11-лекция.

Зат бөлшектерінің толқындық қасиеттері. Де Бройльжорамы. Де Бройль жорамалының тәжірибеде расталуы.

4.1. Де Бройль гипотезасы

Корпускулалық – толқындық дуализм идеясын тыныштық массасы нөл емес зат бөл-шектеріне тарату мәселесі баяндалады.

Оптикалық құбылыстардың көпшілігін (интерференция, дифрак-ция) жүйелі түрде толқындық қозқарас тұрғысынан кескіндеуге болатыны оптика курсынан белгілі. Ал кейбір құбылыстарда (фото-эффект, Комптон-эффект) жарық өзінің корпускулалық табиғатын анық байқатады.

Толқындық теория тұрғысынан қарағанда жарық ω тербеліс жиілігі мен λ толқын ұзындығы арқылы сипатталады. Корпускулалық теория бойынша жарық фотонының ε_Φ энергиясы, m_Φ массасы мен p_Φ импульсы мынаған тең:

$$\varepsilon = \hbar\omega,\ m_\Phi = \frac{\varepsilon_\Phi}{c^2} = \frac{\hbar\omega}{c^2},\ p_\Phi = m_\Phi c = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}. \qquad (4.1)$$

Сөйтіп жарық фотонының импульсы мен жарық толқыны ұзын-дығы арасындағы байланыс $\hbar$ Планк тұрақтысы арқылы өрнектеледі.

Француз ғалымы Луи де Бройль (1892-1987) жарықтың осы кор-пускулалық-толқындық табиғаты жөніндегі түсініктерді дамыта келе, 1924 ж. корпускулалық-толқындық дуализм тек оптикалық құбылыс-тарға тән ерекшелік емес, ол барлық микродүние физикасында жан-жақты қолданылуға тиіс деген батыл жорамал ұсынды.

Бөлшектердің корпускулалық және толқындық қасиеттерін сипат-тайтын шамаларды байланыстыратын математикалық өрнектер дәл фотондардікі (4.1) сияқты. Сонымен қозғалыстағы кез келген бөлшекпен бір толқындық процесс байланысқан болады.

$$E = \hbar\omega,\ \vec{p} = \hbar\vec{k} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}. \qquad (4.2)$$

Оптикалық құбылыстар жағдайында (4.1) өрнек фотон импульсын анықтау үшін пайдаланылады; фотон-тыныштық массасы нөлге тең, c жарық жылдамдығымен қозғалатын бөлшек. Осы қатынас, де-Бройльша, зат бөлшектеріне салыстырылатын жазық монохромат толқын ұзындығын береді:

$$\lambda = 2\pi\cdot\hbar / p = 2\pi\hbar/(m\upsilon). \qquad (4.3)$$

Тыныштық массасы нөл емес бөлшектер үшін $p=m\upsilon$. (4.2) өрнек-тері **де-Бройль теңдеулері** деп аталады. (4.3) өрнегімен анықталатын толқын ұзындығы **де-Бройль толқын ұзындығы** деп аталады.

Де Бройль толқын ұзындығын энергияның функциясы ретінде табалық. Егер U потенциалдар айырмасы әсерінен электрон υ жылдам-дыққа ие болса, онда оның $\vec{p}$ импульсы

$$p = m\upsilon = \sqrt{2eUm}$$

тең болады. Осы электронмен де Бройль толқыны байланысқан, оның толқын ұзындығы

$$\lambda = 2\pi\cdot\hbar / p = 2\pi\cdot\hbar/\sqrt{2eUm}. \qquad (4.5)$$

Электрон энергиясы E=100 *эВ* болсын. Осындай электрон үшін де Бройль толқын ұзындығын есептейік. Электрон жылдамдығы мына теңдіктен $eU=m\upsilon^2/2$ анықталады:

$$\upsilon = 5{,}93\cdot10^5\sqrt{U} = 5{,}93\cdot10^6\,м/с,$$

ал толқын ұзындығы

$$\lambda = \frac{2\pi\cdot\hbar}{m\upsilon} = \frac{6{,}62\cdot10^{-34}}{9{,}1\cdot10^{-31}\cdot5{,}93\cdot10^6} = 1{,}2\cdot10^{-10}\,м = 0{,}12\ нм.$$

