ი. ვაშაკიძე, ვ. მამასახლისოვი, გ. ჭილაშვილი

5/12

კვანტური მექანიკა

მეორე შევსებული და გადამუშავებული გამოცემა

თბილისის უნივერსიტეტის გამომცემლობა
თბილისი 1978

530.145
ვ 251

სახელმძღვანელოში ფართოდაა განხილული როგორც ერთი ნაწილაკის, ისე ნაწილაკთა სისტემის კვანტური მექანიკა და ელექტრონის რელატივისტური კვანტური მექანიკა.

წიგნი განკუთვნილია სახელმძღვანელოდ ფიზიკის ფაკულტეტის სტუდენტებისათვის.

20402
В―――――――― 1—78
М 608(06)-78

ᲛᲔᲝᲠᲔ ᲒᲐᲛᲝᲪᲔᲛᲘᲡ ᲬᲘᲜᲐᲡᲘᲢᲧᲕᲐᲝᲑᲐ

წიგნი წარმოადგენს მეორე შევსებულ და გადამუშავებულ გამოცემას. პირველი გამოცემიდან გავიდა თითქმის ორი ათეული წელი. მართალია, ამ ხნის განმავლობაში კვანტურ მექანიკაში არსებითი ცვლილებები არ მომხდარა, მაგრამ დაიხვეწა მისი აპარატი და მთელი რიგი ფუნდამენტური საკითხების გადმოცემის მეთოდიკა. გარდა ამისა, აღნიშნულ დისციპლინაში გამოქვეყნდა მაღალმეცნიერულ დონეზე დაწერილი მრავალი ნაშრომი. აქედან გამომდინარე, სახელმძღვანელოს ბევრი თავი და პარაგრაფი ან თავიდან დაიწერა, ანდა არსებითად გადამუშავდა.

წიგნი დაწერილია იმ ვარაუდით, რომ შესაძლებელი იყოს ზოგიერთი საკითხის ან საკითხთა ჯგუფის გამოტოვება. ამას დიდი მნიშვნელობა აქვს, რამდენადაც სხვადასხვა სპეციალობის სტუდენტები ამ საგანს სხვადასხვა მოცულობის პროგრამით სწავლობენ.

სახელმძღვანელოზე მუშაობისას თვალწინ გვედგა ჩვენი მასწავლებლისა და თანაავტორის ვ. მამასახლისოვის ნათელი სახე, რომელიც, სამწუხაროდ, ვერ მოესწრო ამ წიგნის ხელახალ გამოცემას.

ი. ვაშაკიძე, გ. ჭილაშვილი

პირველი გამოცემის წინასიტყვაობა

წინამდებარე კვანტური მექანიკის სახელმძღვანელოს დაწერას საფუძვლად დაედო ლექციების კურსი, რომელიც ორ ათეულზე მეტი წელია იკითხება თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის ფიზიკის ფაკულტეტზე პროფ. ვ. ი. მამასახლისოვის, ბოლო დროს კი, მისი მოწაფეების — დოც. ი. შ. ვაშაკიძისა და დოც. გ. ა. ჭილაშვილის მიერ.

კურსი შეესაბამება იმ პროგრამას, რომელიც დამტკიცებულია სახელმწიფო უნივერსიტეტების ფიზიკისა და ფიზიკა-მათემატიკის ფაკულტეტებისათვის. ამ სახელმძღვანელოსათვის დამახასიათებელია ის, რომ მასში ფართოდაა განხილული როგორც ერთი ნაწილაკის, ისე ნაწილაკთა სისტემის კვანტური მექანიკა და ელექტრონის რელატივისტური კვანტური მექანიკა.

წიგნის ხარისხის მნიშვნელოვნად გაუმჯობესებას ხელი შეუწყო პროფ. გ. რ. ხუციშვილისა და პროფ მ. მ. მირიანაშვილის შენიშვნებმა, რომლებმაც ყურადღებით წაიკითხეს მთელი წიგნი. ავტორები მათ ულრმეს მადლობას უცხადებენ. მადლობას მოვახსენებთ აგრეთვე ასპირანტ გ. ნიკობაძეს, რომელმაც გადაათვალიერა ხელნაწერის დიდი ნაწილი.

წინამდებარე კვანტური მექანიკის კურსი პირველი სახელმძღვანელოა ქართულ ენაზე და ამიტომ, ბუნებრივია, დაზღვეული არ იქნება ნაკლისაგან. ავტორები სიამოვნებით მიიღებენ მკითხველთა უმნიშვნელო შენიშვნასაც კი, რომელიც დაეხმარება მათ წიგნის ხარისხის შემდგომ გაუმჯობესებაში.

ნაშრომის გამოსვლა ქართულ ენაზე გაამართლებს თავის მიზანს, თუ ნაწილობრივ მაინც შეავსებს იმ ხარვეზებს, რომლებსაც სისტემატურად აქვთ ადგილი კვანტური მექანიკის საფუძვლების შესწავლის დროს და ხელს შეუწყობს ქართველი ახალგაზრდების მომზადების დონის ამაღლებას თანამედროვე ფიზიკის ამ მეტად მნიშვნელოვან დარგში.

შესავალი

XX საუკუნის დასაწყისისათვის ფიზიკა თავისი განვითარების გზაზე სერიოზულ სიძნელეებს წააწყდა. სიძნელეთა ერთი ჯგუფი შეეხებოდა სინათლის ყოფაქცევას. აღმოჩნდა, რომ სინათლის სიჩქარე არ არის დამოკიდებული არც დამკვირვებლისა და არც სინათლის წყაროს მოძრაობაზე. სინათლის ასეთი თვისებები ვერ აიხსნა კლასიკური ფიზიკით და ამიტომ საჭირო გახდა იმ ზოგადი დებულებების გადასინჯვა, რომლებზე დაყრდნობითაც ჩამოყალიბებული იყო კლასიკური ფიზიკა.

