.

Biz fundamental ergodik farazni klassik statistika mexanikasida davom ettiramiz: fizik tizimning har qanday kuzatiladigan makro xususiyati uchun faza funksiyasi mavjud bo'lib, uning fazaviy o'rtachasi yoki ansambl o'rtachasi aniq tizimning kuzatilgan xususiyati bilan bir xil. Shunday qilib, biz oldingi bobdagi kabi, mikroholat juftliklari (q, p)ga bog'liq bo'lgan taqsimot funksiyasi $\mathcal{Q}$ ning mavjudligini taxmin qilamiz. Kanonik ansambl uchun taqsimot quyidagi shaklda yozilishi mumkin:

$$\mathcal{Q}(q, p; G, \theta) = \exp \left(\frac{A(G, \theta) - H(q, p; G)}{\theta} \right) \quad (17.4)$$

bu yerda $A = A(G, \theta)$ – normallashtirish sharti $\int_{\mathcal{H}} \mathcal{Q} \, dq \, dp = 1$ bilan belgilanadi, θ – bu parametr haroratni tavsiflaydi (odatda, $\theta = \beta^{-1} = kT$).

(17.3)ga qaytgan holda, biz Hamiltonian H ning kinematik nazorat qilinadigan parametrlar G o'zgarishiga bog'liq vaqt o'zgarish tezligini (q, p) o'zgarish qoldirilsa, qayd etamiz, bu quyidagicha ifodalanadi:

$$\left. \frac{dH}{dt} \right|_{(q,p)} = \sum_{k=1}^K \frac{\partial H}{\partial G_k} \frac{dG_k}{dt} = \sum_{k=1}^K f_k \dot{G}_k \quad (17.5)$$

bu yerda $f_k G_k$ ga mos keluvchi mikromexanik umumlashtirilgan kuchlardir:

$$f_k(q, p; G) = \frac{\partial H(q, p; G)}{\partial G_k}, \quad k = 1, 2, \dots, K \quad (17.6)$$

$\dot{G}_k$ – bu G_k ning sekin (makrovaqt) o'zgarish tezligi. f_k kuchlari faza funksiyalari bo'lib, kinematik o'zgaruvchilar G ga tegishli makro cheklovlar-ga bog'liqdir. Shunday qilib, agar $G=G_1=v$, mikrodarajadagi hajm o'zgarishi bo'lsa, biz quyidagini olamiz:

$$f(q, p; v) = \frac{\partial H(q, p; v)}{\partial v} = -p^m(q, p; v)$$

va p^m – faza funksiyasi bo'lib, $\langle p^m \rangle = p$ – makromiqyosdagi bosimni bildiradi. Agar G deformatsiya tenzori E qiymatlariga mos kelsa (masalan, $G_1 = E_{11}$, $G_2 = E_{12}$, ..., $G_6 = E_{33}$), biz quyidagini yozamiz:

$$f_{ij}(q, p; \mathbf{E}) = \frac{\partial H(q, p; \mathbf{E})}{dE_{ij}} = S_{ij}^m(q, p; \mathbf{E}), \quad 1 \leq i, j \leq 3$$

bu yerda $S_{ij}^m(q, p, \mathbf{E})$ – (ikkinchi Piola–Kirchhoff kuchlanishi bo'lgan) kuchlanish tenzori S uchun faza funksiyasi bo'lib, $\langle S_{ij}^m \rangle = S_{ij}$. Ushbu misollarda, biz tizim uchun taqsimot funksiyasi p mavjud deb faraz qilamiz va har qanday faza funksiyasi f uchun $\langle f \rangle = \int_{\mathcal{H}} f \varrho \, dq \, dp$ ekanligini hisobga olamiz.

Makroskopik umumlashtirilgan kuchlar F_k kuchlarning fazaviy o'rtacha qiymatlari sifatida aniqlanadi:

$$F_k(G, \theta) = \langle f_k \rangle = \int_{\mathcal{H}} \varrho(q, p; G, \theta) f_k(q, p; G) dq dp \quad (17.7)$$

Umumiy makroskopik ish bajarilish tezligi (ya'ni mexanik quvvat) umumlashtirilgan kuchlar F_k va kinematik parametrlar G_k ning o'zgarish tezligi mahsulotidir:

$$\dot{W} = \sum_{k=1}^K F_k \dot{G}_k \quad (17.8)$$

Shunday qilib, (17.5)dan, quyidagini olamiz:

$$\langle \dot{H} \rangle = \left\langle \left. \frac{dH}{dt} \right|_{(q,p)} \right\rangle = \int_{\mathcal{H}} \varrho \sum_{k=1}^K f_k \dot{G}_k dq dp = \sum_{k=1}^K \dot{G}_k \int_{\mathcal{H}} \varrho f_k dq dp = \sum_{k=1}^K \dot{G}_k F_k$$

Shunday qilib, (17.8)dan, biz quyidagiga kelamiz:

$$\langle \dot{H} \rangle = \dot{W} \quad (17.9)$$

Shuni ta'kidlash kerakki, bu natija ϱ ning aniq shakliga bog'liq emas.

17.4. Statistik mexanika talqini: Termodinamikaning birinchi qonuni

Kanonik ansamblning (17.4) shaklidagi ϱ taqsimot belgilangan tizimlarda kvazistatik jarayonlarni ko'rib chiqishni davom ettiramiz. Biz mikro miqyosdagi ichki energiyani belgilovchi faza funksiyasi $u = u(q, p)$ mavjud deb faraz qilamiz, bu yerda $\langle u \rangle = U$. Ammo bunday tizimlar uchun biz bilamizki,

$$u = H(q, p; G, \theta) \quad (17.10)$$

shunday qilib,

$$U = U(G, \theta) = \int_{\mathcal{H}} \varrho(q, p; G, \theta) H(q, p; G, \theta) dq dp \quad (17.11)$$

bu quyidagini tasdiqlaydi:

$$U = \langle H \rangle \quad (17.12)$$

Keyin U ning vaqt bo'yicha o'zgarish tezligi quyidagicha bo'ladi:

$$\begin{aligned} \dot{U} &= \frac{d}{dt} \langle H \rangle = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{H}} \varrho H dq dp = \int_{\mathcal{H}} \dot{H} \varrho dq dp + \int_{\mathcal{H}} H \dot{\varrho} dq dp = \\ &= \langle \dot{H} \rangle + \int_{\mathcal{H}} H \dot{\varrho} dq dp \end{aligned} \quad (17.13)$$

Biz ushbu vaqt hosilalari sekin makrovaqt rejimida ekanligini ta'kidlaymiz. $H = H(\varrho, q; G(t), \theta)$ bo'lgani uchun, quyidagini olamiz:

$$\dot{H} = \sum_{k=1}^K \frac{\partial H}{\partial G_k} \dot{G}_k = \sum_{k=1}^K f_k \dot{G}_k$$

(17.6) va (17.9)ni eslab, quyidagini olamiz:

$$\langle \dot{H} \rangle = \int_{\mathcal{H}} \varrho \sum_{k=1}^K f_k \dot{G}_k dq dp = \dot{W}$$

va quyidagini xulosa qilamiz:

$$\dot{Q} = \dot{U} - \dot{W} = \int_{\mathcal{H}} H \dot{\varrho} dq dp \quad (17.14)$$

bu yerda $\dot{Q}$ quyidagicha aniqlanadi:

$$\dot{Q} = \sum_{k=1}^K \frac{\partial \varrho}{\partial G_k} \dot{G}_k$$

Shunday qilib, (17.14) tenglama kvazi-statik jarayonlar uchun termodinamikaning birinchi qonunining statistik mexanika versiyasidir.

17.4.1. $\dot{Q}$ ning statistik talqini

Taqsimot funksiyasi quyidagi shaklda bo'lgan tizimlarni ko'rib chiqamiz:

$$\varrho = e^{\eta} \quad (17.15)$$

bu yerda, masalan, (17.4) bajarilgan hollarda, quyidagini olamiz:

$$\eta(q, p; G(t), \theta) = \frac{A(G(t), \theta) - H(q, p; G(t), \theta)}{\theta} \quad (17.16)$$

va $\theta = kT$, bu yerda T absolyut harorat. Shunday qilib,

$$\dot{\varrho} = \dot{\eta} e^{\eta} \quad (17.17)$$

Quyidagi lemmada ba'zi oddiy identifikatsiyalarni keltiramiz:

17.1-lemma (17.15) va (17.16) bajarilsin. Agar A shunday tanlansa, $\int_{\mathcal{H}} \varrho \, dq \, dp = 1$
Unda

$$(i) \quad \int_{\mathcal{H}} \dot{\eta} e^{\eta} \, dq \, dp = 0, \quad (17.18)$$

$$(ii) \quad \int_{\mathcal{H}} A \dot{\varrho} \, dq \, dp = 0, \quad (17.19)$$

va bundan tashqari,

$$\overline{\langle \eta \rangle} = \int_{\mathcal{H}} \eta \dot{\eta} e^{\eta} \varrho \, dq \, dp. \quad (17.20)$$

Isbot (i) Bizga ma'lumki

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{H}} \varrho \, dq \, dp = \frac{d}{dt} (1) = 0 = \int_{\mathcal{H}} \dot{\varrho} \, dq \, dp = \int_{\mathcal{H}} \dot{\eta} e^{\eta} \, dq \, dp$$

o'rinalidir

(ii) Ushbu natija $A = A(G(t), \theta)$ (q, p)ga bog'liq emasligidan kelib chiqadi.

(iii) Quyidagini hosil qilamiz:

$$\overline{\langle \eta \rangle} = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{H}} \varrho \, \eta \, \dot{\eta} \, dq \, dp = \int_{\mathcal{H}} \dot{\varrho} \, \eta \, dq \, dp + \int_{\mathcal{H}} \varrho \, \dot{\eta} \, dq \, dp.$$

Ikkinchi integral (17.18)ga ko'ra nolga teng va $\dot{\varrho}$ (17.17)ga muvofiq berilgan. Shunday qilib, (17.20) bajariladi. Xulosa qilib, biz quyidagilarga ega bo'lamiz:

$$\begin{aligned}\dot{Q} &= \int_{\mathcal{H}} H \dot{\varrho} dq dp = \int_{\mathcal{H}} H \dot{\eta} e^n dq dp = \\ &= \int_{\mathcal{H}} (H - A) \dot{\eta} e^n dq dp = -\theta \int_{\mathcal{H}} \dot{\eta} e^n dq dp\end{aligned}$$

Oxirgi integral $\langle \dot{\eta} \rangle$ ga teng deb tan olinadi; (17.20 ga qarang). Shunday qilib,

$$\dot{Q} = -\theta \langle \dot{\eta} \rangle \quad (17.21)$$

(17.9) va (17.21)ni (17.2)ga kiritib, biz kvazi-statik jarayonlar uchun termodinamikaning birinchi qonunining statistik mexanika tavsifini ko'ramiz:

$$\dot{U} = \langle \dot{H} \rangle - \theta \langle \dot{\eta} \rangle \quad (17.22)$$

17.5. Entropiya va taqsimot funksiyasi

(17.21)dagi empirik harorat θ , avval ta'kidlanganidek, absolyut harorat T ga proporsionaldir, proporsionallik konstanti k Bolsmann doimiysi: $\theta = kT$. (17.21) ga ko'ra, harorat birligi uchun $\dot{Q}$ miqdori tizimning entropiya deb ataladigan holat xossasidagi o'zgarishga olib keladi. Shunday qilib,

$$\frac{1}{T} \dot{Q} = \dot{S}$$

Demak, (17.21)ga muvofiq, bizda quyidagicha:

$$S(G, T) = -k \langle \eta \rangle \quad (17.23)$$

S – bu tizimning makroskopik xususiyati bo'lib, kvazistatistik jarayonlar uchun G va T ga bog'liq va (17.16)da aniqlangan holat funksiyasi $\eta = \eta(q, p; G, \theta)$ ning fazaviy o'rtachasiga proporsionaldir. $\eta = \int_{\mathcal{H}} \varrho \eta dq dp$ ekanligini hisobga olib, biz entropiya va taqsimot funksiyasi ϱ o'rtasidagi bevosita bog'liqlikni olamiz:

$$S = -k \int_{\mathcal{H}} \varrho \ln \varrho dq dp \quad (17.24)$$

(17.16)ga qaytib, $\eta = \eta(G, T)$ ni yozamiz, chunki $\theta = kT$, ikkala tomonning fazaviy o'rta qiymatini olamiz:

$$kT \langle \eta \rangle = A(G, T) - \langle H \rangle(G, T) = A(G, T) - U(G, T)$$

yoki

$$A = U - ST \quad (17.25)$$

bu yerda A , U va S larning (G, T) ga bog'liqligini e'tiborga olamiz. Biz A ni tizimning Gelmgols erkin energiyasi sifatida qabul qilamiz ((7.13)da berilgan birlik massaga nisbatan Gelmgols erkin energiyaning ta'rifini eslaymiz). Biz A ni ta'rifida η ni aniqlanishini eslaymiz, shunda $\varrho = e^\eta$ normallashtirish sharti $\int_{\mathcal{H}} \varrho \, dq \, dp = 1$ ni qanoatlantiradi. Shunday qilib,

$$e^{-\frac{A}{kT}} = \int_{\mathcal{H}} e^{-\frac{H}{kT}} dq dp$$

yoki

$$A(G, T) = -kT \ln \Omega(G, T) \quad (17.26)$$

bu yerda

$$\Omega(G, T) = \int_{\mathcal{H}} e^{-\frac{H(q, p, G, T)}{kT}} dq dp \quad (17.27)$$

$\Omega(G, T)$ ni tizimning taqsimot funksiyasi sifatida aniqlangan (oldingi (16.27) yoki (16.44) formulalarga qarang). Bu, berilgan (G, T) uchun tizimning mikroskopik tabiatini tavsiflaydi va (17.26)da keltirilgan Helmholtz erkin energiyasi bilan bog'liqligi tizimning mikroskopik yoki molekulyar tabiati va uning makroskopik xususiyatlari o'rtasidagi bog'lanishni ta'minlaydi.

17.6. Qo'shma Hamiltonianlar

Qavariq funksional $J: V \rightarrow \mathbb{R}$ ning qo'shma J^* funksiyasi, bu yerda V normalashgan fazo, quyidagicha aniqlanadi:

$$J^*(\sigma) = \sup_{v \in V} \{ \langle \sigma, v \rangle - J(v) \} \quad (17.28)$$

bu yerda $\langle \cdot, \cdot \rangle$ ifodasi $V' \times V$ dagi duallik juftligini bildiradi, $V' = V$ ning dual fazosi hisoblanadi. (17.28) amali Legandr transformatsiyasi deb ataladi va $J^*: V \rightarrow \mathbb{R}$ J ning birlashgan funksionalidir (batafsil ma'lumot uchun qarang: [51, 61, 66]). Hatto J konveks bo'lmasa ham, biz J^* ni formal ravishda $\sup_{v \in V} \{ \langle \sigma, v \rangle - J(v) \}$ sifatida aniqlashimiz mumkin.

Hamiltonian H ga o'tib, biz $H = H(q, p; G, T)$ deb yozamiz, bu yerda θ ni $T = \frac{\theta}{k}$ = doimiy bilan almashtirib, yanada an'anaviy yozuvga moslashamiz. Bu holda, soddalik uchun H ning G ga nisbatan konveksligini faraz qilamiz, shunda (q, p) va T ga bog'liq holda derivativlar teskari funksiyalar hisoblanadi. Shunday qilib, belgilaymiz:

$$f_k = \left(\frac{\partial H}{\partial G_k} \right) \Big|_{(q, p)} = f_k(q, p; G, T), \quad k = 1, 2, \dots, K, \quad (17.29)$$

biz teskari funksiyalarni hisoblaymiz:

$$G_k = G_k(q, p; f, T), \quad k = 1, 2, \dots, K \quad (17.30)$$

bu yerda $f = (f_1, f_2, \dots, f_K)$. Endi biz qo'shma Hamiltonian H^* ni quyidagi transformatsiya orqali aniqlaymiz:

$$H^*(q, p; f, T) = H(q, p; G, T) - \sum_{k=1}^K (f_k G_k) \quad (17.31)$$

So'ngra,

$$\frac{dH^*}{dt} = \sum_{k=1}^K \frac{\partial H^*}{\partial f_k} \Big|_{(q,p)} \dot{f}_k = \sum_{k=1}^K \frac{\partial H^*}{\partial G_k} \dot{G}_k - f_k \dot{G}_k - \dot{f}_k G_k$$

bundan quyidagini xulosa qilamiz:

$$G_k = - \frac{\partial H^*}{\partial f_k} \Big|_{(q,p)}, \quad k = 1, 2, \dots, K \quad (17.32)$$

Qo'shma Hamiltonian, Hamiltonian tomonidan kinematik markaziy o'zgaruvchilar G bilan tavsiflangan bir xil tizimning dinamik tavsifini taqdim etadi, lekin tizimga ta'sir qiluvchi umumlashtirilgan mexanik kuchlar F_k ni tasvirlaydigan yangi markaziy parametrlari bilan. H va H^* funksionallari ko'rib chiqilayotgan tizim uchun bir xil dinamikani aniqlaydi.