Яғни жоғарыда көрсетілгендей энергиясы бар электронның толқын ұзындығы рентген сәулелерінің толқын ұзындығымен шамалас болады. Осыдан егер де-Бройль жорамалы дұрыс болса, онда электрондар дифракциясы рентген сәулелерінің дифракциясына ұқсас кристалдық торларда байқалуға тиіс. Де Бройль жорамалы тәжірибе жүзінде дәлелденді. Енді осы тәжірибелерді қарастырайық.

4.1. Зат бөлшектері толқындық қасиеттерінің тәжірибеде расталуы

Микробөлшектердің толқындық қасиеттерін тексеруге арналған эксперименттер баяндалады.

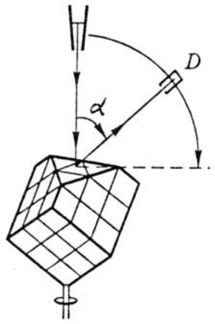
4.1.1 Дэвиссон және Джермер тәжірибелері

Бөлшектердің толқындық қасиеттері анық байқалған тәжірибелерге америка физиктері К.Дэвиссон (1881-1958) және Л.Джермер (1896-1971) тәжірибелері жатады (1927 ж.).

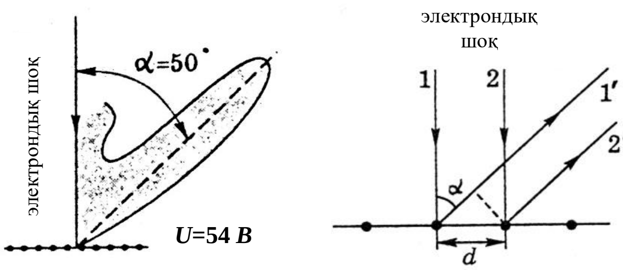
1.Тәжірибе схемасы 4.1-суретте көрсетілген. α=50^0 және үдет-кіш кернеу U=54 B болғанда шағылған электрондардың әсіресе айқын максимумы байқалған; ол полярлық диаграмма түрінде 2.6а-суретте көрсетілген.

Осы максимумды мына формулаға сәйкес

$$d\sin\alpha=\lambda. \tag{4.6}$$



4.1-сурет



а б

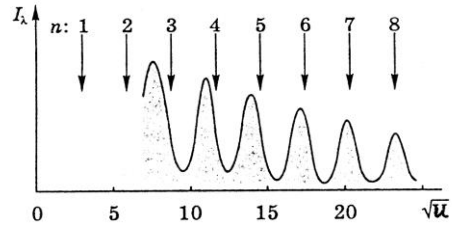
4.2-сурет

d периоды жоғарыда келтірілген жазық дифракциялық тордан алынған бірінші интерференциялық максимум ретінде түсіндіруге болады; бұл 4.2б-суретте көрінеді. Осы суреттегі әрбір қара ноқат сурет жазықтығына перпендикуляр түзу бойында орналасқан атомдар тізбегінің проекциясын береді. *d* периодты тәуелсіз жолмен, мысалы, рентген сәулелерінің дифракциясы бойынша анықтап алуға болады.

(4.5) формула бойынша есептелінген *U=54 В* үшін дебройльдық толқын ұзындығы 0,167 нм-ге тең. Осыған сәйкес (4.6) формуладан табылған толқын ұзындығы болса, ол 0,165 нм-ге тең. Осы дәл келуден алынған нәтижені де Бройль жорамалының расталуы ретінде қабылдау керек.

2. Дэвиссон және Джермердің басқа тәжрибелерінде α түсу бұрышын тұрақты етіп (демек, $\theta=const$) алып, *U* үдеткіш кернеудің әртүрлі мәндерінде шағылған электрондық шоқтың *I* интенсивтігі өлшенген.