რადგანაც ყოველი მოძრაობა წარმოადგენს სხეულის მდებარეობის შეცვლას სივრცესა და დროში, ამიტომ ბუნებრივია, კლასიკური ფიზიკის ძირითადი დებულებებიც დროისა და სივრცის თვისებებს შეეხებოდა. კლასიკური ფიზიკა უშვებდა, რომ სივრცე არის აბსოლუტური, დრო კი უნივერსალური. ამასთან, სივრცის აბსოლუტურობა ნიშნავს შემდეგს: რომ ავიღოთ ორი იდეალურად მყარი ღერო, რომლებიც სივრცის ერთ რომელიმე ადგილას ტოლი არიან, მაშინ ეს ღეროები ერთმანეთის ტოლი დარჩება მიუხედავად ფარდობითი მოძრაობისა, რომელსაც ერთი ღერო მეორეს მიმართ შეიძლება ასრულებდეს. ასევე დროის უნივერსალურობის ქვეშ იგულისხმება, რომ დროის მსვლელობა არაა დამოკიდებული იმ სხეულების მოძრაობაზე, რომლებშიც ეს დრო დაიმზირება. თუ ავიღებთ ორ იდეალური სიზუსტით მომუშავე საათს და დავუშვებთ, რომ სივრცის ერთი და იგივე ადგილას ეს საათები ერთი და იგივე დროს უჩვენებენ, მაშინ დროის უნივერსალობაში უნდა გავიგოთ ის, რომ ამ საათების ჩვენება ყოველთვის თანხვდენილი იქნება, მიუხედავად ფარდობითი მოძრაობისა, რომელიც ერთმა საათმა შეიძლება შეასრულოს მეორის მიმართ.

არავის არ ეპარებოდა ეჭვი ამ დებულების სისწორეში, სანამ მასზე დამყარებული მექანიკა არ წააწყდა არსებით წინააღმდეგობებს. ამ წინააღმდეგობათა თავიდან აცილება მოხდა სივრცის აბსოლუტურობისა და დროის უნივერსალობის ცნებათა უარყოფის გზით.

ა. აინშტაინმა დაამტკიცა, რომ ნიუტონის მექანიკაში აღებული სივრცის აბსოლუტურობისა და დროის უნივერსალობის ცნებები, საზოგადოდ, სინამდვილეს არ შეესაბამებიან და რომ სივრცე და დრო ფარდობით ხასიათს ატარებს. მანძილი სივრცის ორ წერტილს შორის, ისევე როგორც შუალედი დროის ორ მომენტს შორის, დამოკიდებულია ათვლის სისტემაზე. ორი მოვლენა, რომელიც ერთდროულია ერთ რომელიმე ათვლის სისტემაში, არ არის ერთდროული სხვა ათვლის სისტემაში, რომელიც ნებისმიერად მოძრაობს პირველის მიმართ.

იმ მექანიკას, რომელიც ემყარება სივრცისა და დროის ფარდობითობის დებულებებს, რელატივისტურ მექანიკას უწოდებენ. როგორც ცნობილია, რელატივისტური მექანიკა უფრო ზოგადია და მისგან, როგორც კერძო შემთხვევა, მიიღება ნიუტონის მექანიკა. რელატივისტური მექანიკა გამოიყენება ნებისმიერი სიჩქარე-

ებისათვის, რომლებიც ნაკლებია სინათლის სიჩქარეზე. კლასიკური მექანიკა კი გამოსაყენებელი აღმოჩნდა მხოლოდ ისეთი სიჩქარეებისათვის, რომლებიც გაცილებით ნაკლებია სინათლის სიჩქარეზე. ამასთან, რელატივისტურ მექანიკაში მაქსიმალური სიჩქარე, რომელიც შეიძლება სხეულს გააჩნდეს, ტოლია სინათლის სიჩქარისა. რელატივისტური მექანიკის შექმნამ საშუალება მოგვცა კლასიკური ფიზიკის მთელი რიგი წინააღმდეგობების ახსნისა. მრავალი მოვლენა, რომელიც გაუგებარი იყო კლასიკური მექანიკისათვის, მარტივად აიხსნა რელატივისტური მექანიკით.

მაგრამ ამ პერიოდში აღმოჩენილ იქნა მთელი რიგი ახალი ფაქტებისა, რომლებიც ვერ აიხსნებოდა რელატივისტური მექანიკითაც. ეს ფაქტები ატომის ფიზიკას შეეხებოდა.

XX საუკუნის დასაწყისში დამტკიცებულ იქნა, რომ ატომი შედგება დადებითად დამუხტული ატომგულისაგან, რომლის ირგვლივ მოძრაობს ელექტრონები. სივრცისა და დროის ფარდობითობაზე დამყარებული კლასიკური ელექტროდინამიკა უძლური აღმოჩნდა აეხსნა ატომის მდგრადობის საკითხი. საქმე ისაა, რომ ელექტრონები გულის ირგვლივ მოძრაობენ მრუდხაზობრივად, რის გამოც მათ გააჩნიათ აჩქარება. კლასიკური ელექტროდინამიკის თანახმად კი აჩქარებული მუხტი უნდა ასხივებდეს ენერგიას. ამიტომ კლასიკური ელექტროდინამიკით ელექტრონი ენერგიის განუწყვეტელი კარგვის გამო თანდათან უნდა უახლოვდებოდეს გულს და ბოლოს მას უნდა ეცემოდეს. ექსპერიმენტული დაკვირვებები კი გვიჩვენებს, რომ ატომი საკმარისად მდგრადი სისტემაა და იგი გარედან ჩარევის გარეშე არ იშლება. გარდა ამისა, არსებობს მთელი რიგი სხვა მოვლენებისა ატომის სფეროში, რომლებიც ვერ აიხსნება როგორც ნიუტონის, ისე რელატივისტური მექანიკის თვალსაზრისით.