Agar biz tizimning taqsimot funksiyasi $\varrho = e^\eta$ ni qo'shma Hamiltonian nuqtasi nazaridan yozsak, quyidagi yozuvdan foydalanamiz:

$$\varrho^*(q, p; F, T) = \exp \left[\frac{(A^*(F, T) - H^*(q, p; F, T))}{kT} \right] \quad (17.33)$$

Shunda qo'shma Helmholtz erkin energiya quyidagicha bo'ladi:

$$A^*(F, T) = -k \ln(\Omega^*(F, T)) \quad (17.34)$$

bu yerda Ω^* qo'shma taqsimot funksiyasi:

$$\Omega^*(F, T) = \int_{\mathcal{H}} \exp \left(\frac{-H^*(q, p; F, T)}{kT} \right) dq dp \quad (17.35)$$

Boshqa termodinamik kattaliklar ham H^* , ϱ^* , Ω^* va boshqalarda yozilishi mumkin. Masalan,

$$U(F, T) = \int_{\mathcal{H}} [H^*(q, p; F, T) \varrho^*(q, p; F, T) dq dp] \quad (17.36)$$

$$S(F, T) = -k \int_{\mathcal{H}} [\varrho^*(q, p; F, T) \ln \varrho^*(q, p; F, T) dq dp] \quad (17.37)$$

Ichki energiya U quyidagini qanoatlantiradi:

$$\dot{U} = \sum_{k=1}^K (F_k \dot{G}_k + \dot{Q})$$

shunga o'xshash dual funksional:

$$\dot{h} = \sum_{k=1}^K (G_k \dot{F}_k + \dot{Q}), \quad (17.38)$$

entalpiya o'zgarish tezligini ifodalaydi, bu quyidagicha aniqlanadi:

$$h = U - \sum_{k=1}^K (F_k G_k) \quad (17.39)$$

17.7. Gibbs munosabatlari

Gibbs munosabatlari deb ataladigan asosiy termodinamik kattaliklar va munosabatlar qatori, oldingi bo'limlarda keltirilgan munosabatlardan osonlikcha kelib chiqadi va tizimlarning mikro xususiyatlari bilan bog'liq munosabatlari bo'linish funksiyalari Ω va Ω^* bilan yana aks etadi. Biz ularni quyidagicha keltiramiz:

Ichki energiya

$$U = U(G, T) = -\frac{\partial \ln(\Omega)}{\partial \beta} = -\frac{1}{\Omega} \frac{\partial \Omega}{\partial \beta} \quad (17.40)$$

Entropiya

$$S(G, T) = k \left(\ln \Omega - \beta \frac{\partial \Omega}{\partial \beta} \right) \quad (17.41)$$

$$S(F, T) = k \left(\ln \Omega^* - \beta \frac{\partial \Omega^*}{\partial \beta} \right) \quad (17.42)$$

Helmholtz erkin energiyasi

$$A(G, T) = -kT \ln \Omega \quad (17.43)$$

Entalpiya

$$h(F, T) = -\frac{\partial \Omega^*}{\partial \beta} \quad (17.44)$$

Gibbs erkin energiyasi

$$G(F, T) = U^*(F, T) - T S^*(F, T) = -kT \ln \Omega^* \quad (17.45)$$

Ushbu munosabatlar kanonik ansambl bilan tavsiflangan makroskopik tizimlarga nisbatan qo'llaniladi.

17.8. Monte Carlo va Metropolis usullari

Gibbs munosabatlari, (17.40)–(17.45) va ularning turli xil alternatalari eng muhim termodinamik tizimlarning asosiy makroskopik xususiyatlari bo'linish funksiyasi Ω yoki uning qo'shma funksiyasi Ω^* orqali aniqlanishi mumkinligini ko'rsatadi. Biroq, Ω ni aniqlash qiyin vazifa bo'lishi mumkin, chunki u $6N$ -o'lchovli fazoviy fazoda $\mathcal{H}$ faza funksiyasini integratsiyalashni o'z ichiga oladi (qarang (17.27)). Ushbu qiyinchilikni hal qilishning yagona umidi bu kabi katta tizimlarda mikroxususiyatlarning stoxastik xususiyatlarini hisobga olgan holda, sonli integratsiya usullaridan foydalanishdir. Monte Carlo usullari bu turdagi hisob-kitoblar uchun asosiy va eng yaxshi ma'lum bo'lgan usullardir.

Monte Carlo usullari tasodifiy namunalar olishni qo'llaydi, bu nomini ilhomlantirgan qimor sayti ruhida. Ular eng yaxshi integratsiya usuli sifatida qadrlanadi, aslida ular odatda shu tarzda qo'llaniladi. Shunday qilib, silliq funksiyaning integrali $f(x)$ ni baholash uchun:

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

biz quyidagini kuzatamiz:

$$I = (b - a) \langle f \rangle,$$

bu yerda $\langle f \rangle$ intervaldagi $[a, b]$ uchun f ning o'rtacha qiymatini bildiradi. Monte Carlo usulining ibtidoiy versiyasi f ni katta sonlar K bilan baholashni o'z ichiga oladi. Tasodifiy yaratilgan nuqtalar $x_i \in [a, b]$ uchun:

$$\langle f \rangle \approx \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K f(x_i) \quad (17.46)$$

Uzluksiz f miqdor uchun ushbu taqribiy tenglik $\mathcal{O}(\sqrt{K})$ aniqlikka ega va shu sababli statistik mexanikada duch keladigan katta tizimlar uchun samarali emas. Aniqlikni oshirishni yana bir usuli qaralayotgan oraliqda nol bo'lmagan $g(x)$ funksiyasini quyidagicha tanlash mumkin:

$$I = \int_a^b \left(\frac{f(x)}{g(x)} \right) g(x) dx = \int_a^b \frac{f(x(h))}{g(x(h))} dh$$

bu yerda $h'(x) = g(x)$. Shunda

$$I \approx \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \frac{f(x(h_k))}{g(x(h_k))} \quad (17.47)$$

bu yerda $h_i = h(x)$ ning $[a, b]$ bo'ylab taqsimlangan tasodifiy qiymatlari. Chunki biz, odatda, $g(x)$ yoki $h(x)$ ni qanday tanlashni oldindan bilmaymiz, bu tarafdan Monte Carlo usuli ham amaliy bo'lmisligi mumkin. Ushbu muammoni hal qiluvchi muqobil yondashuvni muhokama qilamiz.

17.8.1. Kanonik ansambl uchun bo'linish funksiyasi

(17.27)ga qaytib, biz N bir xil massa m zarrachalariga ega bo'lgan Hamiltonian tizimini ko'rib chiqamiz va bo'linish funksiyasini quyidagi shaklda qayta yozamiz:

$$\Omega = \int_{\mathcal{H}} \frac{e^{-H(q,p)}}{kT} dq dp = \int_{\mathcal{H}} e^{-\frac{V(q)+p^2/2m}{kT}} dq dp = \int_{\mathcal{H}_q} e^{-\frac{V(q)}{kT}} dq \int_{\mathcal{H}_p} e^{-\frac{p^2}{2mkT}} dp$$

bu yerda birinchi integral tizimning konfiguratsiya qismiga, ikkinchi integral esa kinetik qismiga mos keladi va biz $\mathcal{H}$ ni $\mathcal{H}_q \times \mathcal{H}_p$ ga bo'ldik. Biz agar harakatlar kichik kvazistatistik tebranishlar bo'lsa ($p \approx 0$) kinetik qismini olib tashlaymiz, shunda $\exp(-p^2/2mkT) \approx 1$ yoki biz zarralar o'zaro ta'sir qilmaydigan va $V(q)$ nolga teng bo'lgan ideal gaz farazidan foydalanishimiz mumkin. Bu holda,

$$\Omega_{ideal} = \int_{\mathcal{H}_p} e^{-\frac{p^2}{2mkT}} dp = \frac{V^N}{N! h^{3N}} (2\pi mkT)^{\frac{3N}{2}} \quad (17.48)$$

bu yerda $V = N$ zarralar egallagan o'zgarmas hajm. Keyin biz hisoblashimiz kerak:

$$\Omega = \Omega_{ideal} \int_{\mathcal{H}_q} e^{-\frac{V(q)}{kT}} dq \quad (17.49)$$

Monte Carlo usullaridan foydalanishning maqsadi Ω ni baholashda (17.46) yoki (17.47) oddiy qo'llanishidan iborat: integrandning $\exp(-V(q)/kT)$ qiymatlarini $\mathcal{H}_q$ bo'ylab tasodifiy tanlash va yaqinlashmalarni yig'ish. Afsuski, ushbu soddalashtirishlarga qaramay, standart Monte Carlo usuli samarali emas, chunki integral qiymatiga deyarli ta'sir qilmaydigan ko'p sonli namunalar mavjud. Muqobil yondashuv kerak.

17.8.2. Metropolis usuli

Metropolis usuli Monte Carlo usulining bir versiyasini taqdim etadi, bu usul fazaviy fazo bo'ylab namunalarni yig'ish usulini taqdim etadi va bu namunalar ansambl o'rtacha qiymatiga eng sezilarli ta'sir ko'rsatishi ehtimoli yuqori (qarang: Metropolis va boshqalar [60]). Metropolis usuli Markov zanjiri hosil qiladi, ya'ni sinov namunalari ketma-ketligi quyidagi xususiyatlarga ega.

Ketma-ketlikdagi har bir sinov faqat oldingi sinov namunasi bilan bog'liq va boshqa namunalarga bilan bog'liq emas. Har bir sinov mumkin bo'lgan natijalar to'plamiga tegishli. Maqsad Boltzmann omilidan $\exp(-V(q)/kT)$ tizimning berilgan konfiguratsiyasini olish ehtimolini ishlatishdir. Metropolis sxemasi konfiguratsiyalar zanjirini hosil qiladi $(q_1, q_2, \dots, q_n)$, har bir konfiguratsiya uchun $V(q_i)$ ni hisoblaydi va past energiyaga ega bo'lgan holatga yuqori ehtimollik beradi...

Har bir qabul qilingan konfiguratsiya uchun kerakli xususiyatning qiymati (masalan, erkin energiya $A(q_i)$) hisoblanadi va K bosqichlar bo'yicha o'rtacha qiymat ansambl o'rtacha qiymatini yaqinlashtiradi ($\langle A \rangle \approx K^{-1} \sum_{i=1}^K A(q_i)$).

Ixtiyoriy konfiguratsiyadan boshlanib (koordinata q qiymatlarining to'plami), yangi konfiguratsiya sinov konfiguratsiya komponentlarining tasodifiy o'zgarishlari (inkrementlari) orqali yaratiladi. Yangi konfiguratsiyaning energiyasi tizim uchun tanlangan atom yoki molekulyar potensial funksiyadan foydalanib hisoblanadi (molekulyar dinamika kabi, qarang: 16.9-bo'lim). Agar yangi energiya avvalgi konfiguratsiyadan past bo'lsa, u qabul qilinadi. Agar yangi energiya yuqori bo'lsa, farqning Boltzmann omili hisoblanadi:

$$B = \exp\left(-\frac{V(q_{\text{new}}) - V(q_{\text{old}})}{kT}\right)$$

Keyin biz tasodifiy son $r \in [0, 1]$ ni tanlaymiz. Agar $r > B$ bo'lsa, yangi konfiguratsiya rad etiladi. Agar $r \leq B$ bo'lsa, harakat qabul qilinadi va yangi konfiguratsiya keyingi holat sifatida qabul qilinadi. Shunday qilib, Metropolis usuli yuqori energiyali holatlarga o'tishga imkon beradi, lekin bunday holatdagi energiya qancha past bo'lsa, uning qabul qilinish ehtimoli shunchalik yuqori bo'ladi. Boltzmann omili B aslida ketma-ket qadamlar ehtimolliklarining nisbatidir, shuning uchun bu nisbat yangi konfiguratsiya qabul qilinishi bilan kamayadi. Yakuniy qadamda turli qiziqish kattaliklari ansambli o'rtacha qiymatini hisoblash uchun zarur bo'lgan ehtimollik taqsimoti (taqsimot funksiyasi) yaqinlashmasi hosil bo'ladi.

17.9. Kinetik nazariya: statistik mexanikada. Boltzmann harakat tenglamasi

17.9.1. Boltzmann tenglamasi

Biz endi muvozanat statistik mexanikasining doirasidan chiqib, gazlar va suyuqliklarning kinetik nazariyasiga qisqa safar qilamiz, bunda yuqori tezlikda harakatlanayotgan zarrachalarning to'qnashishi va qaytishi ehtimoli hisobga olinadi. Bir qator soddalashtiruvchi yaqinlashishlar orqali biz Boltzmann tenglamasiga kelishimiz mumkin, bu esa statistik mexanikaning modellaridan biri siqiluvchi suyuqliklar va gazlar tutash mexanikasining makroskopik modellari uchun o'rinalidir.

Biz Liouville tenglamasiga (16.22) qaytamiz, lekin endi bitta zarrachaning zichlik funksiyasi $\varrho = \varrho_1(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ bilan cheklanib qolamiz, bu boshqa massa m bilan teng bo'lgan zarrachaning to'qnashishi mumkin. Endi ϱ_1 faqat yettita o'zgaruvchi funksiyasi: koordinata vektori $\mathbf{x} = \mathbf{q}$ ning uchta komponenti, tezlikning uchta komponenti $\mathbf{w} = \mathbf{p}/m$ va vaqt t va biz m ni F ta'rifiga kiritamiz. Biz $\varrho_1 = \varrho_1(\mathbf{x}, \mathbf{w}, t)$ deb yozamiz. (16.22)ga ko'ra, L Liouville operatori bo'lsa, biz (16.22)ni quyidagicha qayta yozamiz:

$$L\varrho_1 = \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \mathbf{w} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \varrho_1 + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{w}} \varrho_1 = \left(\frac{\partial \varrho_1}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \quad (17.50)$$

bu yerda $(\partial \varrho_1 / \partial t)_{\text{coll}}$ – ikkita zarrachaning to'qnashuvining ϱ ga ta'sirini tavsiflovchi to'qnashuv atamasi. Ushbu tenglama, ilgari ta'kidlanganidek, Boltzmann tenglamasi deb ataladi. Bu gazlarning kinetik nazariyasi uchun markaziy o'rin tutadi. Asosiy masala, to'qnashuv atamasini ϱ_1 funksiyasi sifatida tavsiflashni ishlab chiqishdir.

Asosiy to'qnashuv shartlari klassik zarracha dinamikasi qonunlarini qo'llaydigan bir qator soddalashtiruvchi farazlardan kelib chiqadi: 1-zarracha koordinatasi $\mathbf{x}_1$ va tezligi $\mathbf{w}_1$ bilan, 2-zarracha koordinatasi $\mathbf{x}_2$ va tezligi $\mathbf{w}_2$ bilan to'qnashadi. Biz zarrachalar «qattiq Charlesar» deb faraz qilamiz, shuning uchun mukammal elastik zarba sodir bo'ladi, shundan so'ng zarrachalar mos ravishda tezlik $\mathbf{w}'_1$ va $\mathbf{w}'_2$ ga ega bo'ladi. Chuqurlik va energiya saqlanib qolganligi sababli, bizda quyidagi tenglama mavjud:

$$m\mathbf{w}_1 + m\mathbf{w}_2 = m\mathbf{w}'_1 + m\mathbf{w}'_2, \\ \frac{1}{2}m|\mathbf{w}_1|^2 + \frac{1}{2}m|\mathbf{w}_2|^2 = \frac{1}{2}m|\mathbf{w}'_1|^2 + \frac{1}{2}m|\mathbf{w}'_2|^2.$$

Ushbu munosabatlardan shuni ko'rsatish mumkinki:

$$\mathbf{V}' = \mathbf{V} - 2\mathbf{n}(\mathbf{V} \cdot \mathbf{n}),$$

bu yerda $\mathbf{V}' = \mathbf{w}'_1 - \mathbf{w}'_2$, $\mathbf{V} = \mathbf{w}_1 - \mathbf{w}_2$ va $\mathbf{n} = \mathbf{w}_1 - \mathbf{w}_2$ bo'ylab birlik vektor. Demak, $\mathbf{V}_n = (\mathbf{V} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$ zarba paytida belgini o'zgartiradi va n ga normal tekislikdagi $\mathbf{V}_n$ komponenti o'zgarmaydi. Harakat o'rganish uchun, bizga birinchi zarrachaning $\mathbf{x}_1$ nuqtada tezligi $\mathbf{w}_1$ bilan va ikkinchi zarrachaning $\mathbf{x}_2$ nuqtada tezligi $\mathbf{w}_2$ bilan vaqt t da topilish ehtimoli ϱ_2 ni bilishimiz kerak: $\varrho_2 = \varrho_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, t)$. Agar sigma sferik zarrachaning diametri bo'lsa, quyidagicha dalil keltirish mumkin (qarang, masalan, Cercignani [47, 4-6-betlar]):

$$\left(\frac{\partial \varrho_1}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = (N-1)\sigma^2 \int_{\mathbb{R}^3} \int_B \varrho_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1 + \sigma\mathbf{n}, \mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, t)(\mathbf{w}_2 - \mathbf{w}_1) \cdot \mathbf{n} d\mathbf{w}_2 d\mathbf{n}$$

bu yerda N – zarrachalarning umumiy soni va $B - \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} = 0$ ga mos keladigan sfera. Ushbu munosabatni yanada soddalashtirish va ϱ_1 bilan bir qatorda ϱ_2 ni aniqlash zaruratini bartaraf etish uchun biz molekulyar betartiblik farazidan foydalanamiz:

$$\varrho_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, t) = \varrho_1(\mathbf{x}_1, \mathbf{w}_1, t) \varrho_1(\mathbf{x}_2, \mathbf{w}_2, t)$$

Ushbu farazni tasdiqlovchi dalil quyidagicha: ikkita tasodifiy tanlangan zarrachaning to'qnashishi kam uchraydigan hodisalardir, shuning uchun birinchi zarrachaning $\mathbf{x}_1$ nuqtada tezligi $\mathbf{w}_1$ bilan va ikkinchi zarrachaning $\mathbf{x}_2$ nuqtada tezligi $\mathbf{w}_2$ bilan topilish ehtimoli individual ehtimollik zichliklarining ko'paytmasidir. Ushbu natijalarni yig'ib, quyidagini olamiz (qarang: Cercignani [47, 6-bet]):

$$\begin{aligned} L\varrho_1 = N\sigma^2 \int_{\mathbb{R}^3} \int_{B-} & (\varrho_1(\mathbf{x}_1, \mathbf{w}'_1, t) \varrho_1(\mathbf{x}_2, \mathbf{w}'_2, t) - \\ & - \varrho_1(\mathbf{x}_1, \mathbf{w}_1, t) \varrho_1(\mathbf{x}_2, \mathbf{w}_2, t)) \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} d\mathbf{w}_2 d\mathbf{n} \end{aligned} \quad (17.51)$$

bu yerda, yana, $\mathbf{V} = \mathbf{w}_2 - \mathbf{w}_1$ va B – yarim sfera, $\mathbf{V} \cdot \mathbf{n} \leq 0$. Endi biz (17.51)ni umumlashtirishga o'tamiz, bunda ϱ_1 oddiy f bilan almashtiriladi, bu fazaviy fazo $\mathcal{H}$ ning soni yoki massa zichligini ifodalaydi va $N\sigma^2 \mathbf{V} \cdot \mathbf{n}$ esa $\mathbf{V}$ va qattiq burchakka bog'liq bo'lgan yadrosi $B(\theta, \mathbf{V})$ bilan almashtiriladi. Shunda (17.51) quyidagicha qisqaradi:

$$Lf = Q(f, f) \quad (17.52)$$

Bu yerda $Q(f, f)$ to'qnashuv integralidir:

$$Q(f, f) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{B_-} (f' f'_* - f f_*) B(\theta, \mathbf{V}) d\mathbf{w}_* d\theta d\alpha \quad (17.53)$$

Bu yerda $f' = f(\mathbf{x}, \mathbf{w}', t)$, $f'_* = f(\mathbf{x}, \mathbf{w}'_*, t)$ va α berilgan θ ga mos keladigan burchakdir.