Теориялық тұрғыдан осы жағдайда рентген сәулелерінің кристал-дан шағылуына ұқсас интерференциялық шағылу максимумдары байқалуы тиіс. Тәжірибе кезінде θ және *d* мәндері тұрақты етіліп алынатындықтан (4.6) формуласынан



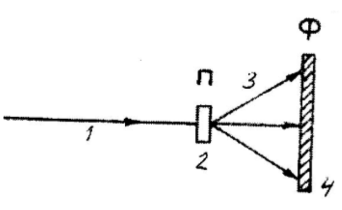
4.3-сурет

$$U^{1/2} = n\frac{1,226}{2d\sin\theta} \approx n\,, \tag{4.7}$$

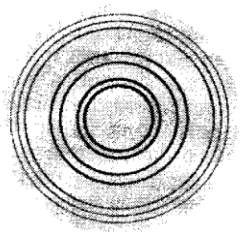
болатындығы шығады, яғни шағылу максимумдары пайда болатын $\sqrt{U_n}$ мәндері $n=1,2,\ldots$ бүтін сандарына пропорционал, басқаша айтқанда, бір-бірінен бірдей қашықтықтарда болулары тиіс, мұнда *U* Вольтпен, ал *d* нанометрмен алынған.

4.3-суретте Дэвиссон мен Джермердің никель монокристалымен жүргізген ($\theta=80^\circ$, $d=0,203$ *нм*) тәжірибелерінде алынған қисық келтірілген.

4.2.3. Томсон және Тартаковский тәжірибелері



4.4-сурет



4.5-сурет

Рентген сәулелері үшін Дебай және Шеррер ұсынған әдісті қолданып, Дж.Томсон және С.Тартаковский (1928 ж.) жұқа поли-кристалдық пленкалар арқылы электрондар өткенде пайда болатын дифракциялық көрініс дәл Дебай-Шеррер рентгенограммалары сияқты болатындығын көрсетті. Тәжірибе схемасы 4.4-суретте кескінділген.

Шапшаң электрондардың (1) жіңішке шоғы жұқа (2) поликрис-талдық пленканы атқылайды. Дифракцияланған (3) электрондар шоғы (4) фотопластинкаға түседі. Сонда бұл пластинканың бетінде орталығында тұтасқан дағы бар бірнеше концентрлік шеңберлер (сақиналар) түріндегі көрініс пайда болады. Осы электронограмма 4.5-суретте көрсетілген.

Сөйтіп Дж.Томсон тәжірибелерінің нәтижелері электронның толқындық табиғаты жөніндегі де Бройль гипотезасының дұрыс екендігін көрсетеді.

4.1-кесте

Металл	Тордың тұрақтысы *d*, нм	
	рентген сәулесі	электрондық шоқ
Al	0,405	0,406-0,400
Au	0,406	0,418-0,399
Pb	0,492	0,499

Дж.Томсон тәжірибесінде шапшаң электрондар шоғы пайдалан-ғандығы айтылған болатын. Ал орыс физигі П.С.Тартаковский баяу қозғалатын электрондар шоғын жұқа слюда, алюминий пленкадан өткізіп, жоғарыда айтылғандай дифракция құбылысын байқады. Сонымен тәжірибе жүзінде электронның толқындық табиғаты толық дәлелденді.

4.2.4. Молекулалық шоқтармен жүргізілген тәжірибелер

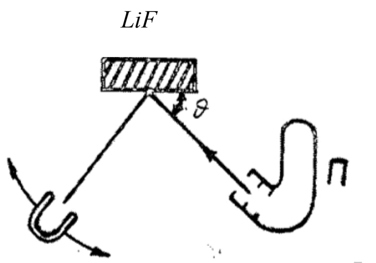
Де Бройль жорамалына сәйкес кез келген материялық бөлшек-тердің, соның ішінде атомдар мен молекулалардың толқындық қасиеттері болуға тиіс. 1929 ж. Штерн және оның қызметкерлері жүргізген тәжірибелері де Бройль жорамалының нейтрал атомдар (He) мен молекулалар (H_2) үшін дұрыс екендігін көрсетті.

