Физикалық шамаларды операторлармен бейнелеу
Кванттық механиканың математикалық аппараты

- *Кванттық механиканың математикалық аппараты*
- *Операторлар*
- *Операторлардың кейбір қасиеттері*
- *Операторлардың меншікті мәндері және меншікті функциялары*
- *Кванттық механиканың негізгі постулаттары*
- *Физикалық шамалардың операторлары*

1. Кванттық механиканың математикалық аппараты классикалық механиканың математикалық аппаратынан мүлдем өзгеше. Классикалық механика заңдарын бейнелеу үшін дифференциалдық есептеулер қолданылады, ал кванттық механика заңдары басқа математикалық амалдар – операторлар жәрдемімен сипатталады. Кванттық механикада физикалық шамалар (мысалы, координат, импульс, импульс моменті, толық энергия) математикалық операторлармен кескінделеді.

10 – лекцияда кванттық бөлшектің күйі оның координаттары және импульсымен емес, түрі күш өрісінің нақты потенциалына тәуелді Ψ-функцияның берілуімен анықталатындығы (кванттық механиканың бірінші постулаты) жайында айтылған болатын. Ψ – функциясы бойынша кеңістіктің әр түрлі нүктелерінде бөлшектің табылу ықтималдығын ғана емес, әр түрлі физикалық шамалардың (мысалы, энергияның, импульстың, импульс моментінің) меншікті мәндерінің ықтималдықтарын да табуға болады. Бұл үшін Ψ – функциядан осы шамалардың мәндерін қалай шығарып алу амалын білу керек. Кванттық механикада қозғалыстағы бөлшекті бейнелейтін физикалық шамалар жайында мәлімет алу үшін кванттық механиканың арнайы математикалық аппараты қолданылады, мұнда физикалық шамалардың операторлары және олардың Ψ – функцияларға әрекетінің нәтижелері пайдаланылады.

1926 ж. М. Борн және басқа ғалымдардың еңбектерінде кванттық механиканың екінші постулаты тұжырымдалды. Осы постулат бойынша әрбір физикалық шамаға осы шаманың нақты операторы сәйкестендіріледі. Сонда кванттық механикада операторлар арасындағы қатынастардың құрылымы бұларға сәйкес физикалық шамалардың арасындағы классикалық қатынастардың құрылымындай болады.

2. Операторлар. 1926 ж. М.Борн, Н.Винер әрбір классикалық физикалық шамаға белгілі қасиеттерге ие, қайсыбір оператор салыстырылады деген идея ұсынды. Бұл қазір кванттық теория формализмінің негізі болып отыр.

Оператор - шартты белгі, немесе ереже; оны қолдану арқылы бір функциядан басқа функцияны алуға болады. Физикада операторлар әдетте үстіне ^ таңбасын қойып белгіленеді: $\hat{A}, \hat{B}, \hat{L}.$ Егер $\hat{L}$ операторы арқылы *ψ(x)* функциядан *φ(x)* функция алынатын болса, онда $\hat{L}$ операторы *ψ(x)* функциясына әсер етеді (немесе $\hat{L}$ операторы *ψ(x)* функциясын *φ(x)*-ға айналдырады) деп айтады. Оператордың осы амалы (әрекеті) былай жазылады:

$$\hat{L}\psi(x) = \varphi(x).$$

(1)

Мысалы, $\hat{L} = \frac{d}{dx}$ және *ψ(x)=sinx* болсын дейік. Сонда $\hat{L} = \frac{d}{dx}\sin x = \cos x$ яғни $\frac{d}{dx}$ операторы *sinx* функциясын *cosx* функциясына айналдырады.

Кванттық механикада күйлердің суперпозиция принципі қанағаттандырылуы үшін тек сызықтық операторлар қолданылады. Және кез келген сызықтық оператор емес, тек өзара түйіндес, немесе эрмиттік операторлар қолданылады.Мұндай операторлардың маңызды қажеті – бұлардың меншікті мәндері нақты физикалық шамалар сандар) болады.

3. Операторлардың қасиеттері. Операторлардың қосындысы да оператор болады. Демек

$$(\hat{L}_1 + \hat{L}_2)\psi = \hat{L}_1\psi + \hat{L}_2\psi = \hat{L}\psi.$$

$\hat{A}$ және $\hat{B}$ екі оператордың қосындысы және айырмасы былай анықталады:

$$(\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi \qquad (2)$$

$\hat{A}$ және $\hat{B}$ операторларының көбейтіндісі $\hat{A} \cdot \hat{B} = \hat{C}$ былайша анықталады: $\hat{C}\psi = \hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi).$ (3)

$\hat{A}\hat{B}$ операторы ψ функциясына былай әсер етеді; алдымен ψ функциясына $\hat{B}$ операторы әсер етіп, жаңа φ функциясы $\hat{B}$ *ψ=φ* пайда болады да, бұған енді $\hat{A}$ операторы әсер етеді $\hat{A}$ *φ=* $\hat{A} \cdot \hat{B}$ *ψ*.