Boltzmann tenglamasi (17.52) zichlik funksiyasi f bo'yicha kuchli nochi-ziqilikni ko'rsatadi. Uning sonli yechimi gaz dinamikasi va statistik mexanika bo'yicha soni oshib borayotgan nashrlar mavzusidir.

17.9.2. To'qnashuv invariantlari

To'qnashuv integralini Q ni nolga aylantiradigan f funksiyalarining zichligi alohida qiziqish uyg'otadi. Avval shuni ta'kidlaymizki, agar $\varphi(\mathbf{w})$ funksiyasi mavjud bo'lsa:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \varphi(\mathbf{w}) Q(f, g) d\mathbf{w} = 0 \quad (17.54)$$

barcha zichliklar f, g uchun, bu to'qnashuv invarianti deb ataladi, chunki bu to'qnashuvlar φ ning o'rtacha qiymatining o'zgarish tezligini ifodalaydi. Uzluk-siz funksiya φ faqat va faqat (17.54) xususiyatiga ega ekanligi ko'rsatilishi mumkin, agar va faqat shunday bo'lsa:

$$\varphi(\mathbf{w}) = \alpha + \beta \cdot \mathbf{w} + c \mathbf{w} \cdot \mathbf{w} \quad (17.55)$$

bu yerda α, β va c – doimiylar ($c > 0$). Besh funksiyalar $\Gamma_1 = 1$, $(\Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4) = (\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \mathbf{w}_3)$ va $\Gamma_5 = |\mathbf{w}|^2$ to'qnashuv invariantlari deb ataladi. Agar $\varphi = \ln f$ bo'lsa, Boltzmann tengsizligi quyidagicha bo'ladi:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \ln f Q(f, f) d\mathbf{w} \leq 0 \quad (17.56)$$

va tenglik faqat va faqat $\ln f$ (17.55) shaklida bo'lsa sodir bo'ladi, ya'ni

$$f = \exp(\alpha + \beta \cdot \mathbf{w} + c |\mathbf{w}|^2)$$

bu quyidagiga teng:

$$f = A \exp(-\beta |\mathbf{w} - \mathbf{v}|^2) \quad (17.57)$$

bu yerda A, β va $\mathbf{v}$ – yangi to'plam doimiylar, ular α, β va c ga bog'liqdir. (17.57)da keltirilgan f funksiyasi Maksvel taqsimoti yoki Maksvellian deb ataladi. $Q(f, f) = 0$ shartini qanoatlantiradigan maxsus zichlik funksiyalarini aniqlashning asl muammosiga qaytib, endi barcha bunday funksiyalar Maksvellian ekanligini osonlik bilan ko'rsatish mumkin. (17.56) atrofidagi dalillar

Boltzmannning H – teoremasini ta’kidlaydi, bunda (17.56)da paydo bo’lgan integral funksiyaning vaqt hosilasidir. $\mathcal{H} = \int_{\mathbb{R}^3} f \ln f \, dw$. Boltzmann tengsizligi (17.56) shuni anglatadiki, $\mathcal{H}$ kamayuvchi qiymatdir, agar taqsimot funksiyasi f Maksvell taqsimoti bo’lmasa; bu holda $d\mathcal{H}/dt = 0$ bo’ladi. Bu, fazoviy-gomogen tizimlar uchun, qaytarilmasligini ifodalaydi; batafsil ma’lumot uchun Cercignani [47, 23-bet] yoki McQuarriye [59, 413–415-betlar]ga qarang.

17.9.3. Siqiluvchan suyuqliklar va gazlarning uzluksiz mexanikasi: makroskopik balans qonunlari

Biz endi to’liq doiraga keldik: makrosistemaning balans qonunlarining kinetik nazariya tenglamalaridan hosil qilinishi, ya’ni Boltzmann tenglamasidan (17.52). Endi f ni fazoviy fazoda Boltzmann tenglamasining yechimi bo’lgan (kutilayotgan) massa zichligi deb olaylik:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{w} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{w}} f = Q(f, f) \quad (17.58)$$

Keling, Γ_{α} oldinroq tavsiflangan to’qnashuv invariantlarini belgilasin $\Gamma_1 = 1, (\Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4) = (\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \mathbf{w}_3)$ va $\Gamma_5 = |\mathbf{w}|^2$ Shunda

$$\int_{\mathbb{R}^3} \Gamma_{\alpha}(\mathbf{w}) Q(f, f) d\mathbf{w} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, 5. \quad (17.59)$$

(17.58)ni (17.59)ga kiritib, integratsiya tartibini o’zgartirib quyidagini olamiz:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbb{R}^3} \Gamma_{\alpha} f \, d\mathbf{w} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{w} \Gamma_{\alpha} f \, d\mathbf{w} + \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{w}} \Gamma_{\alpha} f \, d\mathbf{w} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, 5 \quad (17.60)$$

Endi biz $\tilde{A}_{\alpha}$ ga ularning tegishli qiymatlarini (funksiyalarini) to’qnashuv invariantlari sifatida beramiz. Hosil bo’lgan shartlarni talqin qilish uchun biz quyidagi makroskopik o’zgaruvchilarni kiritamiz:

$$\varrho(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}, \mathbf{w}, t) \, d\mathbf{w} = \text{massa zichligi},$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\varrho} \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{w} f(\mathbf{x}, \mathbf{w}, t) \, d\mathbf{w} = \text{umumiy tezlik},$$

$$E(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{w}|^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{w}, t) \, d\mathbf{w} = \text{birlik hajm uchun umumiy energiya},$$

$$\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{w} \otimes \mathbf{w} f(\mathbf{x}, \mathbf{w}, t) \, d\mathbf{w} = \text{impuls oqimi},$$

$$\mathbf{r}(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{w} |\mathbf{w}|^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{w}, t) \, d\mathbf{w} = \text{energiya oqimi}. \quad (17.61)$$

Bundan tashqari, biz faza tezligini $\mathbf{u}$ ni umumiy tezlik $\mathbf{w}$ va bulk tezlik $\mathbf{v}$ ga nisbatan o'zgarishi sifatida aniqlaymiz:

$$\mathbf{u} = \mathbf{w} - \mathbf{v}$$

shunday qilib, (17.61)₄ quyidagicha yozilishi mumkin:

$$\mathbf{m} = \varrho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + \mathbf{T} \quad (17.62)$$

bu yerda

$$\mathbf{T} = \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} f \, d\mathbf{w} \quad (17.63)$$

$\mathbf{T}$ tenzori (Cauchy) kuchlanish tenzori bo'lib, muhitning har qanday ichki yuzasida impuls oqimini ifodalaydi. Xuddi shunday, umumiy energiya quyidagicha yozilishi mumkin:

$$E = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |\mathbf{u} + \mathbf{v}|^2 f \, d\mathbf{w}$$

chunki $\int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{u} f \, d\mathbf{w} = 0$,

$$E = \frac{1}{2} \varrho |\mathbf{v}|^2 + \varrho e \quad (17.64)$$

bu yerda e birlik massa uchun ichki energiya:

$$\varrho e = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{u}|^2 f \, d\mathbf{w} \quad (17.65)$$

Nihoyat, bizda

$$\mathbf{r} = \int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{u} + \mathbf{v}|^2 (\mathbf{u} + \mathbf{v}) f \, d\mathbf{w} = \varrho \mathbf{v} \left(\frac{1}{2} |\mathbf{v}|^2 + e \right) + \int_{\mathbb{R}^3} (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \mathbf{v} f \, d\mathbf{w} + \mathbf{q},$$

yoki

$$\mathbf{r} = \varrho \mathbf{v} E + \mathbf{T} \mathbf{v} + \mathbf{q}, \quad (17.66)$$

bu yerda $\mathbf{q}$ issiqlik oqimi vektori

$$\mathbf{q} = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{u} |\mathbf{u}|^2 f \, d\mathbf{w} \quad (17.67)$$

Endi (17.60)ga qaytsak, avval $\alpha = 1$, $\Gamma_1 = 1$ ni o'rnatamiz va massa saqlanish tenglamasini olamiz: $\nabla_{\mathbf{x}} \equiv \nabla$:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{v}) = 0 \quad (17.68)$$

Keyinchalik, $(\Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4) = \mathbf{w}$ va $\int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{w}} \mathbf{w} f \, dx = \varrho \mathbf{f}$ deb belgilab, quyidagini olamiz:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varrho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + \mathbf{T}) = \varrho \mathbf{f} \quad (17.69)$$

Nihoyat, $\Gamma_5 = |\mathbf{w}|^2$ va $\int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{w}} |\mathbf{w}|^2 f \, dx = \varrho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v}$ bilan quyidagini olamiz:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \varrho |\mathbf{v}|^2 + \varrho e \right) + \nabla \cdot \left(\varrho \mathbf{v} \left(\frac{1}{2} |\mathbf{v}|^2 + e \right) + \mathbf{T} \mathbf{v} + \mathbf{q} \right) = \varrho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \quad (17.70)$$

Biz (17.69)ni uzluksiz muhit uchun chiziqli impuls balansining makroskopik tenglamasi va (17.70)ni uzluksiz energiya saqlanish tamoyili bayoni sifatida tan olamiz. Ushbu tenglamalarda f birlik massa uchun jismdagi kuch sifatida qabul qilinadi. Agar muhit $\mathcal{B}$ t vaqt momentida hozirgi konfiguratsiyani egallasa $\Omega_t \subset \mathbb{R}^3$, (17.68) va (17.69) tananing umumiy massasi $\mathcal{M}(\mathcal{B})$ saqlanib qolishini va chiziqli impulsning o'zgarish tezligi $\mathcal{I}(\mathcal{B})$ tanaga ta'sir etuvchi umumiy kuch bilan muvozanatda ekanligini bildiradi, bu yerda:

$$\mathcal{M}(\mathcal{B}) = \int_{\Omega_t} \varrho \, dx \quad \mathcal{I}(\mathcal{B}) = \int_{\Omega_t} \varrho \mathbf{v} \, dx$$

Shuningdek, (17.70) energiyani saqlashni aniqlaydi:

$$E(\mathcal{B}) = \int_{\Omega_t} \left(\frac{1}{2} \varrho |\mathbf{v}|^2 + \varrho e \right) dx$$

bunda uning vaqt o'zgarish tezligi qizish quvvati va tezligi bilan muvozanatlashgan.

MASHQLAR

I QISM UCHUN MASHQLAR

Ushbu kitobni o'qish uchun bilishingiz kerak bo'lgan ma'lumotlar.

Kitobni tushunish uchun quyidagi asosiy tushunchalarni bilishingiz kerak:

- Chiziqli algebra va matritsa nazariyasi
- Vektor hisoblash
- Tenzor hisobi
- Haqiqiy sonlar nazariyasi

Tenzor va simvol hisobiga qisqacha sharh

$e_i, i = 1, 2, 3$, ortonormal bazis bo'lsin, ya'ni:

$$e_i \cdot e_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{agar } i = j, \\ 0, & \text{agar } i \neq j. \end{cases}$$

a vektor: $a = a_i e_i$ (takrorlanuvchi indekslar yig'iladi). Ikkita vektor teng bo'ladi (ya'ni, $a = b$), agar $a_i = b_i, i = 1, 2, 3$.

Vektor ko'paytmasi: $a \times b = \varepsilon_{ijk} a_i b_j e_k$

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{agar } ijk \text{ juft permutatsiya,} \\ -1, & \text{agar } ijk \text{ toq permutatsiya,} \\ 0, & \text{agar } ijk \text{ permutatsiya bo'lmasa.} \end{cases}$$

Nabla operatori: $\nabla = e_k \frac{\partial}{\partial x_k}$

a vektorning divergensiyasi ($\operatorname{div} v$ yoki $\nabla \cdot v$ deb belgilanadi):

$$\nabla \cdot v = e_k \frac{\partial}{\partial x_k} v_j e_j = \frac{\partial v_j}{\partial x_k} e_k \cdot e_j = \frac{\partial v_j}{\partial x_k} \delta_{kj} = \frac{\partial v_k}{\partial x_k} (= v_{k,k} \text{ or } \partial_k v_k)$$

Vektor uyurmasi ($\operatorname{rot} v$ yoki $\nabla \times v$ deb belgilanadi):

$$\nabla \times v = \varepsilon_{ijk} \frac{\partial}{\partial x_i} v_j e_k = \varepsilon_{ijk} v_{j,i} e_k = \varepsilon_{ijk} (\partial_i v_j) e_k$$

Quyidagi tengliklar amal qiladi:

$$\delta_{ii} = 3,$$

$$\delta_{ij}\delta_{jk} = \delta_{ik},$$

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ijm} = 2\delta_{km},$$

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{imn} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km},$$

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ijk} = 6.$$

Oddiy identifikatsiyalar:

$$1. (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} = \frac{1}{2}\nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) - \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{v}).$$

$$2. \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{w}) = (\mathbf{w} \cdot \nabla)\mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot (\nabla \times \mathbf{w}) - \mathbf{w} \cdot (\nabla \times \mathbf{v}) - (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{w}.$$

Tenzorlar:

$\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ = tenzor $\mathbf{e}_i$ va $\mathbf{e}_j$ mahsuloti

$$\mathbf{A} = \text{ikkinchi tartibli tenzor} = \left(\sum_{i,j} \right) A_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j = A_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j,$$

$$(\mathbf{A}_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{A} \mathbf{e}_j)$$

$$\mathbf{B} = \text{uchinchi tartibli tenzor} = B_{ijk} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k.$$

1.1-mashqlar to'plami

Kronecker delta va permutatsiya belgisi

1. Kronecker delta va permutatsiya belgisi tengliklarini isbotlang:

$$\delta_{ii} = 3,$$

$$\delta_{ij}\delta_{jk} = \delta_{ik},$$

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ijm} = 2\delta_{km},$$

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{imn} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km},$$

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ijk} = 6.$$

Vektorlar va tenzor hisobi (tenzor hisobidan foydalanganda)

2. Quyidagini isbotlang:

$$(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} = \frac{1}{2}\nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) - \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{v}).$$

3. Quyidagini isbotlang:

$$\nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{w}) = (\mathbf{w} \cdot \nabla)\mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot (\nabla \times \mathbf{w}) - \mathbf{w} \cdot (\nabla \times \mathbf{v}) - (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{w}$$

Vektorlar va ichki ko'paytma fazolari (bu mavzular bo'yicha Oden va Demkowiczlarning standart matnlardan foydalanish mumkin [6])

4. Quyidagilarning to'liq ta'riflari va original misolini keltiring:

(a) haqiqiy vektor fazosi;

(b) ichki ko'paytma fazosi;

(c) vektor fazosi U dan vektor fazosi V ga chiziqli o'zgarish.

Tenzorlar

5. V ichki ko'paytma fazosi bo'lsin. Tenzor – bu V dan V ga chiziqli o'zgarish. Agar T tenzor bo'lsa, $Tv = Tv$ – V ichida v vektorining tasvirini bildiradi:

$$Tv = T(v) \in V$$

V ning barcha chiziqli o'zgarishlari sinfi $L(V, V)$ o'z-o'zidan vektorlar qo'shilishi va skalyar ko'paytirish bilan ham vektor fazo bo'lishini ko'rsating, bunda quyidagilar o'rinni:

$$S, T \in L(V, V):$$

$$S + T = R \Leftrightarrow Rv = Sv + Tv,$$

$$\alpha S = R \Leftrightarrow Rv = \alpha(Sv),$$

$$\forall v \in V, \forall \alpha \in \mathbb{R}$$

$$(0 \in L(V, V)): 0v = 0 \in V).$$

Tenzor ko'paytmasi

6. Ikkita vektor a va b ning tenzor mahsuloti $a \otimes b$ bilan belgilanadi, bu har bir c vektoriga $(b \cdot c) a$ vektorini tayinlaydi; ya'ni:

$$(a \otimes b) c = (b \cdot c) a$$

6.1. Ko'rsatingki, $a \otimes b$ tenzordir va

$$(a \otimes b)^T = b \otimes a.$$

$$(a \otimes b)(c \otimes d) = (b \cdot c)(a \otimes d).$$

6.2. Agar $\{e_1, e_2, e_3\}$ ortonormal bazis bo'lsa ($e_i \cdot e_j = \delta_{ij}$, $1 \leq i, j \leq 3$, $\|e_i\|^2 = e_i \cdot e_i = 1$), quyidagining o'rinni ekanligini ko'rsating:

$$(e_i \otimes e_i)(e_j \otimes e_j) = \begin{cases} 0, & \text{if } i \neq j \\ e_i \otimes e_i, & \text{if } i = j \end{cases} = "\delta_{ij} e_i \otimes e_j".$$

6.3. Har qanday tenzor A va ortonormal bazis uchun $\{e_1, e_2, e_3\}$,

$$A = \sum_{i,j} A_{ij} e_i \otimes e_j,$$

bu yerda

$$A_{ij} = e_i \cdot A e_j$$

Matritsa $[A_{ij}]$ – bu A ning $V(\mathbb{R}^3)$ uchun maxsus bazis tanlashdagi tavsiflovchi matritsa. Agar A va B ikkita («ikkinchi tartibli») tenzor bo'lsa va $[A_{ij}]$, $[B_{ij}]$ ularning $\{e_1, e_2, e_3\}$ asosi uchun matritsalar bo'lsa, quyidagi matritsa algebrasi qoidalarini aniqlang (konstruksiya qiling):

$$(a) A + B = C \Rightarrow [A_{ij}] + [B_{ij}] = [?];$$

$$(b) AB = C (AB = A \circ B);$$

$$(c) A0 = C (C = ?) (0 = L(V, V) \text{ ning nol elementi});$$

$$(d) AC = I \text{ (I identifikatsiya tenzori: } AI = IA = A \text{ va } C = A^{-1});$$

(e) $AT = C (C = ?)$ (A^T – bu A ning transpozitsiyasi: bu yagona tenzor shundayki, $A v u = v A^T u$, $\mathbb{R}^3$ dagi vektor ichki ko'paytma).