Молекуланың де Бройль толқын ұзындығын бағалау үшін формула:

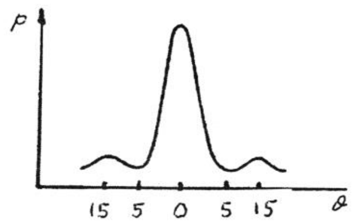
$$\lambda \cong 2\pi\hbar \Big/ \sqrt{2kTM}\ . \qquad (4.8)$$

Осы өрнектегі универсал тұрақтыларды сандық мәндерімен алмастырамыз, сонда

$$\lambda \cong 3{,}04 \Big/ \sqrt{TM}\ ,\ нм. \qquad (2.12)$$



4.6-сурет



4.7-сурет

Мысалы, H_2 жағдайында M=2m_p болады; m_p – протон массасы. Егер T=300 K болса, онда λ≈0,1 *нм*. Осы мысалдан жеңіл атомдар немесе молекулалар үшін де Бройль толқын ұзындығы кристалдық тордың атомдық жазықтарының аралығымен шамалас екендігі көрінеді. Сондықтан тәжірибенің сәтті болатынына үміттенуге болады. Осылай болды да: тәжірибелерде атомдар мен молекулалар-дың толқындық қасиеттері байқалды. Штерн тәжірибелерінің схемасы 4.6-суретте көрсетілген.

T температурадағы пештен шығатын атомдар немесе молекулалар ағыны *LiF* кристалының бетіне ϑ бұрышпен түсіп, шашыраған.

Сутегі молекуласының дифракциясы да *LiF* кристалында байқалды. Сутегі молекуласы үшін интенсивтіліктің таралу қисығының түрі 4.7-суреттегідей болды. Тәжірибе нәтижелері де де Бройль формуласымен жақсы үйлесті.

Сонымен тәжірибе жүзінде толқындық қасиеттер тек электронның ерекшелігі емес, дәл осындай дәрежеде атом және молекулаларға тән қасиет екендігі көрсетілді.

Шредингер теңдеуі. Кванттық теориядағы күй түсінігі және оны толқындық функция арқылы бейнелеу. Суперпозиция принципі. Шредингер теңдеуі. Стационар күйлер. Кванттaлу. Операторлар жайында.

1.1. Бөлшек күйін кванттық механикада бейнелеу

Жүйесінің кванттық күйін бейнелейтін толқындық функция қасиеттері және оны нормалау; суперпозиция принципі талқыланады.

Классикалық физикада бөлшектің күйі деген ұғымның анықтамасы былай беріледі. Егер берілген уақыт мезетінде бөлшектің x, y, z координаттары және жылдамдығының υ_x, υ_y, υ_z құраушылары белгілі болса, онда (осы шамалар толығымен) бөлшек күйі анықталған делінеді. Яғни классикалық бөлшек күйі берілген уақыт мезетіндегі бөлшектің $\vec{r}$ радиус-векторы және $\vec{\upsilon}$ жылдамдығымен анықталады.

Кванттық механикада бөлшек күйінің берілуі классикалық механикаға қарағанда өзгеше болуға тиіс. Микробөлшектер үшін анықталмағандық қатынастарының болуынан бөлшектің күйін координаттар мен импульс арқылы классикалық анықтау жалпы алғанда мағынасын жояды. Корпускулалық-толқындық дуализмге сәйкес кванттық теорияда бөлшектің күйі $\psi(\vec{r}\ , t)$ функциясымен беріледі, ол комплекс шама және формальды түрде толқындық қасиеттерге ие.