Егер $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ (немесе $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$) болса, онда $\hat{A}$ және $\hat{B}$ операторлары өзара коммутирленеді (бірімен-бірі орын алмастыра алады); егер $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ болса, онда $\hat{A}$ және $\hat{B}$ операторлары өзара коммутирленбейді. Мысалы, $\frac{d}{dx}$ және $\boldsymbol{x}$ операторлары коммутирленбейді.

$\hat{A}\ \hat{B} - \hat{B}\ \hat{A} \equiv \{\hat{A}, \hat{B}\}$ айырмасы $\hat{A}$ және $\hat{B}$ **операторларының коммутаторы** деп аталады.

Егер $\hat{L}$ оператор мына шарттарды

$$\hat{L}(c\psi) = c\hat{L}\psi, \quad \hat{L}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{L}\psi_1 + c_2\hat{L}\psi_2 \qquad (4)$$

қанағаттандыратын болса, онда ол сызықтық деп аталады. Мұндағы c, c_1, c_2 – кез келген тұрақтылар, ψ_1, ψ_2 – кез келген функциялар.

Тұрақты шаманы сызықтық оператор таңбасының сыртына шығаруға болады. Екі сызықтық оператордың қосындысы, айырмасы және көбейтіндісі де сызықтық оператор болады.

Егер мына теңдік

$$\int \psi_1^* \hat{L} \psi_2 \, dx = \int \psi_2 \hat{L}^* \psi_1^* \, dx \qquad (5)$$

орындалатын болса, онда $\hat{L}$ операторы эрмиттік немесе өзара түйіндес оператор деп аталады. Интегралдау x айнымалының барлық өзгеру аймағы бойынша жүргізіледі, * таңбасы комплекс түйіндестікті белгілейді, өйткені функциялар да, операторлар да комплекс болуы мүмкін. $\hat{L}^*$ мағынасы: егер операторда i жорымал бірлігі болса, оның алдындағы таңба өзгереді.

4. Оператордың меншікті мәндері және меншікті функциялары. Нөлден өзгеше функция оператор әрекетінен кейін, жалпы басқа функция алынады; бірақ оператор әрекеті нәтижесінде функция өзгермейтін немесе тек тұрақты көбейтіндіге өзгеретін жағдайлар да болуы мүмкін.

$\hat{L}$ операторы ψ функцияны тұрақты көбейтіндіге дейінгі дәлдікпен өзгертпей қалдыратын шартты былайша жазуға болады:

$$\hat{L}\psi = L\psi. \qquad (6)$$

Бұл сызықтық операторлар теориясының негізгі теңдеуі болып табылады. Мұндағы L – тұрақты, ол $\hat{L}$ операторының түріне және ψ функциясына тәуелді.

Квант-механикалық есептерді шешкенде, әдетте, үздіксіздік, бірмәнділік, шектелгендік шарттарды қанағаттандыратын функциялар іздестіріледі. Егер (6) теңдіктегі ψ функция жоғарыда аталған үлгі шарттарға бағынатын болса, онда ол $\hat{L}$ операторының меншікті функциясы, ал L саны – осы оператордың меншікті мәні деп аталады. $\hat{L}$ операторының меншікті ψ функциясы оператордың L-ға тең меншікті мәніне тиісті деп айтылады. Мысал келтірейік.U(xyz) Потенциалдық өрісте қозғалатын бөлшек үшін операторлық түріндегі Шредингер теңдеуін жазайық:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\text{m}}\Delta+U(x,y,z)\right]\psi = E\psi \ .$$

$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta+U$ операторын Ĥ арқылы белгілейік.Бұл оператор Гамильтон операторы (гамильтониан) деп аталады.Сонда Шредингер теңдеуі былай жазылады

$$\hat{H}\psi=E\psi.$$

Потенциалдық өрісте бөлшек энергиясы тұрақты болып қалады. Демек, Е тұрақты саны Ĥ операторының меншікті мәні,ал ψ-оның меншікті функциясы болады.

5. Кванттық механиканың негізгі постулаттары

Квант-механиканың операторлардың бір емес,көптеген меншікті функциялары және бұларға сәйкес меншікті мәндері болады.Осы жағдайда меншікті мәндердің жиынтығы **оператордың спектрі** деп аталады. $\hat{L}$ операторының спектрі дискретті болуы,үздіксіз болуы,аралас болуы да мүмкін. кейбір жағдайларда $\hat{L}$ операторының λ_n меншікті мәніне бір емес, бірнеше меншікті функция тиісті болады.Мұндай жағдайлар **азғындалған** деп аталады.