1. Ikki vektor $u, v \in V = \mathbb{R}^3$ ning haqiqiy ichki ko'paytmasi («nuqta ko'paytmasi») $u \cdot v$ deb belgilanadi. Bu V ustida simmetrik, musbat aniqlangan, bilinear forma. Agar $u = \sum_{i=1}^3 u_i e_i$ va $v = \sum_{i=1}^3 v_i e_i$ bo'lsa, ortonormal asos uchun $\{e_i\}$, unda $u \cdot v = \sum_{i=1}^3 u_i v_i$. Bundan tashqari, u (yoki v) ning (Evklid) normasi

$$2. \|u\| = \sqrt{u \cdot u} \quad (\|v\| = \sqrt{v \cdot v}).$$

Ikkinchi tartibli tenzorlarning $L(V, V)$ fazosi tabiiy ravishda ichki ko'paytma bilan jihozlangan bo'lishi mumkin va shu sababli norma ham mavjud. Konstruksiya quyidagicha:

i) Ikki vektor u va v ning tenzor mahsulotining izi (trace) bu chiziqli amal:

$$\text{tr}(u \otimes v) \stackrel{\text{def}}{=} u \cdot v.$$

Shuningdek, $A \in L(V, V)$ tenzorining izi quyidagicha aniqlanadi:

$$\text{tr} A = \text{tr} \left(\sum_{ij} A_{ij} e_i \otimes e_j \right) = \sum_{ij} A_{ij} \text{tr}(e_i \otimes e_j) = \sum_{ij} A_{ij} \delta_{ij} = \sum_i A_{ii}.$$

ii) Ikki tenzor $A, B \in L(V, V)$ kompozitsiyasining izi quyidagicha aniqlanadi:

$$\text{tr}(AB) = \sum_{ij} A_{ij} B_{ji}$$

Belgilash kiritamiz:

$$A : B = \text{tr}(A^T B) = \sum_{ij} A_{ij} B_{ij}$$

- (a) $\mathbf{A} : \mathbf{B}$ («:») amali $L(V, V)$ ning ichki ko'paytmasini aniqlashini ko'rsating.
 (b) $\mathbf{A} \in L(V, V)$ uchun tegishli normani $\|\mathbf{A}\|$ aniqlang.
 (c) Ko'rsating:

$$\text{tr} \mathbf{A} = \text{tr} \mathbf{A}^T$$

- (d) Ko'rsatingki (trivial ravishda):

$\mathbf{I} : \mathbf{A} = \text{tr} \mathbf{A} (\mathbf{I} - \text{identifikatsiya tenzori}),$

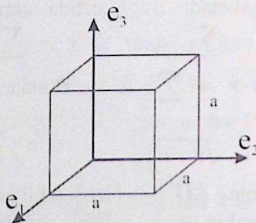
$$(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}) : (\mathbf{q} \otimes \mathbf{p}) = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{q})(\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}).$$

8. φ , $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$ va $\mathbf{A}$ uzuliksiz maydonlar bo'lsin; φ – skalyar, $\mathbf{u}$ va $\mathbf{v}$ – vektorlar, $\mathbf{A}$ – tenzor. Quyidagilarni ko'rsating:

$$\nabla(\varphi \mathbf{v}) = \varphi \nabla \mathbf{v} + \mathbf{v} \otimes \nabla \varphi,$$

$$\text{div}(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}) = \mathbf{u} \text{ div} \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{v},$$

$$\mathbf{A} \nabla \varphi = \text{div}(\varphi \mathbf{A}) - \varphi \text{div} \mathbf{A}.$$



E.1-rasm: Kub $\Omega_0 = (0, a^3)$

1.2-mashqlar to'plami

Tutash muhit kinematikasi

1. Deformatsiyalanuvchi jism $\mathcal{B}$ ning ma'lumot konfiguratsiyasi, fazoviy va material koordinatalari boshida, E.1-rasmda ko'rsatilganidek, $\Omega_0 = (0, a^3)$ kubi sifatida berilgan. Jismning harakati φ quyidagicha aniqlanadi:

$$\varphi(X) = \sum_{i=1}^3 \varphi_i(X) \mathbf{e}_i$$

bu yerda:

$$\varphi_1(X) = X_1 + \frac{\Delta}{2} \left(\frac{X_2}{a} \right)^2$$

$$\varphi_2(X) = X_2$$

$$\varphi_3(X) = X_3$$

Bu yerda Δ haqiqiy son (t vaqtga bog'liq parametr bo'lishi mumkin). Ushbu harakat uchun:

(a) Deformatsiyalangan shaklni chizing (ya'ni, $\Delta = a$ uchun $X_1 - X_2$ tekislikdagi joriy konfiguratsiyani chizing).

So'ngra quyidagilarni hisoblang:

(b) siljish maydoni u ,

(c) deformatsiya gradiyenti F ,

(d) deformatsiya tenzori C ,

(e) Green-St.Venan deformatsiya tenzori E ,

(f) kengayishlar e_i , $i = 1, 2, 3$,

(g) $\sin \gamma_{12}$, bu yerda γ_{12} $X_1 - X_2$ tekisligidagi siljish.

Determinantlar

2. $A \in L(V, V)$ bo'lsin, $\{e_i\}_{i=1}^3$ bazisga nisbatan matritsaga ega bo'lgan ikkinchi tartibli tenzor (ya'ni, $A_{ij} = A$ ning $e_i \otimes e_j$ ga nisbatan komponentlari). $n = 3$ uchun $[A_{ij}]$ determinanti quyidagicha aniqlanadi:

$$\det[A_{ij}] = \frac{1}{6} \sum_{\substack{ijk \\ rst}} \epsilon_{ijk} \epsilon_{rst} A_{ir} A_{js} A_{kt}$$

bu yerda

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{agar } \{i, j, k\} \text{ juft permutatsiya bo'lsa,} \\ -1 & \text{agar } \{i, j, k\} \text{ toq permutatsiya bo'lsa,} \\ 0 & \text{agar } \{i, j, k\} \text{ permutatsiya bo'lmasa} \end{cases}$$

(ya'ni kamida ikkita indeks teng bo'lsa)

Tenzor A ning determinanti A_{ij} uning matritsa komponentlarining determinanti sifatida aniqlanadi:

$$\det A = \det[A_{ij}]$$

Ushbu ta'rif $\{e_i\}$ bazis tanloviga bog'liq emas (ya'ni, $\det A$ — asos o'zgarganda o'zgarmaydigan A xossasidir). Ko'rinadiki:

(a) $\det(AB) = (\det A)(\det B)$ ($n=3$ uchun yetarli).

Maslahat:

$$\det A = \frac{1}{6} \epsilon_{klm} \epsilon_{abc} A_{ka} A_{lb} A_{mc}$$

$$\det \mathbf{B} = \frac{1}{6} \varepsilon_{klm} \varepsilon_{def} B_{kd} B_{le} B_{mf}.$$

Bundan tashqari,

$$\varepsilon_{klm} \det \mathbf{A} = \varepsilon_{abc} A_{ka} A_{lb} A_{mc},$$

$$\varepsilon_{klm} \det \mathbf{B} = \varepsilon_{def} B_{kd} B_{le} B_{mf}$$

(masalan: $\det \mathbf{A} = \varepsilon_{abc} A_{1a} A_{2b} A_{3c}$).

Shuni ham unutmangki, $\varepsilon_{klm} \varepsilon_{klm} = 6$

$$(b) \det \mathbf{A}^T = \det \mathbf{A}.$$

Kofaktor va invers

3. $\mathbf{A} \in L(V, V)$ va A_{ij} $\mathbf{A}$ ning $\{e_i\}$ bazisiga nisbatan komponentlari bo'lsa, $i = 1, 2, \dots, n$, $A_{ij}^1 [A_{ij}]$ matritsasining i qatlami va j ustunini o'chirib olingan tartib $(n - 1)$ matritsaning elementlari bo'lsin.

$$d_{ij} = (-1)^{i+j} \det[A_{ij}^1]$$

skalyar bo'lib, $[A_{ij}]$ ning (i, j) – kofaktori deb ataladi va kofaktorlar matritsasi $\text{Cof } \mathbf{A} = [d_{ij}]$ $\mathbf{A}$ ning kofaktor matritsasi deb ataladi.

(a) Ko'rsating:

$$\mathbf{A}(\text{Cof } \mathbf{A})^T = (\det \mathbf{A})\mathbf{I}$$

(buni $n = 3$ uchun qurish orqali ko'rsatish kifoya qiladi).

(b) Ko'rsating (osonlik bilan), agar $\mathbf{A}$ teskari bo'lsa,

$$\mathbf{A}^{-1} = (\det \mathbf{A})^{-1} (\text{Cof } \mathbf{A})^T.$$

(c) $n = 3$ uchun ko'rsating:

$$(\text{Cof } \mathbf{A})_{ki} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{ijk \\ rst}} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{rst} A_{ir} A_{js}, \quad 1 \leq k, i \leq 3.$$

4. (1.25)ni quyidagi faktlardan foydalangan holda keltiring:

$$\det \mathbf{F} = \frac{1}{6} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{rst} F_{ir} F_{js} F_{kt},$$

$$(\text{Cof } \mathbf{F})_{ir} = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{rst} F_{js} F_{kt}.$$

Quyidagicha davom eting:

(a) Avval:

$$\overline{\det \mathbf{F}} = \text{Cof } \mathbf{F} : \dot{\mathbf{F}}$$

ekanligini ko'rsating,

(b) Keyin, $\dot{\mathbf{F}} = \mathbf{L}\mathbf{F}$ ekanligini ko'rsating va shu bilan $\overline{\det \mathbf{F}} = (\text{Cof } \mathbf{F})^T \mathbf{F} : \mathbf{L} = (\det \mathbf{F}) \mathbf{I} : \mathbf{L}$ bo'lib, bu (1.25)ni anglatadi.

Ortogonal Almashtirish

5. agar u $\mathbf{Q}\mathbf{u} \cdot \mathbf{Q}\mathbf{v} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$ ko'rinishidagi ichki ko'paytmalarni saqlasa, A tenzor $\mathbf{Q} \in L(V, V)$ ortogonal bo'ladi, ya'ni $\forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in V (\approx \mathbb{R}^3)$

$$\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T = \mathbf{Q}^T\mathbf{Q} = \mathbf{I}, \text{ ekvivalent ravishda } \mathbf{Q} = \mathbf{Q}^{-1}.$$

$\mathbf{Q}$ ning ortogonal bo'lishi uchun zarur va yetarli sharti ekanligini ko'rsating.

6. det A A ning invariant ekanligini tasdiqlang: Agar

$$\mathbf{A} = \sum_{i,j} A_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j = \sum_{i,j} \bar{A}_{ij} \bar{\mathbf{e}}_i \otimes \bar{\mathbf{e}}_j$$

bu yerda $\bar{\mathbf{e}}_i = \mathbf{Q}\mathbf{e}_i$, $i = 1, 2, 3$, $\mathbf{Q}$ = ortogonal tenzor bo'lsa, u holda

$$\det[A_{ij}] = \det[\bar{A}_{ij}]$$

Vektor va tenzor hisobga doir misollar

7. U normallangan fazo bo'lsin va $f : U \rightarrow R$ U dan R ga akslantiruvchi funksiya bo'lsin (bunday funksiya U dagi funksional deb ataladi). $U' = L(U, R)$ fazo U ning duali deb ataladi. Agar $f \mathbf{u} \in U$ da, agar mavjud bo'lsa, differensiallanuvchi bo'lishi uchun barcha $\mathbf{v} \in U$ uchun chiziqli funksiya $\mathbf{g} \in U'$ $\lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{1}{\theta} (f(\mathbf{u} + \theta \mathbf{v}) - f(\mathbf{u})) = \langle \mathbf{g}, \mathbf{v} \rangle$, shartni bajarishi zarur.

Bu yerda, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ «duallik juftlashuvi»ni bildiradi, ya'ni son $\langle \mathbf{g}, \mathbf{v} \rangle \in \mathbb{R}$ g va v ga chiziqli bog'liq. Xususan, $\mathbf{g}(\mathbf{v}) \equiv \langle \mathbf{g}, \mathbf{v} \rangle$. Biz yozamiz:

$$\mathbf{g} = Df(\mathbf{u}),$$

va $Df(\mathbf{u})$ ni f da u da hosila (yoki variatsion hosila) deb ataymiz. φ ni S o'zgaruvchan tenzorlarning to'plamida aniqlangan skalyar qiymatli funksiya bo'lsin $\mathbf{A} \in L(U, U)$ (ya'ni $\varphi : S \rightarrow \mathbb{R}$) quyidagicha aniqlanadi:

$$\varphi(\mathbf{A}) = \det \mathbf{A}.$$

Ko'rsating ($3D$ holatini ko'rib chiqish kifoya):

$$\forall \mathbf{V} \in L(U, U), D\varphi(\mathbf{A}) : \mathbf{V} = (\det \mathbf{A}) \mathbf{V}^T : \mathbf{A}^{-1}.$$

Maslahat: $\det(\mathbf{A} + \theta \mathbf{V}) = \det((\mathbf{I} + \theta \mathbf{V} \mathbf{A}^{-1}) \mathbf{A}) = \det \mathbf{A} \det(\mathbf{I} + \theta \mathbf{V} \mathbf{A}^{-1})$,

va

$$\det(\mathbf{I} + \theta \mathbf{B}) = 1 + \theta \operatorname{tr} \mathbf{B} + O(\theta^2).$$

ni e'tiborga oling.

8. Ω ni $\mathbb{R}^3$ da ochiq to'plam va φ ni Ω dan $\mathbb{R}$ ga uzluksiz funksiya bo'lsin. Quyidagi xususiyatga ega vektor $\mathbf{g}$

$$D\varphi(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v} = \mathbf{g}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v} \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3,$$

$\mathbf{v}$ gradiyenti $\mathbf{x} \in \Omega$ nuqtada. Biz klassik yozuvdan foydalanamiz:

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \nabla \varphi(\mathbf{x}).$$

Shuni ko'rsatingki:

$$\nabla(\varphi \mathbf{v}) = \varphi \nabla \mathbf{v} + \mathbf{v} \otimes \nabla \varphi,$$

$$\operatorname{div}(\varphi \mathbf{v}) = \varphi \operatorname{div} \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \varphi,$$

$$\operatorname{div}(\mathbf{v} \otimes \mathbf{w}) = \mathbf{v} \operatorname{div} \mathbf{w} + (\nabla \mathbf{v}) \mathbf{w}$$

9. φ va $\mathbf{u}$ C^2 skalyar va vektor maydonlari bo'lsin. Shuni ko'rsatingki:

(a) $\operatorname{curl} \nabla \varphi = \mathbf{0}$;

(b) $\operatorname{div} \operatorname{rot} \mathbf{v} = 0$.

10. Ω bo'lsin ochiq, ulangan, silliq domenga ega $\mathbb{R}^3$ da chegarasi $\partial\Omega$ bo'lgan. $\mathbf{n}$ bo'lsin $\partial\Omega$ ga tashqi normal birlik vektori. Grinning (divergensiya) teoremasini eslatib o'ting:

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{v} \, dx = \int_{\partial\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dA,$$

vektor maydoni $\mathbf{v}$ uchun

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{A} \, dx = \int_{\partial\Omega} \mathbf{A} \mathbf{n} \, dA.$$

ekanligini ko'rsating.

Ishora: Ixtiyoriy vektor $\mathbf{u}$ uchun:

$$\mathbf{u} \cdot \int_{\partial\Omega} \mathbf{A} \mathbf{n} \, dA = \int_{\partial\Omega} (\mathbf{A}^T \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \, dA.$$

11. Agar (x, y, z) Dekart koordinatalar tizimi bo'lsa, kubning burchagida joylashgan $\Omega_0 = (0, 1)^3$ va o'qlar kub qirralari bo'ylab yo'naltirilgan bo'lsa, hisoblang:

$$\int_{\partial\Omega_0} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dA_0,$$

bu yerda $\partial\Omega_0$ Ω_0 ning tashqi yuzasi, $\mathbf{n}$ tashqi normal birlik vektori va $\mathbf{v}$ maydon:

$\mathbf{v} = x\mathbf{e}_1 + y\mathbf{e}_2 + 3z\mathbf{e}_3$, $\text{div } \mathbf{v} = \text{tr}(\nabla \mathbf{v}) = \sum_i \frac{\partial v_i}{\partial x_i}$ divergensiya, agar $\mathbf{v} = \sum_i v_i \mathbf{e}_i$ bo'lsa, $\text{div } \mathbf{A}$ – shunday noyob vektor maydonki, barcha $\mathbf{a}$ vektorlar uchun: $\text{div } \mathbf{A} \cdot \mathbf{a} = \text{div}(\mathbf{A}^T \mathbf{a})$

1.3-mashqlar to'plami

1. Kub $(0, a)^3$ jismning «oddiy kesish»ga duch kelgan Ω_0 boshlang'ich konfiguratsiyasidir:

$u_1 = \frac{\Delta}{a} X_2$, $u_2 = u_3 = 0$, $\Delta = o'zgarimas$. $\partial\Omega_0$ ga tashqi normal birlik $\mathbf{n}_0$, $\mathbf{n}_0$ vektori chegaraviy nuqtada $(a, a/2, a/2)$ $\partial\Omega$ dagi tashqi birlik normal $\mathbf{n}$ ga proyeksiyalanadi. $\mathbf{n}$ ni hisoblang va deformatsiyalangan shaklni chizing.