რადგან რელატივისტური მექანიკა საკმარისი არ აღმოჩნდა ატომური მოვლენების ასახსნელად, ბუნებრივია ვიფიქროთ, რომ კიდევ არსებობს რაღაც დებულება, რომლითაც სარგებლობს ნიუტონის მექანიკა და რომელიც უცვლელად იქნა დატოვებული რელატივისტური მექანიკის ჩამოყალიბების დროს. ამასთან, გასაგებია, რომ მას განსაკუთრებით დიდი მნიშვნელობა უნდა ჰქონდეს ატომური მოვლენების (ე. ი. მიკრო ობიექტების) შესწავლისას, რადგან მისი მცდარობა არ გამომჟღავნდა ისეთი დიდი სხეულების შესწავლის დროს, რომლებთანაც საქმე ჰქონდა აინშტაინის მექანიკას.

როგორც გამოირკვა, ეს დებულება შეეხებოდა ფიზიკური სიდიდის გაზომვის საკითხს. როგორც რელატივისტურ, ისე კლასიკურ ფიზიკაში უშვებდნენ, რომ ნებისმიერი სიდიდე პრინციპულად შეიძლება გაიზომოს რაგინდ დიდი სიზუსტით. თუ დღეს ტექნიკის დონე ისეთია, რომ საზომ იარაღს აქვს გარკვეული Δ ცდომილება, მომავალში, ტექნიკის განვითარებასთან ერთად, ცდომილება თანდათან შემცირდება და ბოლოს ნულს გაუტოლდება. ეს გარემოება ჩვენ შეგვიძლია ასეც გამოვხატოთ: როცა დრო მიისწრაფის უსასრულობისაკენ ($t\to\infty$), მაშინ ცდომილება მიისწრაფის ნულისაკენ ($\Delta\to 0$).

რადგან კლასიკურ მექანიკას საქმე ჰქონდა დიდ (მაკრო) სხეულებთან, გაზომვისას დაშვებული ცდომილება გაცილებით ნაკლები იყო გასაზომ სიდიდესთან შედარებით, ამიტომ, ბუნებრივია, გაზომვისას დაშვებულ ცდომილებებს პრინციპული მნიშვნელობა არ ენიჭებოდათ. მაგრამ როდესაც ფიზიკა გადავიდა მიკრო ობიექტების შესწავლაზე, მდგომარეობა სრულიად შეიცვალა. საქმე ისაა, რომ გაზომვის პროცესი თავისთავად გულისხმობს გასაზომი იარაღისა და გასაზომი ობიექტის ურთიერთქმედებას. რადგან გაზომვას ახდენს ადამიანი, ამიტომ გასაზომი

იარაღი ყოველთვის მაკროსკოპულია (კლასიკურია). გასაზომი იარაღი გაზომვის პროცესში იწვევს ცვლილებებს ან, როგორც ამბობენ, შეშფოთება შეაქვს გასაზომ ობიექტში. მიკრო ობიექტის შემთხვევაში გაზომვის პროცესმა შეიძლება ისეთი დიდი შეშფოთება შეიტანოს, რომ შედეგად მიღებული ცდომილება ისეთივე რიგისა გამოვიდეს, რაც თვით გასაზომი სიდიდე. ამგვარად, ცდომილებას, რომელსაც არსებითი მნიშვნელობა არ ჰქონდა კლასიკურ მექანიკაში, დიდი როლი ენიჭება მიკრო ობიექტების შესწავლის დროს. თუ გასაზომი სიდიდის ზომას აღვნიშნავთ A-თი, მაშინ ჩვენ შეგვეძლო პირიქითაც გვეთქვა, რომ, როცა $\Lambda \gg \Delta$, მაშინ გვაქვს დიდი სხეული, და იგი უნდა შევისწავლოთ კლასიკური მექანიკით, ხოლო როცა გასაზომი ობიექტი იგივე რიგისაა, რაც გაზომვისას დაშვებული ცდომილება, ე. ი. $\Lambda \sim \Delta$, მაშინ ჩვენ საქმე გვაქვს მიკროობიექტთან, რომელიც უნდა შეისწავლებოდეს რაღაც ახალი ტიპის მექანიკით. იბადება კითხვა, ხომ შეიძლება ტექნიკის განვითარებით ცდომილება Δ საკმარისად შემცირდეს და $\Lambda \sim \Delta$ პირობა შეიცვალოს $A \gg \Delta$ პირობით, ე. ი. მიკრო სხეული გახდეს მაკრო სხეული და თუ იგი წინათ კლასიკური მექანიკით არ აიწერებოდა, ახლა უკვე ამ მექანიკას უნდა ემორჩილებოდეს. მაგრამ აღმოჩნდა, რომ თურმე არსებობს გაზომვის ცდომილების ისეთი ზღვრული მნიშვნელობა Δ_0, რომელიც ტექნიკის განვითარებასთან არ არის დაკავშირებული. გამოირკვა, რომ მიკრო სამყაროში ზოგიერთ ფიზიკურ სიდიდეთა წყვილები ერთდროულად და ზუსტად პრინციპულად არ განისაზღვრება. ასეთი ფიზიკური სიდიდეებია არაკომუტატურ ოპერატორთა საკუთარი მნიშვნელობები, რომელთა კერძო შემთხვევასაც წარმოადგენს ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის თანაფარდობა კოორდინატისა და იმპულსისათვის[1]

$$\Delta x \Delta p = 2\pi\hbar, \tag{1}$$

სადაც Δp არის ზღვრული ცდომილება, დაშვებული იმპულსის გაზომვაში, Δx კი ასეთივე ცდომილებაა, დაკავშირებული კოორდინატის გაზომვასთან. როცა $\Delta x = 0$, მაშინ $\Delta p = \infty$ და პირიქით. მნიშვნელოვანია აღვნიშნოთ, რომ ამ ცდომილებებში არ იგულისხმება იარაღის სიზუსტესთან და დამკვირვებელთან დაკავშირებული ცდომილებანი. კოორდინატისა და იმპულსის განუზღვრელობის საკითხი პრინციპული საკითხია და იგი არ არის დაკავშირებული ტექნიკის განვითარებასა და დამკვირვებლის დახელოვნებასთან. კოორდინატისა და იმპულსის ერთდროულად და ზუსტად გაზომვის შეუძლებლობა თვით მიკრო ობიექტების თვისებაა.