Толқындық функцияның (пси-функцияның) физикалық мағынасын ұғыну микробөлшектердің интерференциясында бөлшектер жүйесі емес, жеке бөлшектің толқындық қасиеттері білінетіндігі айқындал-ғаннан кейін мүмкін болды. Осы деректі, (жеке бөлшектің толқындық қасиетін) М.Борн идеясы бойынша (1926) тек былайша түсіндіруге болады. Кез келген әрбір жеке микробөлшектің қозғалысы статисти-калық (ықтималдық) заңдылықтарға бағынады. Осы қозғалысты си-паттайтын ықтималдықтардың үлестірілуі бөлшектердің жеткілікті көп саны тіркелгеннен кейін ғана білінеді. Осы үлестірілу толқын интенсивтігінің үлестірілуі қандай болса, дәл сондай болып шығады екен: толқын интенсивтігі үлкен болатын жерлерде бөлшек көп тіркеледі, ал интенсивтік аз жерге бөлшек те аз түседі.

Кванттық жүйелердің статистикалық қасиеттеріне байланысты осы жүйелерде өтетін көптеген оқиғаларды дәл болжау мүмкін болмайды. Сондықтан кванттық теорияда ақиқат болжам айтуға болмайтын оқиғалардың ықтималдықтары анықталады. Ықтималдықтары бойынша физикалық шамалардың кездейсоқ орташасын мәндерінің, яғни тәжірибеде зерттелетін параметрлерді есептеп табуға болады. $\psi(\vec{r}\,,t)$ толқындық функция міне осы барлық ықтималдықтарды табуға мүмкіндік беретін шама болып табылады.

Барлық кванттық ықтималдықтар ішінен бөлшектердің коорди-наттарының үлестірілуін бейнелейтін ықтималдықты қарастырайық. Бір өлшемді қозғалыс үшін бөлшектің t уақыт мезетінде x және $x+dx$ нүктелері аралығында болу ықтималдығы $|\psi(x,t)|^2dx$-қа тең, мұндағы $|\psi(x,t)|^2=\psi^*(x,t)\,\psi(x,t)$ – толқындық функция модулінің квадраты, ψ^* – комплекс түйіндес функция.

$$w(x,t)=|w(x,t)| \qquad (5.1)$$

шамасы ықтималдық тығыздығы, немесе бөлшек координаттарының үлестірілу тығыздығы. Ықтималдық тығыздығы тәжірибеде бақыла-натын физикалық шама болып табылады, ал толқындық функцияның өзі, комплексті болғандықтан, бақылауға келмейтін шама. Бұл кванттық механикада күйлерді бейнелеудің классикалық механикаға қарағанда тағы бір өзгешелігі; классикалық механикада күйді бейнелейтін шамалар бақыланады.

Ықтималдық тығыздығы нормалау шартына бағынады:

$$\int_{-\infty}^{\infty} w(x,t)dx=\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,t)|^2dx=1\ , \qquad (5.2)$$

бұл шарт бөлшектің $\boldsymbol{x}$ осінде болуы ақиқат екендігін өрнектейді.

$\psi(x,t)$ толқындық функция көмегімен координаттың орташа мәні былай анықталады:

$$\langle x(t)\rangle=\int_{-\infty}^{\infty} xw(x,t)dx=\int_{-\infty}^{\infty} x|\psi(x,t)|^2dx\ .$$

Координаттың орташа мәнінің уақытқа тәуелділігін толқындық функция береді.

Ал бөлшектің кеңістіктегі (үш өлшемді) қозғалысы үшін бөлшек күйі әрбір t уақыт мезетінде бөлшектің x, y, z координаттарының, $\psi(x, y, z, t)$ немесе $\boldsymbol{r}$ радиус-векторының

$\psi(x, y, z, t)= \psi(r, t)$ комплекс толқындық функциясымен беріледі.

$\psi(r,\ t)$ толқындық функцияның физикалық мағынасы бір өлшемді жағдайға толығынан ұқсас тағайындалады.

Толқындық функция, оның физикалық мағынасынан келіп шығатын белгілі шарттарды қанағаттандыруға тиіс. Ол координат пен уақыттың үздіксіз функциясы болуы тиіс. Толқындық функция бір мәнді және шектелген болуға тиіс. Осы математикалық талаптар жиынтығы **үлгі шарттар** деп аталады және нақты физикалық шарттарға сәйкес келеді: бөлшектің берілген орында болу ықтималдығы бір нүктеден келесі нүктеге біртіндеп өзгеруге (үздіксіздік), берілген нүкте үшін нақты (бір мәнділік), шектелген болуға тиіс.