2. Yuqoridagi 1-masalada Δ vaqt t ning funksiyasi ekan deb taxmin qiling. Hisoblang

(a) tezlik va tezlanish maydonlarining Lagrangian tavsifi,

(b) ushbu maydonlarning Eyler tavsifi,

(c) $\mathbf{L} = \text{grad } v$.

3. Quydagi siljish maydoni material jism uchun ko'rib chiqiladi:

$$u_1 = 0, \quad u_2 = 2X_1^2, \quad u_3 = 4X_2^2.$$

(a) Bu deformatsiya tutash deformatsiyalanadigan muhitda mumkin ekanligini ko'rsating.

(b) AB va AC ikkita material chiziqlari, boshlang'ich konfiguratsiyada $(1, 1, 1)$ koordinatalarga ega nuqta A nuqtadan o'tadi, shunda $\overline{AB} = 0.5\mathbf{e}_2$ va $\overline{AC} = 2.0\mathbf{e}_3$ (ya'ni, $\overline{AB}$ uzunligi 0,5 va dastlab X_2 o'qi bo'ylab yo'naltirilgan va sh.o.). Ushbu vektorlarning joriy konfiguratsiyada qanday deformatsiyalanishini aniqlang.

(c) Deformatsiya tufayli AB va AC orasidagi burchakning o'zgarishini aniqlang.

(d) $(1, 1, 1)$ da $\mathbf{e}_2$ cho'zilish miqdorini aniqlang.

4. (a) Yuqoridagi 3-deformatsiya uchun asosiy cho'zilishlarni va ularning yo'nalishlarini $(1, 1, 0)$ nuqtada toping.

(b) Material tekislik P ning boshlang'ich konfiguratsiyada $2(1, 0, 0)$ va $3(0, 1, 1)$ vektorlar bilan belgilangan deb olingan, ushbu sirtning joriy konfiguratsiyadagi normal birlik vektorini toping.

5. Faraz qilingki, tananing boshlang'ich konfiguratsiyasi to'g'ri aylana silindridir:

$$\overline{\Omega_0} = \{(r, \theta, z) = \left(r = (X_1^2 + X_2^2)^{1/2}, \theta = \arctan \left(\frac{X_2}{X_1} \right), z = X_3 \right) : 0 \leq r \leq r_0, 0 \leq \theta \leq 2\pi, 0 \leq z \leq L\}$$

Silindr deformatsiyaga uchradi:

$$x_1 = X_1 \cos(\phi X_3) - X_2 \sin(\phi X_3),$$

$$x_2 = X_1 \sin(\phi X_3) + X_2 \cos(\phi X_3),$$

$$x_3 = X_3,$$

bu yerda ϕ har bir birlik uzunlikka burilish burchagi hisoblanadi. Bu jismning burilish deformatsiyasini ifodalaydi (chunki $x_1^2 + x_2^2 = X_1^2 + X_2^2$).

(a) $\phi L = \pi / 2$ holati uchun deformatsiyalangan jismni chizing.

(b) Deformatsiya gradiyentini $\mathbf{F}$ ni hisoblang.

(c) $\mathbf{C}$ ni $\mathbf{X} = (r_0 / 2, r_0 / 2, L / 2)$ nuqtada uchun $\phi = \pi / (2L)$ hisoblang.

6. λ_E agar Grin–St.Venan cho‘zilish tenzori $\mathbf{E}$ ning xos qiymati bo‘lsa va $\mathbf{n}_E$ mos keluvchi xos vektori bo‘lsa, unda $1 + 2\lambda_E$ $\mathbf{C}$ ning xos qiymati va $\mathbf{n}_E$ ham $\mathbf{C}$ ning xos vektori ekanligini ko‘rsating, shunday qilib, $\mathbf{E}$ va $\mathbf{C}$ bir xil asosiy yo‘nalishlarga ega.

7. $W_V = \frac{1}{2} \omega \times v$ ekanligini ko‘rsating.

8. Faraz qilingki, material nuqtada $\mathbf{X} \in \Omega_0$, Grin–St.Venan cho‘zilish tenzori quyidagicha berilgan:

$$\mathbf{E} = \sum_{1 \leq i, j \leq 3} E_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j.$$

bu yerda $\{\mathbf{e}_i\} \subset \mathbb{R}^3$ da ortonormal baza va

$$[E_{ij}] = \begin{bmatrix} 3 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Aniqlang:

(a) $\mathbf{E}$ ning asosiy yo‘nalishlari,

(b) $\mathbf{E}$ ning asosiy qiymatlari,

(c) $\mathbf{Q}$ transformatsiyasini, bu $\{\mathbf{e}_i\}$ ni $\mathbf{E}$ ning asosiy yo‘nalishlarini belgilovchi vektorlarga xaritalaydi,

(d) $\mathbf{C}$ ning asosiy invariantlarini $\mathbf{C} = 2\mathbf{E} + \mathbf{I}$.

9. Eslatib o‘tamizki, $\mathbf{C}$ ning invariantlari har qanday haqiqiy qiymatli funktsiya $\mu(\mathbf{C})$ bo‘lib, u shundayki $\mu(\mathbf{C}) = \mu(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{A})$ barcha invert matritsalar $\mathbf{A}$ uchun. $\text{tr } \mathbf{C}$, $\text{tr Cof } \mathbf{C}$ va $\det \mathbf{C}$ ning invariantlari ekanligini ko‘rsating.

1.4-mashqlar to'plami

1. Geometrik masalalarni soddalashtirish uchun, Koshi teoremasining ikki o'ldiruvchi holat («tekis kuchlanish») uchun kuchlanish tenzorining mavjudligini isbotlang. Shunday qilib, $\sigma(n) = \sigma_1(n)e_1 + \sigma_2(n)e_2$ uchun $\exists T$ da $\sigma(n) = Tn$ bo'lishi mumkinligini ko'rsating.

2. B jismda Koshi kuchlanish tenzori quyidagicha:

$$T(x, t) = T_{ij}(x, t)e_i \otimes e_j,$$

bu yerda

$$T_{ij}(x, t) = e^{10-10t} \begin{bmatrix} 10000x_1^2 - 7000x_1x_2 & 7000x_1x_3 & 2000x_3^2 \\ 7000x_1x_3 & 3000x_2^2 & 100x_1 \\ 2000x_3^2 & 100x_1 & 1000x_3^2 \end{bmatrix}$$

$x = (1, 1, 1)$ nuqtada va $t = 1$ vaqtida $\sigma(n)$ kuchlanish vektorini yo'nalishda $n = n_i e_i$, $n_i = 1/\sqrt{3}$ $i = 1, 2, 3$ hisoblang.

(a) $t = 1$ da, tekislik yuzasidagi umumiy kontakt kuchi qancha $x_1 = 1$, $0 \leq x_2 \leq 1$, $0 \leq x_3 \leq 1$?

3. $T = T(x, t)$ ni $x \in \Omega$ nuqtadagi t vaqtidagi Koshi kuchlanish deb olaylik. Agar $\hat{n}$ yo'nalish (birlik vektor) bo'lsa, shundayki:

$$T\hat{n} = \sigma\hat{n} \quad (\hat{n}^T \hat{n} = 1),$$

unda (C ning asosiy qiymatlari va yo'nalishlari bilan analogiyada) σ asosiy kuchlanish va $\hat{n}$ T ning asosiy yo'nalishi (T ning xos qiymatlari va bazis vektorlari) hisoblanadi.

Davom etamiz, Γ bo'lsin x nuqtadan o'tgan va normal birlik n ga ega tekislik. x da normal kuchlanish σ_n quyidagicha:

$$\sigma_n = (n \cdot Tn)n$$

va qirg'ich kuchlanishi quyidagicha:

$$\sigma_t = Tn - \sigma_n = Tn - (n \cdot Tn)n$$

Agar n T ning asosiy yo'nalishi bo'lsa, unda $\sigma_t = 0$ ekanligini ko'rsating.

4. Nyutonning ta'sir va reaksiya qonuni har bir $x \in \Omega$, va har bir t uchun quyidagini tasdiqlaydi:

$$\sigma(n, x, t) = -\sigma(-n, x, t).$$

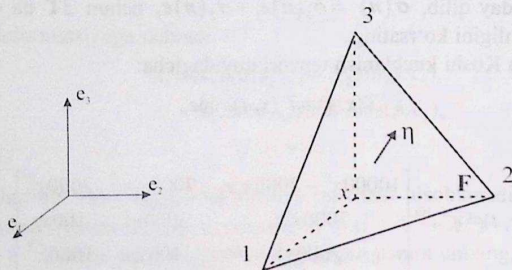
(a) Ushbu qonunni Koshi teoremasidagi kabi farazlar asosida isbotlang.

Eslatma:

i. E.2-rasmdagidek tetraedral elementni qurish.

ii. Tetraedral elementdagi umumiy kuchlarni hisoblang:

$$\frac{1}{A_\delta} \int_{A_\delta} \sigma(m) \, dA + \frac{1}{A_\delta} \int_{A_\delta} \sigma(-e_i) \, dA + \text{tananing kuchi } \mathcal{O}(d^3)$$



E.2-rasm. Tetraedral element

iii. Chegarani $d \rightarrow 0$ deb oling; berilgan $\sigma(n, x, t) = -\sum_{i=1}^3 (m \cdot e_i) \sigma(-e_i, x, t)$.

iv. $m = e_1$ deb oling, keyin $m = e_2$, keyin $m = e_3$ ni oling va $\sigma(e_i, x) = -\sigma(-e_i, x)$ (istalgan t uchun) ekanligini isbotlang. Keyin bu tasdiq kelib chiqadi.

(b) Koshi teoremasini to'liq isbotlang: $\mathbf{T}(x) = \mathbf{T}(x)^T$ ekanligini ko'rsating. (Bu isbot (1) burchak momentini muvozanatlash prinsipidan va (2) harakat tenglamalaridan foydalanadi ($\text{div} \mathbf{T} + \mathbf{f} = \rho d\mathbf{v} / dt$)).

1.5-mashqlar to'plami

1. Γ ni referens konfiguratsiya bilan bog'liq material sirt deb olaylik: $\Gamma \subset \partial\Omega_t$. $\mathbf{g}$ ni $\Gamma(g = g(x, m), x \in \Gamma)$ da har bir birlik yuzaga ta'sir etuvchi kuch deb oling. Γ da har bir $x \in \Gamma$ uchun «traksiya» chegara sharti $\mathbf{T}\mathbf{n} = \mathbf{g}$ ko'rsatish kerak:

$$\varphi^{-1}(\Gamma) \text{ da } \mathbf{F}\mathbf{S}\mathbf{n}_0 = \mathbf{g}_0,$$

bu yerda $\mathbf{n}_0$ $\Gamma_0(\Gamma = \varphi(\Gamma_0))$ ga tashqi normal birlik vektor va

$$g_0(X, t) = \det F(X) \parallel F^{-T}(X)\mathbf{n}_0 \parallel g(x).$$

$\mathbb{R}^3$ mintaqada suyuqlik oqimining Eyler tavsifini ko'rib chiqing. Oqim uchlik $(v, \varrho, \mathbf{T}) = (\text{tezlik maydon, zichlik maydoni, Koshi kuchlanish maydoni})$ bilan tavsiflanadi. Agar tezlik skalyar maydonning gradiyenti φ sifatida olinadigan bo'lsa, oqim potensial deb ataladi.

$$\mathbf{v} = \text{grad} \varphi.$$

Suyuqlikdagi kuch maydoni konservativ deb ataladi, agar shunday potensial U mavjud bo'lsa:

$$\mathbf{f} = -\rho \text{grad} U.$$

$\mathbf{T}$ kuchlanish quyidagi shaklda bo'lgan maxsus holat:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I},$$

bu yerda p skalyar maydon va $\mathbf{I}$ birlik tenzor, bosim maydoni deb ataladi (p = suyuqlik bosimi yoki «gidrostatik» bosim).

(a) Potensial oqim uchun, bosim maydoni $\mathbf{T} = -p\mathbf{I}$ va konservativ kuchlar uchun, moment tenglamalari quyidagilarni talab qiladi:

$$\text{grad} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + U \right) + \frac{1}{\rho} \text{grad} p = 0.$$

Bu potensial oqim uchun Bernulli tenglamasi.

Eslatma: ko'rsating:

$$1) \text{div} \mathbf{T} = -\text{grad} p$$

$$2) \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{1}{2} \text{grad} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}$$

(b) Agar harakat ustivor bo'lsa (ya'ni, $\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = 0$, ($\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ t ga nisbatan

o'zgarmas)) va $\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} = 0$ bo'lsa, shuning uchun $\frac{\partial U}{\partial t} = 0$, unda (a) qismidagi tenglamalar quyidagicha kamayadi:

$$\mathbf{v} \cdot \text{grad} \left(\frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + U \right) + \frac{1}{\rho} \mathbf{v} \cdot \text{grad} p = 0$$

(diqqat qiling, $\mathbf{v} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \mathbf{v} \cdot \text{grad} \left(\frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \right)$).

3. $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{X}, t) - \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{X}, t) - \mathbf{X}$ ko'chish maydoni bo'lsin

Quyidagi kattalikni aniqlang:

$$\psi = \frac{1}{2} \int_{\Omega_0} \rho_0 \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} d\mathbf{X}$$

Ko'rsating (agar $\mathbf{f}_0 = 0$ bo'lsa):

$$\ddot{\psi} = \int_{\Omega_0} \rho_0 \dot{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} d\mathbf{X} - \int_{\Omega_0} \mathbf{P} : \nabla \mathbf{u} d\mathbf{X} + \int_{\partial\Omega_0} \mathbf{u} \cdot \mathbf{P} \mathbf{n}_0 dA_0$$

4. 1 cm diametrli va 1 cm uzunlikdagi silindrsimon rezina shlang (qarang: E.3-rasm) qattiq asosga yopishtirilgan. Keyin tashqi kuchlar tomonidan tortiladi, shunda yassi silindrsimon yuqori yuzasi $\tilde{A}_0 = \{(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \mathbf{X}_3) : \mathbf{X}_3 = 1,$

$(X_1^2 + X_2^2)^{\frac{1}{2}} \leq \frac{1}{2}$ tekis dumaloq yuzaga siqiladi, diametri 1/4 sm va normal $\mathbf{n} = \mathbf{e}_2$, $\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma}^*$ pozitsiyada ko'rsatilganidek. Faraz qilingki, $\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma}^*$ da kuchlanish vektori Γ ga bir xil va normal:

$$\sigma(\mathbf{n}, \mathbf{x}^*) = \sigma(\mathbf{e}_2, \mathbf{x}^*) = 1000 \mathbf{e}_2 \text{ kg/sm}^2, \quad \forall \mathbf{x}^* \in \Gamma$$

Faraz qilamiz, mos mos keluvchi $\mathbf{p}_0 = \mathbf{P}\mathbf{n}_0$ va Γ_0 ga normal, Γ_0 da tekis taqsimlangan.

(a) Γ_0 da Piola–Kirxgoff kuchlanish vektori $\mathbf{p}_0 = \mathbf{P}\mathbf{n}_0$ ni aniqlang.

(b) Cof $\mathbf{F}(X_1, X_2, 1)$ holat uchun bir mumkin bo'lgan tenzorni aniqlang.

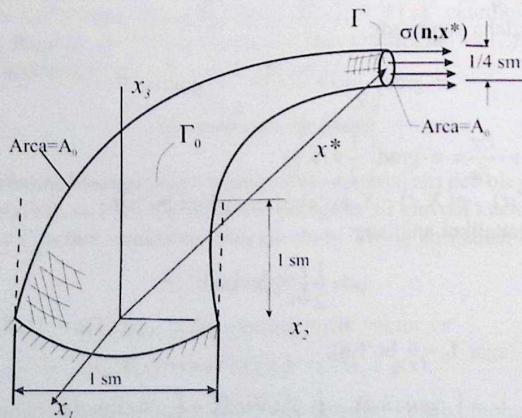
1.6-mashqlar to'plami

1. Quyidagi tashkiliy tenglamalar bilan tavsiflangan materialdan tuzilgan termoelastik qattiq jismning kichik deformatsiyalari va isishi haqida gapiraylik:

$$\text{Erkin energiya: } \varrho_0 \psi_0 = \frac{1}{2} \lambda (\text{tr } \mathbf{e})^2 + \mu \mathbf{e} : \mathbf{e} + c (\text{tr } \mathbf{e}) \theta + \left(\frac{c_0}{2} \right) \theta^2,$$

$$\text{Issiqlik oqimi: } \mathbf{q}_0 = k \nabla \theta,$$

Termoelastik mo'rt jismning kichik deformatsiyalari va issiqlik tarqalishini aniqlash masalasini ko'rib chiqing:



E.3-rasm. Rezina shlangning tasviriy chizmasi

bu yerda $\mathbf{e} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) =$ «infinitesimal» deformatsiya tenzori ($\approx \mathbf{E}$), $\mathbf{u} =$ siljish maydoni, $\theta =$ harorat maydoni, $\lambda, \mu, c, c_0, k =$ material doimiylari.

Rasmdagi B jism λ, μ, c, c_0, k – parametrlarga ega materialdan yasalgan va ichki kuchlar $\mathbf{f}_0$ va uning chegarasining bir qismi $\tilde{A}_x$ da sirt kontakt kuchlari $\mathbf{g}$ ta'siriga duchor bo'ladi, $\tilde{A}_x \subset \partial\Omega_0$. Chegarasining qolgan qismida, $\tilde{A}_u = \partial\Omega_0 \setminus \tilde{A}_x$, ko'chishlar nol deb belgilangan ($\tilde{A}_u$ da $\mathbf{u} = \mathbf{0}$). Jismning massa zichligi ρ_0 bo'lib, uning boshlang'ich konfiguratsiyasi $t=0$ vaqtida $\mathbf{u}(\tilde{\sigma}, 0) = \mathbf{u}_0(\tilde{\sigma}), \partial \mathbf{u}(\tilde{\sigma}, 0) / \partial t = \mathbf{v}_0(\tilde{\sigma}), \tilde{\sigma} \in \Omega_0$, bu yerda $\mathbf{u}_0$ va $\mathbf{v}_0$ berilgan funksiyalar. Chegaraning $\tilde{A}_q$ qismi qizdirilgan, natijada belgilangan issiqlik oqimi $h = \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}$ va komplementar chegara, $\tilde{A}_\theta = \partial\Omega_0 \setminus \tilde{A}_q$, $\theta(\tilde{\sigma}, t) = \tau(\tilde{\sigma}, t), \tilde{\sigma} \in \Gamma_\theta$ belgilangan haroratga bo'ysunadi (masalan, muzli suvga botirilgan). Ishlab chiqilgan ushbu fizik tizimning matematik modeli (qisman differensial tenglamalar, chegara va boshlang'ich shartlar to'plami) termoelastik mo'rt jismlarning dinamik, termomexanik holatini aniqlaydi.