როგორც ვხედავთ, დებულება გაზომვის შესახებ მეტად მნიშვნელოვანი ყოფილა და თუ ჩვენ გვსურს ავხსნათ მიკრო სამყაროში მიმდინარე მოვლენები, საჭიროა მისი გათვალისწინებაც.

კლასიკური მექანიკა, გარდა სივრცისა და დროის აბსოლუტურობის დებულებებისა, ემყარებოდა აგრეთვე მესამე დებულებასაც, რომლის თანახმად, პრინციპულად მაინც, შესაძლებელი იყო ყველა ფიზიკური სიდიდის ერთდროულად რაგინდ დიდი სიზუსტით გაზომვა. რელატივისტურმა მექანიკამ შეცვალა პირველი ორი დებულება, ხოლო დებულება გაზომვის შესახებ იგივე დატოვა. მიკრო სხეულებისათვის კი საჭიროა სწორედ მესამე დებულების გადასინჯვა. გასაგებია, რომ მიკრო სხეულების მექანიკის ჩამოსაყალიბებლად გვაქვს ორი გზა: პირველის თანახმად უნდა შეიცვალოს კლასიკური მექანიკის მხოლოდ მესამე დებულება. ამ შემთხვევაში ნათელია, რომ სათანადო მექანიკა, რომელსაც კვანტურ მექანიკას უწოდებენ,

---

[1] $\hbar$ არის პლანკის მუდმივი გაყოფილი 2π-ზე, ე. ი. $\hbar = h/2\pi$. რიცხობრივად იგი ტოლია $\hbar = 1{,}05\ 10^{27}$ ერგი სეკ.

იქნება არარელატივისტური, ე. ი. იგი გამოდგება მხოლოდ მცირე სიჩქარეებისათვის. მეორე შემთხვევაში კი ერთდროულად უნდა შეიცვალოს სამივე დებულება. ამ მექანიკას უწოდებენ რელატივისტურ კვანტურ მექანიკას. ამ უკანასკნელში გათვალისწინებული იქნება როგორც მიკრო სხეულების დამახასიათებელი თავისებურებანი, ისე სივრცისა და დროის ფარდობითობის თვისებებიც.

თუ რელატივისტური მექანიკის ჩამოყალიბება ისე შეიძლება, რომ სულაც არ ვისარგებლებთ კლასიკური მექანიკით, კვანტურ მექანიკას ის დამახასიათებელი თავისებურება აქვს, რომ იგი, ასე ვთქვათ, მოითხოვს კლასიკური მექანიკის არსებობასაც. ამიტომაც კვანტური მექანიკა ჩამოყალიბდა კლასიკური ფიზიკის ანალოგიის გზით.

კვანტური მექანიკის ჩამოყალიბება დაიწყო მას შემდეგ, რაც ლუი დე ბროილის მიერ 1924 წელს აღმოჩენილ იქნა ნივთიერების ორმაგი ბუნება. დე ბროილის თანახმად, არა მხოლოდ სინათლეს ახასიათებს ორმაგი ბუნება, ტალღური და კორპუსკულური, არამედ ნებისმიერ ნივთიერ ნაწილაკსაც. კერძოდ, აინშტაინის ცნობილი ფორმულები, რომლებიც აკავშირებენ სინათლის კორპუსკულების — ფოტონების დამახასიათებელ სიდიდეებს E-ენერგიასა და $\mathbf{p}$ იმპულსს, სინათლის ტალღური ბუნების დამახასიათებელ სიდიდეებთან ω-სიხშირესა და k-ტალღურ ვექტორთან, ე. ი. ფორმულები

$$E = \hbar\omega, \qquad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \tag{2}$$

დე ბროილის მიერ გავრცელებული იქნა ნებისმიერ მიკრო ნაწილაკზედაც.

დე ბროილის ჰიპოთეზის თანახმად, ყოველ მიკრო ნაწილაკს, რომელიც მოძრაობს $\mathbf{v}$ სიჩქარით, უნდა შევუსაბამოთ $ƛ = 1/k = \hbar/p$ ტალღის სიგრძე.

რამდენიმე წლის შემდეგ ცდებით დამტკიცდა, რომ ნივთიერ ნაწილაკთა ნაკადი კრისტალებზე გაფანტვისას ისეთივე დიფრაქციულ სურათს იძლევა, რასაც $ƛ = \hbar/mv$ ტალღის სიგრძის მქონე სინათლის ნაკადი, სადაც m ნაწილაკის მასაა, v კი — მისი სიჩქარე.

დე ბროილის ჰიპოთეზაზე დაყრდნობით ერვინ შრედინგერმა დაწერა კვანტური მექანიკის მოძრაობის განტოლება, რომელსაც შრედინგერის განტოლებას უწოდებენ. ცოტათი უფრო ადრე სხვა მოსაზრებებზე დაყრდნობით კვანტური მექანიკის განვითარებას საფუძველი ჩაუყარა ვერნერ ჰაიზენბერგმა. 1928 წელს კი პოლ მორის დირაკმა შექმნა ელექტრონის რელატივისტური კვანტური მექანიკა. კვანტური მექანიკის დაფუძნებასა და განვითარებაში დიდი როლი შეასრულა ნილს ბორის, მაქს ბორნის, ვოლფგანგ პაულის და სხვათა შრომებმა.