Егер бөлшектің кеңістіктің көлемі V белгілі аймағында ғана қозғалатыны белгілі болса, онда осы аймақта оның табылу ықтималдығы 1-ге тең болады. Белгілі аймақта бөлшектің табылу ықтималдығы толқындық функция модулі квадратының аймақ көлемі бойынша алынған интегралы. Демек, бөлшекті табуға болатын аймақтың бүкіл көлемі бойынша алынған (5.3) интегралы 1-ге тең болуға тиіс.

Суперпозиция принципі.Сонымен пси-функцияның өзі емес, оның $|\psi|^2$ модулінің квадраты немесе $\psi\psi^*$ тікелей физикалық мағынаға ие. Осыған қарамастан кванттық теорияда тәжірибеде бақы-ланатын $|\psi|^2$ емес, ψ – функция пайдаланылады. Бұл микробөлшек-тердің толқындық қасиеттерін – интерференция мен дифракцияны – түсіндіру үшін қажет. Мұндағы жағдай толқындық теорияда қандай болса, дәл сондай болады. Толқындық теорияда толқындық өрістердің интенсивтіктерінің суперпозиция принципі емес, толқындық өрістердің өздерінің суперпозиция принципі қабылданады. Бұл теорияға интерференция және дифракция құбылыстарын ендіруге мүмкіндік береді.

Осыған ұқсас кванттық теорияда негізгі постулаттардың бір ретінде пси-функцияның суперпозиция принципі қабылданылады. Егер қандайда бір жүйеде ψ_1 және ψ_2 күйлері мүмкін болса, онда ол үшін мынадай күй де мүмкін болады:

$$\psi=a_1\psi_1+a_2\psi_2\,, \qquad (5.4)$$

мұндағы a_1 және a_2 – қайсыбір тұрақты коэффициенттер. Осылай ψ-ді тауып, бұдан кейін жүйенің осы күйде $\psi\psi^*$ болу ықтималдығының тығыздығын да анықтауға болады.

Суперпозиция принципі тікелей тексеруге келмейді, өйткені толқындық функция тәжірибеде өлшенбейді, оның модулінің квадратын ғана өлшеуге болады. Күйлердің суперпозиция принципінің дұрыстығы бұдан туындайтын салдардың тәжірибемен сәйкес келуімен расталады.

1.2. Шредингер теңдеуі

Шредингер теңдеуінің қолданылу жағдайлары, меншікті мәндер мен меншікті функциялардың физикалық мағынасы талқыланады.

Классикалық механикада күш және өріс әсерінен қозғалатын бөлшектің координаттары мен импульстарының бұрынғы және болашақ мәндерін қозғалыс теңдеуі арқылы бірмәнді анықтауға болады (егер бұлардың қайсыбір уақыт мезетінде мәндері берілген болса). Ал микробөлшектер үшін бұл әдіс қолдануға келмейді.

Сонда бөлшек қозғалысын бейнелеу үшін ψ толқындық функция пайдаланылады. Ендігі негізгі мәселе ψ толқындық функцияның кеңістіктегі және уақыт бойынша өзгерісін бейнелейтін жалпы заңды, немесе толқындық өрістің қозғалыс заңын тағайындау болып табылады.

Зат бөлшектерінің толқындық қасиеттері жайындағы де Бройль идеясын дамыта келе, австрия физигі Э.Шредингер (1887-1961) өзінің атақты теңдеуін ұсынды (1926). Осы теңдеу әр түрлі күш өрістерінде қозғалатын бөлшектің толқындық функцияларын табуға мүмкіндік береді. Шредингер теңдеуі былай жазылады:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+U\psi\ , \qquad (5.5)$$

мұндағы m – бөлшек массасы, i – жорамал бірлік ($\sqrt{-1}$), U – бөл-шектің потенциалдық энергиясы, $\Delta\equiv\nabla^2$ – Лаплас операторы. (5.5) теңдеуінен толқындық функцияның түрін U функция, яғни түптеп келгенде бөлшекке әсер ететін күштердің сипаты анықтайтындығы шығады.