II QISM UCHUN MASHQLAR

2.1-mashqlar to'plami

1. O'tgan mavsumda kollej musobaqasida o'nta futbol jamoasi quyidagi natijalarni ko'rsatdi: uchta jamoa 7 va 4 (7 g'alaba, 4 mag'lubiyat), to'rtta jamoa 8 va 3, ikkita jamoa 9 va 2 va bitta jamoa 11 va 0. (Albatta, ba'zilarida musobaqadan tashqari o'yinlar ham mavjud edi.) Konferensiyadagi jamoalarning umumiy soni:

$$N = \sum_{j=0}^{\infty} N(j) = 10,$$

bu yerda $N(j)$ j g'alabalari bilan jamoalar sonini ifodalaydi. Ushbu jamoalar to'plami namunalar to'plami Ω dir.

(a) Tasodifiy tanlangan jamoaning j g'alabalari borligi ehtimolini (bir qatorli qisqa dalil keltiring) aniqlang:

$$\mathbb{P}(j) = \frac{N(j)}{N}.$$

(b) Boshqa (aniq) xususiyatni ko'rsating:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \mathbb{P}(j) = 1 (= \mathbb{P}(\Omega)).$$

(c) To'liq hisob-kitob yordamida isbotlang:

$$\langle j \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} j \mathbb{P}(j).$$

$\langle j \rangle$ aynan ushbu tenglikning o'ng tomonidagi yig'indini ifodalaydi.)

(d) Dispersiya va standart farqlanishni hisoblang:

$$\sigma^2 = \langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2 = \sum_{j=0}^{\infty} (j - \langle j \rangle)^2 \mathbb{P}(j).$$

2. Bir o'lchovli Gaussian ehtimollik zichligi funksiyasi quyidagi ko'rinishda bo'ladi:

$$\rho(x) = C e^{-\frac{\alpha}{2}(x-x_0)^2},$$

bu yerda x_0 haqiqiy chiziqdagi nuqta va C va α doimiylar.

(a) C ni aniqlang.

(b) $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ ni aniqlang.

(c) σ ni aniqlang.

(d) $\rho(x)$ grafigini chizing.

3. $\Psi(x)$ quyidagicha:

$$\Psi(x) = \begin{cases} A(1+x), & -1 \leq x \leq 0, \\ A(1-x), & 0 \leq x \leq 1, \\ 0, & x \notin [-1, 1]. \end{cases}$$

(a) A ni aniqlang.

(b) $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ ni aniqlang.

(c) σ_x ni aniqlang.

(d) $\langle p \rangle$ ni aniqlang.

4. Kvant tizimining holati quyidagicha berilgan:

$$\Psi(x, t) = \alpha e^{-A}$$

bu yerda

$$\Lambda = \beta \hbar^{-1} (m x^2 + i \gamma t)$$

va α , β va γ doimiylar.

(a) Ushbu tizimning $V(x)$ potensialini toping.

(b) x , x^2 , p va p^2 ning kutilayotgan qiymatlarini hisoblang.

(c) σ_x va σ_p ni hisoblang. Ular Heisenberg prinsipiga mos keladimi?

(d) α nima?

2.2-mashqlar to'plami

1. (11.27) isboti bir nechta algebraik bosqichlardan va Cauchy-Schwarz tengsizligidan kelib chiqadi. Quyidagini oling:

$$u = (\hat{Q} - \langle \hat{Q} \rangle) \Psi \quad \text{va} \quad v = (\tilde{M} - \langle \tilde{M} \rangle) \Psi.$$

Yuqoridagi ifodaga asosan quydagilar o'rinli:

$$\begin{aligned} \sigma_Q^2 &= \langle \hat{Q}^2 \rangle - \langle \hat{Q} \rangle^2 = \langle \Psi, \hat{Q}(\hat{Q}\Psi) \rangle - \langle \Psi, \langle \hat{Q} \rangle^2 \Psi \rangle = \langle \hat{Q}\Psi, \hat{Q}\Psi \rangle - \langle \langle \hat{Q} \rangle \Psi, \langle \hat{Q} \rangle \Psi \rangle = \\ &= \langle (\hat{Q} - \langle \hat{Q} \rangle) \Psi, (\hat{Q} - \langle \hat{Q} \rangle) \Psi \rangle = \langle u, u \rangle = \|u\|^2, \\ &\text{nega?} \end{aligned}$$

va shunga o'xshash, $\sigma_M^2 = \|v\|^2$. Demak, Cauchy-Schwarz bo'yicha,

$$\sigma_Q^2 \sigma_M^2 = \|u\|^2 \|v\|^2 \geq |\langle u, v \rangle|^2,$$

Ekanligidan quyidagi formulani isbotlang:

$$\langle u, v \rangle = \langle \hat{Q}M \rangle - \langle \hat{Q} \rangle \langle M \rangle.$$

Eslatma: Quyidagiga e'tibor qaring:

$$\begin{aligned} \langle u, v \rangle &= \langle \Psi, \hat{Q}\tilde{M}\Psi \rangle - \langle M \rangle \langle \Psi, \hat{Q}\Psi \rangle - \langle \hat{Q} \rangle \langle \Psi, \tilde{M}\Psi \rangle + \\ &+ \langle \hat{Q} \rangle \langle M \rangle \langle \Psi, \Psi \rangle = \langle \hat{Q}M \rangle - \langle \hat{Q} \rangle \langle M \rangle. \end{aligned}$$

(c) $\langle u, v \rangle$ soni kompleks. Har qanday kompleks son z uchun quyidagi tenglik to'g'ri ekanligini hisobga olib,

$$|z|^2 \geq \left(\frac{1}{2i} (z - z^*) \right)^2,$$

bu yerda $z^* = z$ ning kompleks qo'shma soni, yuqoridagi ayniyatdan foydalanib

$$\sigma_Q^2 \sigma_M^2 \geq \left(\frac{1}{2i} (\langle u, v \rangle - \langle v, u \rangle) \right)^2,$$

va (d) (b) va (c)dan foydalanib, (11.27) to'g'ri ekanligini ko'rsating.

2. Kvant mexanikasining an'anaviy darslik misoli (qarang, masalan, Griffiths [21, p. 25]) x o'qi bo'ylab harakatlanayotgan bitta zarrachaning vaqtga bog'liq bo'lmagan Shrödinger tenglamasi misolidir, bu cheksiz kvadrat quduq masalasi-dir, bunda potensial V quyidagicha aniqlanadi:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{if } 0 \leq x \leq a, \\ \infty, & \text{qolgan hollarda.} \end{cases}$$

Zarracha ushbu «quduq» ichida shunday chegaralangan: $\psi(x) = 0$, agar $x < 0$ va $x > a$ bo'lsa va $V(x)$ quduq ichida 0 ga teng.

a) Shrödinger tenglamasi quyidagicha qisqarishini ko'rsating:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad \psi(x) = \psi(a) = 0,$$

$$k^2 = 2mE / \hbar^2.$$

(b) Energiyaning mumkin bo'lgan qiymatlarini ko'rsating:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

c) To'liqin funksiyasi yechimlar superpozitsiyasi ekanligini ko'rsating:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad 0 \leq x \leq a,$$

ular $L^2(0, a)$ da ortonormaldir.

d) (c) dagi ψ_n funksiyalari $L^2(0, a)$ uchun to'liq ortonormal asosni tashkil etishini hisobga olgan holda, $f(x) = x$ funksiyasining ushbu bazislarning cheksiz yig'indisi sifatida Fureir qatori hosil qiling.

e) Quyidagicha belgilangan:

$$Q(x, p)\Psi = d^2\Psi(x) / dx^2, \quad 0 \leq x \leq a.$$

Q kuzatiladigan kattalikmi?

3. Kvant tizimi to'g'ri chiziqda joylashgan bitta zarrachadan iborat bo'lib, holati x va impuls p . Quyidagi operatorlarni aniqlang:

$$A\varphi = x\varphi \quad (A = "x"),$$

$$B\varphi = \frac{\partial\varphi}{\partial x} \quad (B = \frac{\partial}{\partial x}).$$

A va B operatorlari bir-biriga mos keladimi?

4. Quyidagicha belgilangan:

$$Q = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad M = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (= \tilde{p}).$$

a) Ushbu operatorlarning o'zaro mos kelishini ko'rsating.

b) e^{ikx} ushbu operatorlarning bir vaqtning o'zida o'z funksiyasi ekanligini va haqiqatan ham $p^2/2m = E$ ekanligini ko'rsating.

5. Impuls operatorining o'z funksiyalarini ko'rib chiqing:

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} : -i\hbar \frac{\partial \psi_m}{\partial x} = \lambda_p \psi_m$$

(a) bazis funksiyalari quyidagicha ko'rinishda bo'lishini tasdiqlang:

$$\psi_m(x) = A e^{i \lambda_p x / \hbar},$$

bu yerda A kompleks doimiydir.

(b) Impuls o'z funksiyalari shunday ekanligini tasdiqlangki, $\psi^* \psi = A^* A$, x dan mustaqil doimiy (ya'ni, ψ – tekis to'lqin) va shuning uchun x Heisenberg prinsipiga muvofiq aniq emas.

6. Dirac delta «funksiyasi» $\delta(x)$, odatdagi ma'noda funksiya emas. Bu taqsimot (umumlashgan funksiyalari φ fazosida uzluksiz chiziqli funksional) bo'lib, shunday xossaga ega:

$$\langle \delta, \varphi \rangle = \varphi(0) \quad \forall \varphi \in D,$$

bu yerda $D \subset \mathbb{R}$ da cheklangan tayanchga ega cheksiz farqlanadigan funksiyalar fazosi ($\varphi(\pm\infty) = 0$) va $\langle \cdot, \cdot \rangle$ taqsimotlari fazosida juftlashishni ifodalaydi (D ning duali) va D maxsus topologik struktura bilan jihozlangan (qarang [6]). Bu yerda odatda ramziy yozuv ishlatiladi:

$$\langle \delta, \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \varphi(x) dx = \varphi(0) \quad \forall \varphi \in D$$

(yoki $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$). δ funksiyasi quyidagi xossaga ega:

$$\langle \delta(x-a), \varphi \rangle = \varphi(a) \quad \forall \varphi \in D.$$

Endi potensialni ko'rib chiqamiz (qarang: Griffiths [21, 2.5-bo'lim]):

$$V(x) = -\sigma \delta(x), \quad \sigma \in \mathbb{R}^+.$$

Mos keluvchi Shrödinger tenglamasi (taqsimotli) differensial tenglama:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} - \sigma \delta(x) \psi = E \psi.$$

(a) $x < 0$ uchun $\psi(x) = A e^{kx}$, $k = \sqrt{-2mE} / \hbar$ va $x > 0$ uchun $\psi(x) = B e^{-kx}$, A va B doimiy ekanligini ko'rsating.

(b) $\psi'(x) = 0$ da uzluksiz bo'lishi kerakligiga ko'ra shuni ko'rsatingki:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{kx}, & x \leq 0, \\ A e^{-kx}, & x > 0. \end{cases}$$

(c) Quyidagi shartdan

$$0 = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{d^2 \psi}{dx^2} dx + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V(x) \psi(x) dx - E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x) dx \right),$$

shuni ko'rsatingki:

$$\Delta \psi' = \psi'|_{0^+} - \psi'|_{0^-} = (-2m\sigma / \hbar^2) \psi(0),$$

va shundan $k = m\sigma / \hbar^2$.

(d) ψ normallashtirilgan bo'lishi kerak ($\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$), shuning uchun $A = \sqrt{k}$ va natijada

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{m\sigma}{\hbar^2}} e^{-m\sigma|x|/\hbar^2} \quad \text{va} \quad E = m\sigma / 2\hbar^2.$$

7. Quyidagi operatorlardan qaysi biri Germit?

(a) e^{ix} , (1D);

(b) $\frac{d^2}{dx^2}$, (1D);

(c) $x \frac{d}{dx}$, (1D);

8. Ehrenfest teoremasi operator $\hat{Q}$ ning kutilgan qiymati $\langle Q \rangle$ ning vaqt hosilasini sistema Hamiltonianining operatori $[\hat{Q}, H]$ kommutatori va $\partial \hat{Q} / \partial t$ ning kutilgan qiymati bilan bog'laydi:

$$\frac{d\langle Q \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{Q}, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle.$$

Quyidagi oraliq natijalarni hosil qiling:

$$(a) \quad \frac{d\langle Q \rangle}{dt} = \int_{R^3} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{Q} \Psi d^3x + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle + \int_{R^3} \Psi^* \hat{Q} \frac{\partial \Psi}{\partial t} d^3x,$$

$$(b) \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} H \Psi^*.$$

E'tibor bering

$$\langle [\hat{Q}, H] \rangle = \int_{R^3} \Psi^* [\hat{Q}, H] \Psi d^3x.$$

c) Ehrenfest teoremasi isbotini tugatish uchun (a) va (b)dan foydalaning.

2.3-mashqlar to'plami

1. Ushbu mashq qisman differensial tenglamalarni yechish uchun klassik o'zgaruvchilarni ajratish usulini o'rganish uchun mo'ljallangan. Masala – bu ikki o'lchamli qutidagi zarracha (bu oldingi bobdagi 3.3-mashqning 1D masalasini umumlashtiradi). Fizik holat kvant tizimida xy tekislikda joylashgan to'rtburchak qutidagi bitta zarrachaga tegishli potentsial $V = V(x, y)$ quyidagicha bo'lsa:

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{da } 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, \\ \infty & \text{aks holda.} \end{cases}$$

Hamiltonian shunday:

$$H = \begin{cases} (-\hbar^2 / 2m) \Delta & ((x, y) \in \bar{\Omega}) \text{ soha ichida,} \\ +\infty & \text{soha tashqarisida.} \end{cases}$$

bu yerda Δ ikki o'lchamli Laplas operatoridir.

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}.$$

Shunday qilib, Ψ to'liqin funksiyasi tashqarisida 0 ga teng. Vaqtga bog'liq bo'lmagan Schrödinger tenglamasini hisobga olgan holda, biz $\psi = \psi(x, y)$ ni qidiramiz, bu quyidagilarni qanoatlantiradi:

$$\begin{aligned} H\psi &= E\psi & \text{da } \bar{\Omega}, \\ \psi &= 0 & \text{da } \partial\bar{\Omega}. \end{aligned}$$

(a) O'zgaruvchilarni ajratish usulining standart fokusidan foydalaning:

ψ ni $X(x)$ funksiyasi va $Y(y)$ funksiyasining mahsuli deb oling: $\psi(x, y) = X(x) Y(y)$ va E yig'indi ekanligini taxmin qilgan holda X uchun va Y uchun ikkita oddiy differensial tenglamalarni hosil qiling, $E = e_x + e_y$, $e_x = \text{doimiy}$, $e_y = \text{doimiy}$. Yechimlar quyidagi shaklda ekanligini ko'rsating:

$$\psi_{mn}(x, y) = \sqrt{\frac{4}{ab}} \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{n'\pi y}{b}.$$

(b) Energiya darajalari quyidagicha berilganligini ko'rsating:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{n'^2}{b^2} \right).$$

(c) To'rtburchak qutisi uchun, ($a = b$), n va n' qiymatlari uchun energiya darajalarini aniqlang: $E = (\hbar^2 \pi^2 / 2ma^2)(n^2 + n'^2)$, to 4 gacha. Tizimning eng past energiya darajasi nima?

2. Ushbu mashq vodorod atomining yadrosidan koordinatalar tizimining boshlang'ich nuqtasi sifatida foydalanishning, og'irlik markazidan farqli, yaxshi ma'lum bo'lgan dalili sifatida qarash mumkin. Holat quyidagicha: kvant tizimi ikkita zarrachadan iborat: 1-zarracha og'irligi M (masalan, yadroga mos keladigan) va 2-zarracha og'irligi m (masalan, elektron), koordinata boshi O nuqtada. Zarralar mos ravishda r_1 va r_2 pozitsiyalarida joylashgan. Og'irlik markazi $\mathbf{R} = (r_1 M + r_2 m) / (M + m)$ va 1 dan 2 ga ulanuvchi vektor

$r = r_1 - r_2$ da joylashgan. Maqsad Schrödinger tenglamalarini (r_1, r_2) dan $(\mathbf{R}, r)$ o'zgaruvchilariga o'zgartirish bilan qayta chiqarishdir.

(a) Quyidagilar o'rinli

$$r_1 = \mathbf{R} + \frac{m^*}{M} r, \quad r_2 = \mathbf{R} - \frac{m^*}{m} r,$$

bu yerda $m^* = Mm / (M + m)$.

(b) O'zgaruvchilarni o'zgartirishdan foydalanib, quyidagini ko'rsating:

$$\nabla_{r_1} = \frac{m^*}{m} \nabla_{\mathbf{R}} + \nabla_r \quad \text{va} \quad \nabla_{r_2} = \frac{m^*}{M} \nabla_{\mathbf{R}} - \nabla_r$$

(c) Ushbu yangi o'zgaruvchilarda vaqtga bog'liq bo'lmagan Schrödinger tenglamasi quyidagicha ekanligini ko'rsating:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2(M+m)} \Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta_r + V(r) \right) \psi = E\psi.$$

(d) Endi $M \gg m$ bo'lsa, shunda $M + m \approx M$ va $1/m \gg 1/(M + m)$, faqat r ni o'z ichiga olgan natijaviy taxminiy Schrödinger tenglamasini yozing.