ერთი ნაწილაკის კვანტური მექანიკა

თავი I

კვანტური მექანიკის მოძრაობის განტოლება

ატომური მოვლენების ერთიანი მეთოდით შესწავლის მიზნით საჭიროა კვანტური მექანიკის მოძრაობის განტოლების დაწერა. როგორც ცნობილია, მოძრაობის განტოლების გამოყვანა შეუძლებელია. ფიზიკაში, როგორც წესი, ხდება მოძრაობის განტოლების პოსტულირება კერძო შემთხვევებისათვის ცნობილ კანონზომიერებათა განზოგადების საფუძველზე. იმის გამო, რომ კვანტური მექანიკა კლასიკური მექანიკის ანალოგიის გზით ჩამოყალიბდა, ამ თავში მოძრაობის განტოლების დასაწერად გამოიყენება სწორედ ანალოგია კლასიკურ მექანიკასა და ოპტიკას შორის.

წინამდებარე თავში დაწერილია შრედინგერის მოძრაობის განტოლება, გარკვეულია ტალღური ფუნქციის ფიზიკური შინაარსი, სუპერპოზიციის პრინციპი და ნაჩვენებია, რომ კვანტურ მექანიკაში მდგომარეობის აღწერას აქვს სტატისტიკური ხასიათი.

§ 1. ანალოგია კლასიკურ მექანიკასა და გეომეტრიულ ოპტიკას შორის

ანალოგია კლასიკურ მექანიკასა და გეომეტრიულ ოპტიკას შორის, ჯერ კიდევ კვანტური მექანიკის ჩამოყალიბებიდან დიდი ხნით ადრე, შემჩნეული იყო ჰამილტონის მიერ. ჰამილტონმა მიუთითა, რომ გარეგნულად გეომეტრიული ოპტიკის კანონები ძალიან ჰგავს კლასიკური მექანიკის კანონებს, მაგრამ მან ვერ შეამჩნია მძლავრი შინაგანი კავშირი ამ ორ, ერთი შეხედვით, სხვადასხვა დარგს შორის. აღნიშნულ ანალოგიას ფიზიკური შინაარსი ლუი დე ბროილმა მისცა.

როგორც აღვნიშნეთ, აინშტაინმა აჩვენა, რომ სინათლეს ორმაგი ბუნება ახასიათებს—ტალღური და კორპუსკულური. აინშტაინის თანახმად, სინათლე შეიძლება განვიხილოთ როგორც ნულოვანი უძრაობის მასის მქონე ნაწილაკების (ფოტონების) ნაკადი. ეს მოსაზრება სინათლის ორმაგი ბუნების შესახებ დე ბროილმა განაზოგადა ნივთიერებისათვისაც[1]. მისი აზრით, არა მხოლოდ სინათლეს, არამედ ნებისმიერ ნაწილაკსაც ახასიათებს ორმაგი ბუნება—ტალღური და კორპუსკულური. ამ მოსაზრების უკეთ გარკვევისათვის მოკლედ შევჩერდეთ კლასიკური მექანიკისა და გეომეტრიული ოპტიკის კანონების შედარებაზე და მივიდეთ იმ დასკვნამდე, რომელიც 1924 წელს გააკეთა დე ბროილმა და რომელიც საფუძვლად დაედო თანამედროვე კვანტურ მექანიკას.

[1] L. de Brogle, Dissertation, Mason, Paris (1924); აგრეთვე Phil. Mag. 47,446 (1924)

კლასიკური მექანიკა. განვიხილოთ ერთი ნაწილაკის მოძრაობა დეკარტის მართკუთხა კოორდინატთა სისტემაში. მოძრაობა შეგვიძლია აღვწეროთ ლაგრანჟის მეთოდით. შემოვიღოთ ლაგრანჟის ფუნქცია $L(x, y, z; \dot{x}, \dot{y}, \dot{z}; t)$, სადაც $\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}$ სიჩქარის მდგენელებია. ვთქვათ, ნაწილაკი დროის საწყის $t=0$ მომენტში იმყოფება სივრცის A წერტილში, გარკვეული დროის შემდეგ კი იგი გადავიდა B წერტილში. კლასიკური მექანიკის მიზანია ვიპოვოთ ის გზა, რომლითაც ნაწილაკი A-დან B-წერტილში იმოძრავებს. ნაწილაკი A-დან B-წერტილში შეიძლება გადავიდეს მრავალი შესაძლო გზით. რომელი იქნება მათ შორის ჭეშმარიტი ტრაექტორია? ამ შეკითხვაზე პასუხს გვაძლევს ჰამილტონის უმცირესი ქმედების პრინციპი. შემოვიღოთ ქმედების ფუნქცია. ქმედების ფუნქცია, ან მოკლედ ქმედება, განისაზღვრება ფორმულით

$$S = \int_0^t L(x, y, z, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z}; t)dt. \qquad (1,1)$$

ჰამილტონის პრინციპის თანახმად, ნაწილაკი A-დან B-წერტილში გადასვლისას „აირჩევს“ იმ გზას, რომლის გასწვრივ ქმედების ფუნქციას აქვს ექსტრემალური მნიშვნელობა, ე. ი. როცა ქმედების ვარიაცია ნულის ტოლია: $\delta S=0$. ამ პირობიდან მივიღებთ მოძრაობის ლაგრანჟის განტოლებებს.

საინტერესოა აღვნიშნოთ, რომ, როცა მოცემული გვაქვს ქმედება, მაშინ მისი საშუალებით შეგვიძლია განვსაზღვროთ ნაწილაკის იმპულსიც, სახელდობრ, გვაქვს შემდეგი ფორმულა:

$$\mathbf{p} = \mathrm{grad} S. \qquad (1,2)$$

თუ შემოვიღებთ თანატოლი ქმედების ზედაპირს, ე. ი. ფართეულს, რომელზედაც ქმედებას აქვს ერთი და იგივე მნიშვნელობა

$$S(x, y, z; t) = S_0, \qquad (1,3)$$

მაშინ ნათელია, რომ ნაწილაკის იმპულსი მართობია თანატოლი ქმედების ზედაპირისა. ე. ი. ნაწილაკის ტრაექტორია და ტოლი ქმედების ზედაპირი ურთიერთ ორთოგონალურია. აღსანიშნავია, რომ კლასიკურ მექანიკაში არც ქმედებას და, მაშასადამე, არც თანატოლი ქმედების ზედაპირს არავითარი ფიზიკური შინაარსი არა აქვს. კლასიკურ მექანიკაში ქმედების ფუნქცია მოიძებნება ჰამილტონ-იაკობის განტოლების ამოხსნით. ამ განტოლებას აქვს შემდეგი სახე:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(\mathbf{r}, \nabla S; t) = 0, \qquad (1,4)$$