- Әрбір динамикалық айнымалыға, әрбір физикалық шамаға (координат, импульс, энергия және т.б.) белгілі эрмиттік оператор сәйкес келеді.

Осы постулатқа сәйкес “физикалық операторлар” енгізілуге тиіс: $\hat{\vec{r}}$ координат операторы, $\hat{\vec{p}}$ импульс операторы, $\hat{H}$ энергия операторы және т.б. Және мұнда физикалық шамалардың арасындағы классикалық іліктестік кванттық механикада сол күйде сақталады.

- $\hat{L}$ операторымен кескінделетін қайсыбір динамикалық айнымалының сан мәнін өлшегенде, $\hat{L}$ операторының меншікті мәні болып табылатын $\lambda_1, \lambda_2, \ldots$ сандарының бірі белгілі ықтималдықпен алынады.
- ψ толқындық функция бейнелейтін кез-келген күйде L динамикалық айнымалы шамасының математикалық орташасы (күтуі), толқындық функция нормаланған жағдайда, мына формуламен өрнектеледі:

$$<L> = \int \psi^* \hat{L} \psi d\tau . \qquad (7)$$

Бұл постулат ықтималдық теориясының математикалық күтулерге (орташаға) қатысты негізгі қағидаларын қанағаттандырады. Функция белгілі болса, онда (7) формуланы пайдаланып, әрқашан барлық механикалық шамалардың орташа мәндерін көрсете аламыз.

6. Физикалық шамалардың операторлары. Кез келген физикалық шамаға (динамикалық айнымалыға) сәйкес оператор өзара түйіндес, эрмиттік болуға тиіс. Оператордың нақты түрі, оның көмегімен алынатын нәтиже тәжірибеге үйлесетіндей, таңдалып алынады.

$\hat{x}$ координат және $\hat{p}_x$ импульс проекциясының операторлары кванттық механиканың негізгі операторлары болып табылады.

x координатының операторы ретінде осы координатқа көбейту операторын алу керек, яғни $\hat{x}$ координат операторын қайсыбір $f(x)$ функцияға қолдану, осы функцияны $\boldsymbol{x}$-қа көбейтуге саяды:

$\hat{x} f(x)= xf(x)$. Сонымен, $\hat{x}=x$. Осылай болғандықтан координаттың орташа мәні (7) формуласына сәйкес былай анықталады:

$$<x> = \int_{-\infty}^{+\infty} x|\psi(x)|^2 dx ,$$

бұл $\boldsymbol{x}$ координаты күтуінің анықтамасымен дәл келеді, өйткені толқындық функция модулінің квадраты ықтималдық тығыздығын береді.

Импульс проекциясының операторы ретінде мына оператор алынады:

$$\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} .$$

$\hat{P}_y$ және $\hat{P}_z$ операторлары да осыған ұқсас анықталады.

Кинетикалық энергия операторы $\hat{T}$**.** Декарттық координаттарда кинетикалық энергияға

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \tag{8}$$

операторы сәйкес келеді; мұндағы $\Delta = \nabla^2$ – Лаплас операторы.

Гамильтон операторы (гамильтониан) $\hat{H}$**.** Классикалық физикада Гамильтон функциясы деп бөлшектердің импульстары мен координаттары арқылы өрнектелген толық энергияны айтады:

$$H(\vec{r}, p) = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r})$$

Кванттық механикада *H* функциясына $\hat{H}$ оператор сәйкес келтірілуге тиіс. Осы оператор *H* өрнегіне *p* орнына $\hat{p}$ оператор қою нәтижесінде алынады:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}).$$

(9)

Шредингердің стационарлық теңдеуіне $\hat{H}$ толық энергия операторын қойып операторлық түріндегі Шредингердің стационарлық теңдеуін аламыз:

$$\hat{H}\psi = E\psi. \tag{10}$$

Сұрақтар

1. Кванттық механиканың математикалық аппараты классикалық механиканың математикалық аппаратынан неге өзгеше болады?

2. Оператор деген не?

3. Операторлар ұғымы көмегімен Шредингердің стационарлық теңдеуін қалай жазуға болады?

4. Физикалық шама операторының меншікті мәндері және меншікті функциялары деген не?

5. Гамильтониан және толық энергия операторы деген не?

6. *Координат және импульс операторлары негізгі, ал барлық қалған операторлар туынды болатыны неліктен?*