(e) Endi to'liq funksiyasi ajratiladigan bo'lsin: $\psi(r, \mathbf{R}) = \psi(r) \chi(\mathbf{R})$. χ bir zarrachaning Schrödinger tenglamasini massasi $M + m$ bilan, potensial $V_{\mathbf{R}} = 0$ va energiyasi $E_{\mathbf{R}}$ bilan qondirishini ko'rsating, ψ esa bir zarrachaning Schrödinger tenglamasini massasi m^* , potensial $V(r)$ va energiyasi E_r bilan qondiradi, umumiy energiya $E = E_{\mathbf{R}} + E_r$.

2.4-mashqlar to'plami

1. Burchak momentini muvozanatlash prinsipi uchun quyidagi muvofiqlik prinsipi amal qilishini isbotlang:

$$\frac{d\langle L \rangle}{dt} = \langle \mathbf{q} \times \mathbf{F} \rangle, \quad \mathbf{F} = -\frac{dV}{d\mathbf{q}}.$$

2. Spin operatorining S_1 (elektron uchun) o'z qiymatlari $\pm \hbar/2$ ekanligini ko'rsating. Tegishli o'z vektorlar qaysilar?

3. S_1, S_2, S_3 va S^2 (elektronlar uchun) kuzatiladigan kattaliklarni ifodalaydi, lekin S_+ va S_- bunday emasligini tasdiqlang.

4. Normallashtirishni e'tiborsiz qoldirib, quyidagi to'liq funksiyalaridan qaysi biri (agar mavjud bo'lsa) geliy atom uchun yaroqli ekanligini aniqlang.

a) $\varphi_{1s}(1)\varphi_{2s}(2) \begin{vmatrix} \alpha_1 & \beta_1 \\ \alpha_2 & \beta_2 \end{vmatrix}$

b) $(\varphi_{1s}(1)\varphi_{2s}(2) - \varphi_{2s}(1)\varphi_{1s}(2)) \begin{vmatrix} \alpha_1 & \beta_1 \\ \alpha_2 & \beta_2 \end{vmatrix}$

III QISM UCHUN MASHQLAR

3.1-mashqlar to'plami

1. Ichki energiyaning differensial $U = U(S, V, N)$ quyidagicha:

$$dU = TdS - \rho dV + \mu dN,$$

bu yerda T, S, p, V, μ, N mos ravishda harorat, entropiya, bosim, hajm, kimyoviy potensial va zarrachalar soni.

(a) Quyidagi belgilang:

$$h = h(S, \rho, N) = U + \rho V = \text{entalpiya},$$

$$A = A(T, V, N) = U - TS = \text{Helmholtz erkin energiyasi},$$

$$G = G(T, \rho, N) = U + \rho V - TS = \text{Gibbs erkin energiyasi},$$

differensiallarni hosil qiling,

$$dh(S, \rho, N) = TdS + Vd\rho + \mu dN,$$

$$dA(T, V, N) = -SdT - \rho dV + \mu dN,$$

$$dG(T, \rho, N) = -SdT + Vd\rho + \mu dN.$$

(b) $U = U(S, V, N) = TS - \rho V + \mu N$ deb olib, quyidagi tenglamalarni hosil qiling:

$$h = TS + \mu N,$$

$$A = -\rho V + \mu N,$$

$$G = \mu N,$$

va qo'shimcha ravishda tenglamani chiqaring

$$SdT - Vd\rho + Nd\mu = 0.$$

c) Maksvell munosabatlari: Maksvell munosabatlari – bu turli xil termodinamik potentsiallarning hosilalari o'rtasidagi munosabatlar, ularni to'g'ridan to'g'ri olish mumkin.

(i) Maksvell munosabatlarini chiqaring:

$$-\left(\frac{\partial \rho}{\partial S}\right)_{V,N} = \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_{S,N} = \frac{\partial^2 U}{\partial V \partial S},$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial N}\right)_{S,V} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial S}\right)_{V,N} = \frac{\partial^2 U}{\partial N \partial S},$$

$$-\left(\frac{\partial \rho}{\partial N}\right)_{S,V} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial V}\right)_{V,N} = \frac{\partial^2 U}{\partial V \partial N}.$$

Maslahat: Bu munosabatlarning isboti jami differensial $dU = TdS - \rho dV + \mu dN$ ta'riflaridan elementar foydalanish va differensiallanish tartibini o'zaro almashish mumkinligidan kelib chiqadi (masalan, $\partial^2 U / \partial S \partial V = \partial^2 U / \partial V \partial S$).

(ii) h , A va G termodinamik potentsiallaridan Maksvellning o'xshash munosabatlarini chiqaring.

2. Ideal gazning kanonik ansambldagi bo'linish funksiyasi (eslang (17.48))

$$\Omega_{ideal} = \frac{V^N}{N! h^{3N}} (2\pi m k T)^{3N/2},$$

bu yerda V – N zarrachalar egallagan hajm, h – Plank doimiysi, m – har bir zarrachaning massasi, T – harorat, k – Boltzmann doimiysi.

(a) Ideal gaz holatida, ya'ni $A = -kT \ln \Omega_{ideal}$ (qarang. (17.26)) uchun Gelmgoltsning erkin energiyasi A va bo'linish funksiyasi o'rtasidagi munosabatdan foydalaning.

$$A = -kTN \ln \left(\frac{eV}{N} \right) - \frac{3N}{2} kTN \ln \left(\frac{2\pi m k T}{h^2} \right),$$

bilan e natural logarifmning asosi.

Maslahat: Stirlingning yaqinlashuvidan foydalaning, aniqroq shaklda: $N! \approx \sqrt{2\pi N} \left(\frac{N}{e} \right)^N$ Bundan tashqari, $N \gg 1$ uchun biz $\mathcal{O}(\ln(N))$ tartib shartlarini $\mathcal{O}(N)$ tartib shartlariga nisbatan ahamiyatsiz deb hisoblashimiz mumkin.

(b) munosabatdan foydalaning:

$$\left(\frac{\partial A}{\partial V} \right)_{T,N} = -p$$

ideal gaz uchun tenglamani olish uchun, ya'ni:

$$pV = NkT.$$

Gelmgoltsning erkin energiyasi ichki energiya bilan $A = U - TS$ munosabati bilan bog'liq. Munosabatdan foydalaning:

$$\left(\frac{\partial A}{\partial T} \right)_{V,N} = -S$$

tenglamani olish uchun

$$U = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta A),$$

$\beta = 1/kT$ bilan. Keyin ideal gazning ichki energiyasini chiqaring:

$$U = \frac{3}{2} NkT.$$

3. Eslatib o'tamiz, 6-bobda termodinamik tizimni 1-holatdan 2-holatga keltirishda entropiyaning o'zgarishi qanoatlantiradi.

$$\Delta S = S(S, t_2) - S(S, t_1) \geq \frac{1}{T} \delta q$$

izotermik jarayon uchun, bunda oq 1 dan 2 ga siljish orqali yutilgan issiqlikni bildiradi:

$$\delta q = Q = \int_1^2 dq.$$

Qaytariladigan jarayon uchun $\Delta S = \delta q / T$ tengligi amal qiladi.

(a) Bu munosabat oddiy bir komponentli sistemada qaytarilmas jarayonda yutilgan issiqlik ∂q_{rev} dan katta yoki ∂q_{irrev} teng ekanligini ko'rsating. $dE = -pdV + TdS$ va $dA = dE - TdS - SdT$.

(b) Bunday tizim uchun A erkin energiya doimiy T va V uchun minimal ekanligini ko'rsating (ya'ni $\Delta A \leq 0$).

4. Sistemaning j tashkil etuvchisi mollarining N_j soni o'zgarishi mumkin bo'lgan ko'p komponentli sistemalar uchun N_j ning dN_j o'zgarishi natijasida bajarilgan ish $\mu_j dN_j$, $j = 1, 2, M$ (M – tarkibiy qism) deb yoziladi, bu yerda μ_j – j komponentining kimyoviy potentsiali. Termodinamikaning birinchi qonunini (17.1) eslang) bu holda tenglik sifatida yozish mumkin.

$$\frac{d}{dt}(\kappa + U) = \frac{dE}{dt} = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} + Q + \sum_{j=1}^M \mu_j \frac{dN_j}{dt},$$

Bu yerda (masalan) $\mathbf{S}$ – ikkinchi Piola–Kirxof kuchlanishi va $\dot{\mathbf{E}}$ – Green–St. Venant kuchlanishi. Klassik muvozanat statistik mexanikasida dV hajmining o'zgarishiga ta'sir qiluvchi p bosimi natijasida hosil bo'lgan kuchlanish kuchini hisobga olish odatiy holdir, shuning uchun $\mathbf{S} : d\mathbf{E} / dt - p dV / dt$ bilan almashiriladi. Vaqt birligi uchun isitish TdS / dt ga teng o'rnatiladi. Shunday qilib, bizda bor:

$$dE = -pdV + TdS + \sum_{j=1}^N \mu_j dN_j.$$

Tegishli Legendr o'zgarishlaridan foydalanib, $h = h(S, p)$ entalpiyasi, Helmgolts erkin energiyasi $A = A(T, V)$ va Gibbsning erkin energiyasi $G = G(T, p)$ differensiallari uchun mos tenglamalarni chiqaring:

$$dh = Vdp + TdS + \sum_{j=1}^M \mu_j dN_j$$

$$dA = -pdV - SdT + \sum_{j=1}^M \mu_j dN_j$$

$$dG = Vdp - SdT + \sum_{j=1}^M \mu_j dN_j$$

5. Doimiy hajmdagi V va tarkibiy qismlarning N sonidagi, C_V va doimiy bosimdagi p va N , C_p dagi solishtirma issiqliklar T temperaturaning chiziqli funksiyalari:

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V,N} \quad C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{p,N}$$

buni ko'rsating:

$$\left(\frac{\partial C_V}{\partial V} \right)_{T,N} = T \left(\frac{\partial^2 p}{\partial T^2} \right)_{V,N}.$$

buni ko'rsating:

$$C_p - C_V = T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{V,N} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{p,N} = -T \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{T,N} \left[\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{p,N} \right]^2.$$

6. Eslatib o'tamiz, tizimning ekstensiv xossasi makroskopik xususiyat bo'lib, u umuman olganda, chiziqli ravishda tizim hajmiga bog'liq. Masalan, agar mos ravishda E_A va E_B energiyasiga ega bo'lgan ikkita A va B tizimlar kompozit tizim hosil qilish uchun birlashtirilsa, kompozitning energiyasi $E_A + E_B$ yig'indisiga teng bo'ladi. Shunday qilib, ekstensiv xossalar birinchi tartibli bir jinsli funksiyalar, ya'ni $f = f(x)$ funksiyalari bilan tavsiflanadi, shundayki $f(\lambda x) = \lambda f(x)$, $\lambda \in \mathbb{R}$.

Birinchi tartibli bir jinsli funksiyalar uchun Eyler teoremasini isbotlang: agar $f(\lambda x) = \lambda f(x)$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ va f differensiallansa, u holda

$$f(x) = \nabla f(x) \cdot x = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x)}{\partial x_i} x_i.$$

Faraz qilaylik, E umumiy energiya Entropiya va u kinematik o'zgaruvchining funksiyasi bo'lsin, shuning bilan $E = E(\lambda S, \lambda \mathbf{u})$ bo'lsin $(\partial E / \partial \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u} = -p dV + \sum_{j=1}^M \mu_j dN_j$. Eyler teoremasi shuni nazarda tutishini ko'rsating:

$$E = TS - p dV + \sum_{j=1}^M \mu_j dN_j.$$

Gibbs-Dyuhem tenglamasini chiqaring: doimiy T va p da.

$$\sum_{j=1}^M N_j d\mu_j = 0.$$

7. Katta kanonik ansamblda biz zarrachalar, har bir tizimda $\mathcal{N}$ zarracha va umumiy energiya $\mathcal{NE}$ ni o'zaro almashuvchi N bir xil tizimlarni uchratamiz. N_j zarralari va energiya miqdori E_j bo'lgan tizimlar sonini $n_{i,j}$ deb belgilaymiz, shuning uchun

$$\sum_{i,j} n_{i,j} = N, \quad 1a)$$

$$\sum_{i,j} n_{i,j} N_i = NN, \quad 1b)$$

$$\sum_{i,j} n_{i,j} E_j = NE. \quad 1c)$$

Ansaml o'rtasida zarralar va energiya taqsimotining ko'pligi

$$\Gamma(n_{i,j}) = \frac{N!}{\prod_{i,j} (n_{i,j}!)}$$

Yuqoridagi (1a), (1b) va (1c) cheklovlarni qanoatlantirgan holda $\tilde{A}$ ni maksimal darajaga keltiradigan eng ehtimolli taqsimot n_{ij}^* belgilansin. Buni ko'rsating:

$$\frac{n_{i,j}^*}{\mathcal{N}} = \frac{\exp(-\alpha N_i - \beta E_j)}{\sum_{i,j} \exp(-\alpha N_i - \beta E_j)}$$

Bu yerda $\beta = 1/kT$ va $\alpha = -\mu/kT$

8. Oldingi mashqda boshlangan katta kanonik ansamblni o'rganishni davom ettiramiz.

$$\omega \stackrel{\text{def}}{=} \exp(-\alpha N_i - \beta E_j)$$

va

$$\Omega = \sum_{i,j} \omega_{i,j}.$$

Aniqlash

$$\langle N \rangle = \sum_{i,j} N_i \omega_{i,j} / \Omega, \quad \langle E \rangle = \sum_{i,j} E_j \omega_{i,j} / \Omega.$$

(a) Buni ko'rsating:

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial}{\partial \alpha} q, \quad \langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} q,$$

Bu yerda

$$q = \ln \left(\sum_{i,j} \omega_{i,j} \right).$$

(b) Buni ko'rsating:

$$dq = -\langle N \rangle d\alpha - \langle E \rangle d\beta - \frac{\beta}{\mathcal{N}} \sum_{i,j} \langle n_{i,j} \rangle dE_j.$$

v) termodinamikaning birinchi qonuni quyidagi munosabatga olib kelishini ko'rsating

$$q = \alpha \langle N \rangle + \beta \langle E \rangle = S / k, \quad \beta = 1 / kT \quad \text{va} \quad \alpha = -\mu / kT \quad \text{bilan.}$$

(d) $\mu \langle N \rangle = G$, Gibbsning erkin energiyasi $= \langle E \rangle - TS + pV$ ekanligini ko'rsatib, shuni ko'rsating:

$$q = pV / kT$$

3.2-mashqlar to'plami

1. $\int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{u} f d\omega = 0$ ekanligini ko'rsating.

2. Ko'rsatingki, agar (17.69) va (17.70) to'g'ri kelsa, u holda fazoviy (Eulerian) tavsifda olamiz.

$$\varrho \frac{\partial e}{\partial t} = \mathbf{T} : \text{grad } \mathbf{v} - \text{div } \mathbf{q}.$$

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

I qism

1. BATRA, R., **Elements of Continuum Mechanics**, AIAA Education Series, Reston, VA, 2006.
2. CIARLET, P.G., **Mathematical Elasticity, Volume 1: Three-Dimensioned Elasticity**, North-Holland, Amsterdam, 1988.
3. ERINGEN, A.C., **Nonlinear Theory of Continuous Media**, McGraw-Hill, New York, 1962.
4. GURTIN, M.E., **An Introduction to Continuum Mechanics**, Academic Press, New York, 1981.
5. ODEN, J.T., **Finite Elements of Nonlinear Continua**, McGraw-Hill, New York, 1972, (Dover ed., 2006).
6. ODEN, J.T. and DEMKOWICZ, L.F., **Applied Functional Analysis**, Second Edition, CRC Press, Taylor and Francis Group, Boca Raton, FL, 2010.
7. TRUESDELL, C. and NOLL, W., **The Non-Linear Field Theories of Mechanics**, Handbuch der Physik, Vol. 111/3, Springer, Berlin, 1965.
8. TRUESDELL, C. and TOUPIN, R., **The Classical Field Theories**, Handbuch der Physik, Vol. 111/i, Springer, Berlin, 1960.

II qism

9. ALCOCK, N.W., **Bonding and Structure: Structural Principles in Inorganic and Organic Chemistry**, Ellis Horwood, New York and London, 1990.
10. BLOCH, F., «*Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern*,» *Z. Phys.*, 52, pp. 522–600, 1928.
11. BORN, M., **Atomic Physics**, Dover, New York, Eighth Edition, Revised by R. J. Blin-Stoyle and J. M. Radcliffe, 1989.
12. CANCES, E., «SCF algorithms for HF electronic calculations,» in M. DEFERANCESCHI AND C. LEBRIS (eds.), **Mathematical Models and Methods for Ab Initio Quantum Chemistry**, Lecture Notes in Chemistry, Springer-Verlag, Berlin, pp. 17–33, 2000.