სადაც H არის ე. წ. ჰამილტონიანი

$$H = \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V(\mathbf{r}, t). \qquad (1,5)$$

$V(\mathbf{r}, t)$ წარმოადგენს პოტენციალურ ენერგიას. როცა ამოცანა სტაციონარულია, მაშინ პოტენციალური ენერგია დროზე არ არის დამოკიდებული და ჰამილტონის ფუნქცია სრულ ენერგიას ემთხვევა $H=E$; ამ დროს ადგილი აქვს ენერგიის შენახვას. ასეთ შემთხვევაში ველს კონსერვატულსაც უწოდებენ. კონსერვატული ველისათვის ჰამილტონ-იაკობის განტოლება ღებულობს სახეს

$$E = -\frac{\partial S}{\partial t}. \qquad (1,6)$$

ე. ი. ენერგიაც ქმედების ფუნქციის საშუალებით განისაზღვრება. (1,6)-ის ამოხსნით ადვილად მივიღებთ დამოკიდებულებას

$$S(\mathbf{r},\ t) = -Et + A(\mathbf{r}). \tag{1,7}$$

$A(\mathbf{r})$-ს შემოკლებული ქმედების ფუნქციას უწოდებენ. ცხადია, რომ სტაციონარულ შემთხვევაში საკმარისია შემოკლებული ქმედების ფუნქციის ცოდნა, რამდენადაც იმპულსისათვის გვექნება

$$\mathbf{p} = \mathrm{grad} S = \mathrm{grad} A, \tag{1,8}$$

ხოლო ჰამილტონ-იაკობის განტოლება მიიღებს $E = H(\mathbf{r},\ \nabla A)$ სახეს ან, რაც იგივეა,

$$(\nabla A)^2 = 2m\,(E - V(r)). \tag{1,9}$$

ადვილი საჩვენებელია, რომ, მაგალითად, თავისუფალი ნაწილაკის ($V = 0$) ქმედების ფუნქციისათვის მივიღებთ გამოსახულებას

$$S(\mathbf{r},\ t) = \mathbf{pr} - Et. \tag{1,9'}$$

საინტერესოა აღინიშნოს, რომ სტაციონარულ შემთხვევაში ჰამილტონის უმცირესი ქმედების პრინციპი დაიყვანება ე. წ. ლაგრანჟ-მოპერტუის პრინციპზე, რომელსაც აქვს შემდეგი გამოსახულება:

$$\delta A = \delta \int_A^B (\mathbf{p}\,d\mathbf{r}) = 0. \tag{1,10}$$

ტალღური ოპტიკა. ჯერ განვიხილოთ ტალღის მოძრაობა ერთგვაროვან გარემოში. თუ რაიმე სიდიდის ცვლილება დამოკიდებულია დროზე და სივრცეზე

$$\psi = \psi(\mathbf{kr} - \omega t) \tag{1,11}$$

სახით, მაშინ ამბობენ, რომ ეს სიდიდე ტალღის სახით ვრცელდება და ψ ფუნქცია, რომელიც საზოგადოდ კომპლექსურიც შეიძლება იყოს, აღწერს ბრტყელ ტალღას. k_1, k_2, k_3 და ω მუდმივებს შორის არსებობს გარკვეული დამოკიდებულება. გამოსახულებას

$$\Theta(\mathbf{r},\ t) = (\mathbf{kr}) - \omega t \tag{1,12}$$

უწოდებენ ბრტყელი ტალღის ფაზას. $\mathbf{k}$-ს ეწოდება ტალღური ვექტორი, ხოლო ω წარმოადგენს სიხშირეს.

$$\Theta(\mathbf{r},\ t) = \Theta_0 \tag{1,13}$$

გამოსახულებას უწოდებენ თანატოლი ფაზის ზედაპირს. შემოვიღოთ აღნიშვნა

$$\Phi(\mathbf{r}) = \mathbf{kr} = k_1 x + k_2 y + k_3 z; \tag{1,14}$$

ამ სიდიდეს უწოდებენ შემოკლებულ ფაზას. აშკარაა, რომ

$$\mathbf{k} = \mathrm{grad}\,\Theta = \mathrm{grad}\,\Phi, \tag{1,15}$$

ე. ი. ტალღური ვექტორი მართობია თანატოლი ტალღის ფაზის ზედაპირისა (ან თანატოლი შემოკლებული ფაზის ზედაპირის). შევნიშნოთ, რომ (1,12) ფორმულის თანახმად,

$$\omega = -\frac{\partial \Theta}{\partial t}, \tag{1,16}$$

ე. ი. ფაზის საშუალებით განისაზღვრება არა მხოლოდ ტალღური ვექტორი, არამედ სიხშირეც.

თუ სისტემის z-ღერძს მივმართავთ $\mathbf{k}$ ვექტორის გასწვრივ, მაშინ გვექნება

$$kz=\Theta_0+\omega t, \tag{1,17}$$

ე. ი. თანატოლი ფაზის ზედაპირი წარმოადგენს z-ღერძის მართობ სიბრტყეს

$$z=\frac{\omega}{k}t+\frac{\Theta_0}{k}, \tag{1,18}$$

რომელიც გადაადგილდება სივრცეში z-ღერძის გასწვრივ $u=\omega/k$ ფაზური სიჩქარით.