Шредингер теңдеуі қорытылып шығарылмайды. Оны бастапқы негізгі ұйғарым деп қарастыру керек. Шредингер теңдеуінің дұрыстығы теория нәти-желерінің эксперимент деректерімен толық үйлесуімен, және де практикада қолданыс тапқан, мысалы, мазерлерде, лазерлерде, жартылай өткізгішті қондырғыларда және т.т. көптеген болжаула-рымен расталады.

Стационарлық күйлер. Кванттық теорияда ерекше рольді стационарлық күйлер атқарады, бұларда барлық бақыланатын физикалық шамалар уақыт өткенде өзгермейді.

ψ-функцияның өзі негізінде бақыланбайды. Стационарлық күйлерде ол мына түрге келеді

$$\psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})e^{-i\omega t},\omega=E/\hbar\ , \qquad (5.6)$$

мұндағы $\psi(\vec{r})$ – функция уақытқа тәуелді емес.

ψ-функция осылай өрнектелгенде w ықтималдық тығыздығы тұрақты болып табылады. Шынында да

$$w=\psi\psi^*=\psi(\vec{r})\psi^*(\vec{r})\ , \qquad (5.7)$$

яғни w ықтималдық тығыздығы уақытқа тәуелді емес.

Стационарлық күйлердегі $\psi(\vec{r})$-функцияны табу үшін (5.6) өрнекті (5.5) теңдеуіне қоямыз, сонда мына теңдеу шығады:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+U\psi=E\psi\ . \qquad (5.8)$$

Бұл теңдеу **стационарлық күйлер үшін Шредингер теңдеуі** деп аталады. (5.5) теңдеуін Шредингердің жалпы теңдеуі дейді.

Бұдан былай тек (5.8) теңдеуімен істес боламыз және ол мына түрде жазылады:

$$\Delta\psi+-\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U(\vec{r})\right]\psi=0\ . \qquad (5.9)$$

Шредингер теңдеуі берілген күйдің толқындық функциясын табуға, демек кеңістіктің әр түрлі нүктелерінде бөлшектің болу ықтималдығын анықтауға мүмкіндік береді.

Кванттау. Бордың теориясында кванттау жасанды түрде ендірілген болса, Шредингер теориясында ол өзінен-өзі шығады. Сонда (5.9) теңдеуінің шешімдері ішінен физикалық мағынаға **табиғи** немесе **үлгі (стандарт) шарттарды** қанағаттандыратын шешімдері ғана ие болатынын ескеру жеткілікті болады. Осы шарттарға сәйкес барлық кеңістікте $\psi(\vec{r})$-функция шектелген, бір мәнді, үздіксіз болуы тиіс. Бұл дифференциалдық теңдеудің ізделіп отырған шешіміне қойылатын әдеттегі математикалық талаптар болып табылады.

Осы шарттарды қанағаттандыратын шешімдер E энергияның кейбір мәндерінде ғана мүмкін болады екен. Бұларды **меншікті мәндер** деп, ал энергияның осы мәндерінде (5.9) теңдеуінің шешімдері болып табылатын $\psi(\vec{r})$-функциялары E-нің меншікті мәндеріне сай **меншікті функциялар** деп аталады. Кванттаудың табиғи және жалпы принципі осы.

E-энергияның меншікті мәндері тиісті стационарлық күйлерге сай энергияның мүмкін мәндері ретінде қабылданады. E-энергияның осы мәндері **дискретті** немесе **үздіксіз энергетикалық спектр** түзіп **дискретті** (кванталған) немесе **үздіксіз** болуы мүмкін.

Осы теңдеуді тұжырымдап, Шредингер оны бірден сутегі атомына қолданды. Сонда энергия деңгейлерінің спектрі үшін Бордың теория-сында алынған спектрмен дәл келетін, демек, бақылау нәтижелерімен дәл келетін спектр алды.