13. CARTMELL, E. AND FOWLES, G.W.A., **Valency and Molecular Structures**, Butterworths, London, 1977.
14. DEFERANCESCHI M. AND LEBRIS, C., (eds.), **Mathematical Models and Methods in Ab Initio Quantum Chemistry**, Springer-Verlag, Berlin, 2000.
15. DREIZLER, R.M. AND GROSS, E.K.U., **Density Functional Theory**, Springer-Verlag, Berlin, 1993.
16. FEYNMAN, R.P., **Phys. Rev.**, 56, p. 340, 1939.
17. FOCK, V., «Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems,» **Z. Phys.**, 61, pp. 126–148, 1930.
18. GIL, V., **Orbitals in Chemistry**, Cambridge University Press, New York, 2000.
19. GILL, P.M.W., ADAMSON, R.D. AND POPL, J.A., «Coulomb-attenuated exchange energy density functionals,» **Mol.Phys.**, 88(4), pp. 1005-1010, 1996.
20. GILLEPSIE, R.J. AND POPELIER, P.L., **Chemical Bonding and Molecular Geometry**, Oxford University Press, New York, 2001.
21. GRIFFITHS, D.J., **Introduction to Quantum Mechanics**, Prentice-Hall, Upper Saddle River, NJ, 1995.
22. HALLIDAY, D., RESNICK, R., AND WALKER, J., **Fundamentals of Physics**, John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, Sixth Edition, 2001.
23. HARTREE, D., «The wave mechanics of an atom with non-Coulomb central field, Part 1: Theory and methods,» **Proc. Camb.Phil. Soc.**, 24, pp. 89–312, 1928.
24. HARTREE, D., **The Calculation of Atomic Structures**, John Wiley & Sons, New York, 1957.
25. HARVEY, J., «Molecular Electronic Structure – Lecture 4, The Hartree-Fock-Roothaan Method: Part 1,» <http://www.chm.bris.ac.uk/pt/harvey/elstruct/hf.method.html>, 2001.
26. HELLMANN, H., **Einführung in die Quantenchemie**, Deuticke, Leipzig, p. 285, 1937.
27. HINCHLIFFE, A., **Computational Quantum Chemistry**, John Wiley & Sons, Chichester, 1988.
28. HOHENBERG, P. AND KOHN, W., **Phys. Rev.**, 136, B864, 1964.
29. JACKSON, J.D., **Classical Electrodynamics**, John Wiley & Sons, New York, Second Edition, 1962.
30. KOHN, W. AND SHAM, L.J., «Self-consistent equations including exchange and correlation effects,» **Phys. Rev.**, 94, p. 111, 1954.
31. KOHN, W. AND SHAM, L.J., **Phys. Rev.**, 140, A1133, 1965.

32. KOHN, W., «Nobel lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals», **Rev. Mod. Phys.**, 71(5), pp. 1253–1266, 1998.
33. LEACH, A. H., **Molecular Modeling; Principles and Applications**, Pearson Education Limited, Prentice-Hall, Harlow, Second Edition, 2001.
34. LIONS, P.L., «Solutions of Hartree–Fock equations for Coulomb systems», **Commun. Math. Phys.**, 109, pp. 33–97, 1987.
35. LIU, W.K., KARPOV, E.G., AND PARK, H.S., «An introduction to computational nanomechanics and materials», **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, Vol. 193, pp. 1529–1578, 2004.
36. MARDER, M.P., **Condensed Matter Physics**, Wiley Interscience, New York, 2000.
37. MESSIAH, A., **Quantum Mechanics**, Volumes 1 and 2, Dover, Mineola, NY, 1999.
38. PARR, R.G. AND YANG, W., **Density-Functional Theory of Atoms and Molecules**, Oxford University Press, New York, 1989.
39. HATNER, M.A. AND SCHATZ, G.C., **Introduction to Quantum Mechanics in Chemistry**, Prentice-Hall, Upper Saddle River, 2001.
40. SAAD, Y., CHELIKOWSKY, J.R., AND SHONTZ, S.M., «Numerical methods for electronic structure calculations of materials», **SIAM Rev.**, Vol. 52, No. 1, pp. 3–54, 2010.
41. SHERILL, C.O., «An introduction to Hartree–Fock molecular orbital theory», <http://vergil.chemistry.gatech.edu/notes/hf-intro/hf-intro.pdf>, 2000.
42. SLATER, V.C., AND KOSTER, G.F., «Simplified LCAO method for periodic potential problem», **Phys. Rev.**, 94(6), pp. 1498–1524, 1954.
43. VON NEUMANN, J., **Mathematical Foundations of Quantum Mechanics**, University Press, Princeton, NJ, 1955.
44. ZETTLI, N., **Quantum Mechanics: Concepts and Applications**; Second Edition, John Wiley & Sons Ltd., Chichester, 2009.

III qism

45. ALLEN, M.P. AND TILDESLEY, D.J., **Computer Simulation of Liquids**, Clarendon Press, Oxford, 1987.
46. ANDREWS, F.C., **Equilibrium Statistical Mechanics**, John Wiley & Sons, New York, Second Edition, 1975.
47. CERCIGNANI, C., **Rarefied Gas Dynamics: From Basic Concepts to Actual Calculations**, Cambridge University Press, Cambridge, 2000.

48. CHANDLER, D., **Introduction to Modern Statistical Mechanics**, Oxford University Press, New York and Oxford, 1987.
49. DILL, K.A. AND BROMBERG, S., **Molecular Driving Forces. Statistical Thermodynamics and Biology**, Garland Science, New York, 2003.
50. EHRENFEST, P. AND EHRENFEST, T., «*Begriffliche Grundlagen der statistischen Auffassung in der Mechanik*,» Vol. IV, Part 2, **Enzyklopadie der Mathematischen Wissenschaften mit Emschluss ihrer Anwendungen**, Teubner, Leipzig, 1911.
51. EKELAND, I. AND TEMAM, H., **Convex Analysis and Variational Principles**, North Holland, Amsterdam, 1976.
52. FRENKEL, D. AND SMIT, B., **Understanding Molecular Simulation**, Academic Press, San Diego, Second Edition, 2002.
53. GRANDY, W.T. JR., **Foundations of Statistical Mechanics: Vol. I, Equilibrium Theory**, D. Reidel, Dordrecht, 1987.
54. GRANDY, W.T. JR., **Foundations of Statistical Mechanics: Vol. II, Nonequilibrium Phenomena**, D. Reidel, Dordrecht, 1988.
55. HILL, T.L., **An Introduction to Statistical Thermodynamics**, Dover, New York, 1986.
56. KHINCHIN, A.I., **Mathematical Foundations of Statistical Mechanics**, Dover, New York, 1949.
57. LEACH, A.R., **Molecular Modeling; Principles and Applications**, Pearson Education Limited, Prentice-Hall, Harlow, Second Edition, 2001.
58. LEBOWITZ, J.L., «*Hamiltonian Flows and Rigorous Results in Nonequilibrium Statistical Mechanics*,» in RICE, S.A., FREED, K.F. AND LIGHT, J.C. (eds.), **Statistical Mechanics: New Concepts, New Problems, New Applications**, Chicago Press, Chicago, 1972.
59. MCQUARRIE, D., **Statistical Mechanics**, University Science Books, Sausalito, CA, 2000.
60. METROPOLIS, N., ROSENBLUTH, A.W., ROSENBLUTH, M.N., TELLER, A.H., AND TELLER, E., «*Equation of state calculations by fast computing machines*,» **J. Chem. Phys.**, 21, pp. 1087–1092, 1953.
61. ODEN, J. T., **Qualitative Methods in Nonlinear Mechanics**, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1986.
62. PATHRIA, R.K., **Statistical Mechanics**, Butterworth-Heinemann, Oxford, Second Edition, 1996.
63. PLANCHEREL, M., «*Beweis der Unmöglichkeit ergodischer mechanischer Systeme*,» **Ann. Phys.** 347, pp. 1061–1063, 1913.

64. ROSENTHAL, A., «Beweis der Unmöglichkeit ergodischer Gassysteme», *Ann. Phys.* 347, pp. 796–806, 1913.

65. SCHROEDER, D.V., **An Introduction to Thermal Physics**, Addison-Wesley Longman, San Francisco, 2000.

66. WEINER, J.H., **Statistical Mechanics of Elasticity**, Dover, New York, Second Edition, 2002.

MUNDARIJA

Tarjimondan	3
Kirish.....	4

I QISM. NOCHIZIQLI TUTASH MUHITLAR MEXANIKASI

1-BOB. DEFORMATSIYALANUVCHI QATTIQ JISMLAR

KINEMATIKASI..... 6

1.1. Harakat	7
1.2. Deformatsiya va deformatsiya tenzorlari	9
1.3. Harakat tezligi	12
1.4. Deformatsiya tezligi.....	14
1.5. Piola almashtirishi.....	16
1.6. Qutbiy dekompozitsiya teoremasi	19
1.7. Deformatsiyaning bosh yo'nalishlari va invariantlari.....	20
1.8. Reynoldsning transport teoremasi	23

2-BOB. MASSA VA IMPULS..... 24

2.1. Massaning saqlanish prinsipining mahalliy shakllari	25
2.2. Moment-harakat miqdori.....	26

3-BOB. DEFORMATSIYALANUVCHAN JISMLARDA KUCH

VA KUCHLANISH..... 27

4-BOB. HARAKAT MIQDORI VA BURCHAK IMPULSINING

SAQLANISH QONUNI..... 31

4.1. Cauchy teoremasi: Cauchy kuchlanish tenzori	31
4.2. Harakat tenglamalari (Chiziqli impuls)	33
4.3. Boshlang'ich konfiguratsiyaga nisbatan harakat tenglamalari: Piola-Kirchhoffning kuchlanish tenzorlari	35
4.4. Quvvat.....	36

5-BOB. ENERGIYANING SAQLANISH QONUNI.....	39
5.1. Energiya va energiyaning saqlanish qonuni.....	39
5.2. Energiya saqlanishi qonunining lokal formalari.....	40
 6-BOB. TUTASH MUHITLAR TERMODINAMIKASI	
VA IKKINCHI QONUN	41
 7-BOB. HOLAT TENGLAMALARI.....	44
7.1. Holat tenglamalari uchun qoidalar va tamoyillar.....	45
7.2. Invariantlik prinsiplari	47
7.2.1. Deformatsiyalanuvchan qattiq jism	47
7.2.2. Suyuqliklar	48
7.3. Coleman – Noll metodi: Termodinamikaning ikkinchi qonuni bilan muvofiqlik	49
 8-BOB. MISOLLAR VA QO'LLANISHLAR	52
8.1. Siqilmas suyuqlik uchun Navier–Stokes tenglamalari.....	52
8.2. Gazlar va siqiluvchan suyuqliklar oqimi: Navier–Stokes tenglamalari.....	54
8.3. Issiqlik o'tkazuvchanlik.....	55
8.4. Elastiklik nazariyasi	57

II QISM. ELEKTROMAGNIT MAYDON NAZARIYASI VA KVANT MEXANIKASI

9-BOB. ELEKTROMAGNIT TO'LQINLAR.....	60
9.1. Kirish.....	60
9.2. Elektr maydonlari.....	60
9.3. Gauss qonuni.....	63
9.4. Elektr potensial energiyasi.....	64
9.4.1. Atom modellari	64
9.5. Magnit maydonlar	65
9.6. To'lqinlarning ba'zi xususiyatlari.....	68
9.7. Maxwell tenglamalari	71
9.8. Elektromagnit to'lqinlar.....	74

10-BOB. KVANT MEXANIKASIGA KIRISH.....	75
10.1. Kirish izohlari	75
10.2. To'liq va zarrachalar mexanikasi.....	76
10.3. Heisenbergning nomuayyanlik prinsipi	78
10.4. Schrödingerning tenglamasi.....	79
10.4.1. Erkin zarracha holati.....	80
10.4.2. R^n fazosida superpozitsiya	81
10.4.3. Hamiltonian formasi	82
10.4.4. Potensial energiya holati.....	82
10.4.5. Relativistik kvant mexanikasi.....	83
10.4.6. Schrödinger tenglamasining umumiy qo'yilishi	83
10.4.7. Vaqtga bog'liq bo'lmagan Schrödinger tenglamasi	84
10.5. To'liq tenglamasining boshlang'ich xususiyatlari.....	84
10.5.1. Tahlil	85
10.5.2. Impuls	86
10.5.3. To'liq paketlari va Fourier o'tkazmalari	88
10.6. To'liq-impuls dualizmi.....	89
10.7. Ilova: ehtimollik zichliklarining qisqacha ko'rib chiqilishi.....	91

11-BOB. KVANT MEXANIKASIDA DINAMIK O'ZGARUVCHILAR

VA KUZATILADIGAN KATTALIKLAR:

MATEMATIK FORMALIZM	94
11.1. Kirish izohlari	94
11.2. Hilbert fazolari $L^2(R)$ (yoki $L^2(R^d)$) va ${}^1(R)$ (yoki $H^1(R^d)$).....	94
11.3. Dinamik o'zgaruvchilar va Hermit operatorlari.....	96
11.4. Hermit operatorlarining spektral nazariyasi: diskret spektr.....	99
11.5. Kuzatishlar va statistik taqsimotlar.....	102
11.6. Uzlaksiz spektr.....	103
11.7. Dinamik o'zgaruvchilar uchun umumlashgan noaniqlik prinsipi.....	104
11.7.1. Bazis funksiyalar sistemasi.....	106

12-BOB. QO'LLANILISHLAR: GARMONIK OSSILLYATOR

VA VODOROD ATOMI

12.1. Kirish izohlari	107
12.2. Asosiy holatlar va energiya kvantlari: garmonik ossillyator	107

12.3. Vodorod atomi.....	109
12.3.1. Schrödinger tenglamasi sferik koordinatalarda.....	110
12.3.2. Radial tenglama.....	111
12.3.3. Burchak tenglamasi.....	113
12.3.4. Vodorod atomining orbitallari.....	114
12.3.5. Spektroskopik holatlar.....	115

13-BOB. SPIN VA PAULI PRINSIPI..... 118

13.1. Burchak momenti va aylanish.....	118
13.2. Tashqi burchak momenti.....	119
13.2.1. Zanjir xossasi: holatlarni ko'tarish va tushirish.....	121
13.3. Spin.....	123
13.4. Bir xil zarrachalar va Pauli prinsipi.....	126
13.5. Geliy atomi.....	128
13.6. Variatsion prinsip.....	131

14-BOB. ATOM VA MOLEKULALAR STRUKTURASI..... 134

14.1. Kirish.....	134
14.2. Atom elementlarining elektron tuzilmasi.....	134
14.3. Davriy jadval.....	138
14.4. Atom bog'lanishlari va molekulalar.....	139
14.5. Molekulyar tuzilmalarga misollar.....	145

15-BOB. BOSHLANG'ICH MA'LUMOTLAR, TAQIRIBIY USULLAR VA ZICHLIK FUNKSIONAL NAZARIYASI..... 151

15.1. Kirish.....	151
15.2. Born–Oppenheimer yaqinlashishi.....	152
15.3. Hartree va Hartree–Fock usullari.....	155
15.3.1. Hartree usuli.....	156
15.3.2. Hartree–Fock usuli.....	157
15.3.3. Rutan tenglamalari.....	159
15.4. Zichlikning funksional nazariyasi.....	160
15.4.1. Elektron zichligi.....	160
15.4.2. Hohenberg–Kohn teoremasi.....	164
15.4.3. Kohn–Sham nazariyasi.....	166

III QISM. STATISTIK MEXANIKA

16-BOB. ASOSIY TUSHUNCHALAR: ANSAMBLAR, TAQSIMLASH FUNKSIYALARI VA O'RTACHA QIYMATLAR.....

16.1. Kirish.....	170
16.2. Hamiltonian mexanikasi	171
16.2.1. Hamiltonian va harakat tenglamalari	172
16.3. Faza funksiyalari va o'rtacha vaqt.....	173
16.4. Ansambllar, ansambl o'rtacha qiymatlari va ergodik tizimlar	174
16.5. Izolyatsiyalangan tizimlarning statistik mexanikasi.....	177
16.6. Mikrokanonik ansambl	179
16.6.1. Kompozit tizimlar	181
16.7. Kanonik ansambl	184
16.8. Katta kanonik ansambl.....	188
16.9. Qo'shimcha: molekulyar dinamika haqida qisqacha ma'lumot.....	189
16.9.1. Newtonning harakat tenglamalari.....	190
16.9.2. Potensial funksiyalar.....	191
16.9.3. Dinamik tizimning sonli yechimi	193

17-BOB. STATISTIK MEXANIKANING ASOSLARI:

KLASSIK TERMODINAMIKA	195
17.1. Kirish.....	195
17.2. Energiya va termodinamikaning birinchi qonuni.....	196
17.3. Kvazi-statik jarayonlarda ish bajarilish tezligining statistik mexanika talqini	197
17.4. Statistik mexanika talqini: Termodinamikaning birinchi qonuni.....	199
17.4.1. $\dot{Q}$ ning statistik talqini	200
17.5. Entropiya va taqsimot funksiyasi	201
17.6. Qo'shma Hamiltonianlar.....	202
17.7. Gibbs munosabatlari	204
17.8. Monte Carlo va Metropolis usullari	205
17.8.1. Kanonik ansambl uchun bo'linish funksiyasi	206
17.8.2. Metropolis usuli	207
17.9. Kinetik nazariya: statistik mexanikada. Boltzmann harakat tenglamasi.....	208
17.9.1. Boltzmann tenglamasi.....	208

17.9.2. To'qnashuv invariantlari	210
17.9.3. Siqiluvchan suyuqliklar va gazlarning uzluksiz mexanikasi: makroskopik balans qonunlari	211
Mashqlar	214
Foydalanilgan adabiyotlar	243

J. TINSLEY ODEN

MATEMATIK MODELLASHTIRISHGA KIRISH: MEXANIKA KURSI

Muharrir
Badiiy muharrir
Texnik muharrir
Sahifalovchi

*T. Mirzayev
D. Mulla-Axunov
G. Ahmedova
G. Qulnazarova*

Noshirlik faoliyati to'g'risidagi xabarnoma
6.11.2023-yil qabul qilingan, tasdiqnoma № 156149.
Bosishga 2025-yil 16-aprelda ruxsat etildi.
Bichimi $70 \times 100^{1/16}$. Bosma tabog'i 16.
Adadi 50. Buyurtma № 017/O-25.

«Donishmand ziyosi» MCHJ nashriyotida nashrga tayyorlandi.
Toshkent shahar, Navoiy ko'chasi, 30-uy.

«Kamalak-PRESS» MCHJ bosmaxonasida chop etildi.
Toshkent shahar, Navoiy ko'chasi, 30-uy.

Ushbu xorijiy o'quv adabiyoti o'zbek tiliga ilk marotaba tarjima qilinganligi munosabati bilan nashriyot va tarjimonlar tomonidan ayrim kamchilik va xatoliklarga yo'l qo'yilgan bo'lishi mumkin. Kamchiliklarni bartaraf etish maqsadida fikr-mulohazalaringizni quyidagi manzil va telefon raqamlari orqali qabul qilamiz.

Manzil: Toshkent shahar, Navoiy ko'chasi, 30-uy.

Telefon raqami 71-244-15-53.