ცნობილია, რომ ψ ფუნქცია აკმაყოფილებს ტალღის, ან, როგორც მას ხშირად უწოდებენ, დალამბერის განტოლებას

$$\Delta\psi-\frac{1}{u^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=0, \tag{1,19}$$

სადაც Δ ლაპლასიანია. ამ განტოლების ერთ-ერთი ამონახსნი იქნება ბრტყელი ჰარმონიული ტალღა

$$\psi(\mathbf{r},\ t)=Ae^{i[\mathbf{kr}-\omega t]}, \tag{1,20}$$

სადაც A მუდმივი რიცხვია, რომელსაც ამპლიტუდას უწოდებენ. (1,20)-ის დალამბერის განტოლებაში შეტანით მივიღებთ ტალღურ ვექტორსა და სიხშირეს შორის ცნობილ დამოკიდებულებას $k^2=\omega^2/u^2$.

ახლა განვიხილოთ ტალღის მოძრაობა არაერთგვაროვან გარემოში. ამ შემთხვევაში ფაზის გავრცელების სიჩქარე მუდმივი აღარ იქნება და ადგილმდებარეობის მიხედვით შეიცვლება, ე. ი. იგი დამოკიდებული იქნება კოორდინატებზე $u=u(\mathbf{r})$. ტალღის განტოლება ამ შემთხვევაში მიიღებს სახეს

$$\Delta\psi-\frac{1}{u^2(\mathbf{r})}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=0. \tag{1,21}$$

რადგან u ცვლადია, ამიტომ ამ განტოლების ამონახსნი აღარ იქნება ბრტყელი ჰარმონიული ტალღა. ამონახსნი ჰარმონიული ტალღის ანალოგიით შეგვიძლია ვეძებოთ შემდეგი სახით:

$$\psi(\mathbf{r},\ t)=A(\mathbf{r})\,e^{i[\Phi(\mathbf{r})-\omega t]}. \tag{1,22}$$

ერთგვაროვან გარემოში ტალღის მოძრაობის ანალოგიით $A(\mathbf{r})$-ს შეიძლება ვუწოდოთ ამპლიტუდა, $[\Phi(\mathbf{r})-\omega t]$-ს—ფაზა, ხოლო $\Phi(\mathbf{r})$-ს—შემოკლებული ფაზა. ψ შეგვიძლია ასე წარმოვიდგინოთ:

$$\psi=\psi_0(\mathbf{r})e^{i\omega t}, \tag{1,23}$$

სადაც $\psi_0(\mathbf{r})$ დამოკიდებულია მხოლოდ კოორდინატებზე და ტოლია

$$\psi_0(\mathbf{r})=A(\mathbf{r})e^{i\Phi(\mathbf{r})} \tag{1,24}$$

თუ (1,23)-ს შევიტანთ ტალღის (1,21) განტოლებაში, მივიღებთ:

$$\Delta\psi_0+\frac{\omega^2}{u^2}\psi_0=0. \tag{1,25}$$

ტოლი ფაზის ზედაპირი განისაზღვრება შემდეგნაირად:

$$\Theta=\Phi(\mathbf{r})-\omega t=\Theta_0. \tag{1,26}$$

აშკარაა, რომ $\Theta=\Theta_0$ განხილულ შემთხვევაში, საზოგადოდ, სიბრტყეს აღარ წარმოადგენს. ტალღური ვექტორი განვსაზღვროთ ფორმულით

$$\mathbf{k}=\operatorname{grad}\Theta=\operatorname{grad}\Phi\cdot \tag{1,27}$$

მაშასადამე, ტალღური ვექტორი კვლავ მართობია თანატოლი ფაზის ზედაპირისა, მაგრამ იგი მუდმივი აღარ არის და იცვლება წერტილიდან წერტილში გადასვლისას. შემოვიღოთ სხივის ცნება. მრუდს, რომლის ყველა წერტილში მხების მიმართულება ემთხვევა ტალღური ვექტორის მიმართულებას, უწოდებენ სხივს. მაშასადამე, სხივი და თანატოლი ფაზის ზედაპირი ურთიერთორთოგონალურია. აღსანიშნავია, რომ სხივს არავითარი ფიზიკური შინაარსი არ გააჩნია.

როგორც (1,24) ფორმულიდან ჩანს, ψ_0 ფუნქციის განსაზღვრა დაიყვანება A და Φ ფუნქციების მოძებნაზე. ვიპოვოთ განტოლებათა სისტემა, რომლიდანაც განისაზღვრება ეს სიდიდეები. ამისათვის მოვძებნოთ $\psi_0(\mathbf{r})$ ფუნქციის წარმოებულები კოორდინატებით. რადგან

$$\nabla\psi_0 = \nabla A e^{i\Phi} + Ai(\nabla\Phi)e^{i\Phi}, \tag{1,28}$$

ამიტომ

$$\nabla^2\psi_0 = \{\nabla^2 A + 2i(\nabla A\nabla\Phi) + iA\nabla^2\Phi - A(\nabla\Phi)^2\}e^{i\Phi} \tag{1,29}$$

შევიტანოთ ეს გამოსახულება (1,25) ტალღის განტოლებაში, მაშინ $e^{i\Phi}$-ზე შეკვეცის შემდეგ მივიღებთ:

$$\Delta A - A(\nabla\Phi)^2 + \frac{\omega^2}{u^2}A + i[2(\nabla A\nabla\Phi) + A\Delta\Phi] = 0, \tag{1,30}$$

საიდანაც გამომდინარეობს:

$$\frac{\Delta A}{A} - (\nabla\Phi)^2 + \frac{\omega^2}{u^2} = 0, \tag{1,31}$$

$$2\left(\frac{\nabla A}{A}\nabla\Phi\right) + \Delta\Phi = 0.$$

განტოლებათა ეს სისტემა ზუსტია და ტოლფასია ტალღის განტოლებისა. თუ ამ სისტემიდან ამოვხსნით A და Φ-ს, შევიტანთ მათ (1,24)-ში, ვიპოვით ψ_0-ს და, მაშასადამე, ψ-საც; ამით ჩვენ გვეცოდინება (1,21) განტოლების ზუსტი ამონახსნი.