Релятивтік емес механикада динамиканың негізгі теңдеуі (Ньютонның 2-заңы) қандай роль атқаратын болса, Шредингер теңдеуі кванттық теорияда сондай роль атқарады.

5.3. Физикалық шамалардың операторлары жайындағы түсінік

Оператор. 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 ˆ 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:

$$\hat{L}\psi(x) = \varphi(x). \tag{4.10}$$

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

Кванттық механикада күйлердің суперпозиция принципі қанғат-тандырылуы үшін тек сызықтық операторлар қолданылады. Және кез келген сызықтық оператор емес, тек өзара түйіндес, немесе эрмиттік операторлар қолданылады.

Оператор 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:

$$\left(\hat{A} \pm \hat{B}\right)\psi = \hat{A}\psi \pm \hat{B}\psi. \tag{4.11}$$

$\hat{A}$ және $\hat{B}$ операторларының көбейтіндісі $\hat{A} \cdot \hat{B} = \hat{C}$ былайша анықталады:

$$\hat{C}\psi = \hat{A} \cdot \hat{B}\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi). \tag{4.12}$$

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

Егер $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ (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, $\dfrac{d}{dx}$ және ***x*** операторлары коммутир-ленбейді.

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

Егер $\hat{L}$ оператор мына шарттарды

$$\hat{L}(c\psi) = c\hat{L}\psi,\ \hat{L}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{L}\psi_1 + c_2\hat{L}\psi_2 \tag{4.13}$$

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 сызық оператор болады.

Егер мына теңдік

$$\int \psi_1^*(x)(\hat{L}\psi_2(x))dx = \int \psi_2(x)(\hat{L}^*\psi_1^*(x))dx \tag{4.14}$$

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.

Кванттық механикада сызықтық және өзара түйіндес (эрмиттік) операторлар қолданылады. Өйткені суперпозиция принципі оператор-дың сызықтық болуын талап етеді. Ал физикалық шаманың мәндері тек нақты сандар болатындықтан, оператор эрмиттік болуы тиіс.

Оператордың меншікті мәндері және меншікті функциялары. Нөлден өзгеше функция оператор әсерінен кейін, жалпы басқа функция алынады; бірақ оператор әсері 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:

$$\hat{L}\psi = L\psi. \tag{4.15}$$

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 (4.15) 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. Потенциалдық өрісте қозғалатын бөлшек үшін Шредингер теңдеуін жазайық:

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

Кванттық механиканың негізгі постулаттары.

1-постулат. 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.

2-постулат. $\hat{L}$ операторымен кескінделетін қайсыбір динами-калық айнымалының сан мәнін өлшегенде, $\hat{L}$ операторының меншікті мәні болып табылатын λ_1, λ_2, ... сандарының бірі белгілі ықтималдықпен алынады.

3-постулат. ψ толқындық функция бейнелейтін кез-келген күйде L динамикалық айнымалы шамасының математикалық күтуі, толқындық функция нормаланған жағдайда, мына формуламен өрнектеледі:

$$<L>=\int\psi^*\hat{L}\psi dV . \qquad (5.16)$$

Бұл постулат ықтималдық теориясының математикалық күтулерге (орташаға) қатысты негізгі қағидаларын қанағаттандырады. Функция белгілі болса, онда (5.16) формуланы пайдаланып, әрқашан барлық механикалық шамалардың орташа мәндерін көрсете аламыз. Сонымен кванттық механикада біз қозғалысты толық, бірақ тек статистикалық түрде сипаттай аламыз.

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 ***x***-қа көбейтуге саяды*:*

$\hat{x}$ *f(x)= xf(x)*. Сонымен, $\hat{x}$ =*x*. Осылай болғандықтан координаттың орташа мәні (5.16) формуласына сәйкес былай анықталады:

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

бұл ***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

$$\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\equiv-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\equiv-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 \qquad (5.17)$$

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:

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

Кванттық механикада H функциясына $\hat{H}$ оператор сәйкес келтірілуге тиіс. Осы оператор H өрнегіне

p орнына $\hat{p}$ оператор қою нәтижесінде алынады:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})\,. \tag{5.18}$$