არსებობს (1,31) განტოლებათა სისტემის ამოხსნის მიახლოებითი მეთოდი, რომელსაც გეომეტრიული ოპტიკის მიახლოებას უწოდებენ, ხოლო ოპტიკის იმ მოვლენებს, რომლებიც ამ მიახლოებაში აიწერებიან — გეომეტრიული ოპტიკის მოვლენებს.

გარემო რომ ერთგვაროვანი ყოფილიყო, მაშინ გვექნებოდა ჰარმონიული ტალღები მუდმივი ამპლიტუდითა და ტალღური ვექტორით; ამ შემთხვევაში, (1,31)-ში $\nabla A = \Delta A = \Delta\Phi = 0$ და მივიღებდით $(\nabla\Phi)^2 = \frac{\omega^2}{u^2}$; ეს უკანასკნელი, რადგან ერთგვაროვან გარემოში სიჩქარე ადგილმდებარეობის ფუნქცია არ არის, უბრალოდ ტალღური ვექტორის განმარტებას იძლევა $k^2 = \frac{\omega^2}{u^2} = \text{const}$.

გეომეტრიული ოპტიკის მიახლოებაში გარემოს არაერთგვაროვნება ტალღის სიგრძის მანძილზე იმდენად მცირედ ითვლება, რომ ტალღის ჰარმონიულობის პირობები თითქმის შესრულებულია. გეომეტრიული ოპტიკის მიახლოება სამართლიანი იქნება იმ შემთხვევაში, როცა ტალღის სიგრძის მანძილზე გარემო შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც ერთგვაროვანი, ტალღური ვექტორი კი — როგორც მუდმივი. ამ შემთხვევაში ჩვენ გვექნება პირობები:

$$\lambda\frac{\nabla A}{A} \ll 1, \quad \lambda^2\frac{\Delta A}{A} \ll 1, \tag{1,32}$$

სადაც $\lambdabar$ არის ტალღის სიგრძე გაყოფილი 2π-ზე, ე. ი.

$$\lambdabar = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{1}{k}. \tag{1,33}$$

გეომეტრიული ოპტიკის მიახლოება მნიშვნელოვანია იმდენად, რამდენადაც შესაძლებელია u სიჩქარისა და შემოკლებული Φ ფაზის განსაზღვრა ამპლიტუდის განსაზღვრის გარეშე. რადგან განმარტებით $k^2=(\nabla\Phi)^2=1/\lambdabar^2$, ამიტომ, თუ გავითვალისწინებთ (1,32) უტოლობებს, (1,31) სისტემის პირველ განტოლებაში შეგვიძლია უგულებელვყოთ $\frac{\Delta A}{A}$ წევრი. მაშინ დაგვრჩება

$$(\nabla\Phi)^2 = \frac{\omega^2}{u^2}, \tag{1,34}$$

ხოლო $\lambdabar^2$-ზე გამრავლების შემდეგ იგივე სისტემის მეორე განტოლება მოგვცემს

$$2\lambdabar^2 \frac{\nabla A}{A}\, \nabla\Phi + \Delta\Phi\lambdabar^2 = 0. \tag{1,35}$$

თუ გავითვალისწინებთ (1,34) და (1,32) ფორმულებს, გვექნება $|\lambdabar^2\Delta\Phi| \ll 1$ და, რადგან $\nabla\Phi=\mathbf{k}$, ამიტომ გეომეტრიული ოპტიკის მიახლოების სამართლიანობისათვის გვექნება პირობა

$$|\nabla\lambdabar| \ll 1. \tag{1,36}$$

ამ შემთხვევაში (1,31) განტოლებათა სისტემა დაიყვანება (1,34) განტოლებაზე, რომელსაც ეიკონალის განტოლება ეწოდება.

ახლა გავიხსენოთ ოპტიკაში კარგად ცნობილი ფერმას პრინციპი. ტალღური ვექტორის (1,27) განმარტებიდან ცხადია, რომ

$$d\Phi = d\Theta = (\mathbf{k}d\mathbf{r}). \tag{1,37}$$

ამ გამოსახულებიდან ავიღოთ ინტეგრალი სხივის გასწვრივ A-დან B-მდე

$$\Phi = \int_A^B (\mathbf{k}d\mathbf{r}) \tag{1,38}$$

$d\mathbf{r}$ აღებულია სხივის გასწვრივ. ფერმას პრინციპის თანახმად, ეს ინტეგრალი ნამდვილ გზაზე ექსტრემალურ მნიშვნელობას ღებულობს შედარებით სხვა შესაძლო გზებთან, რომლებსაც იგივე საწყისი და საბოლოო მდგომარეობა აქვთ. ე. ი.

$$\delta\Phi = \delta\int_A^B (\mathbf{k}d\mathbf{r}) = 0. \tag{1,39}$$

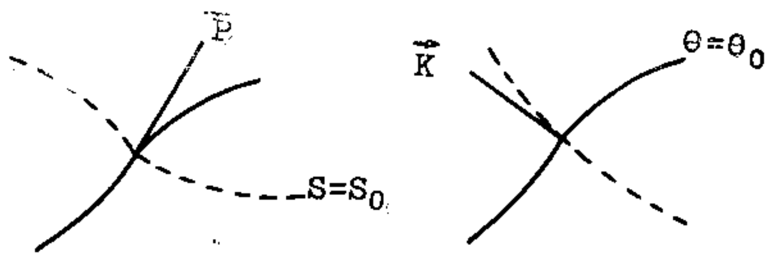
რადგან $u=\omega/k$ და $\mathbf{u}=\frac{d\mathbf{r}}{dt}$, ამიტომ $(\mathbf{k}d\mathbf{r})=\omega\frac{dr}{dt}$ და გვექნება

$$\delta\int\frac{dr}{u} = \delta\int dt = 0. \tag{1,40}$$

მიღებული შედეგის შესაბამისად ფერმას პრინციპი ასე შეიძლება ჩამოყალიბდეს: A-დან B წერტილში გავრცელებისას „სხივი ირჩევს“ იმ გზას, რომლის გავლასაც მინიმალურ დროს ანდომებს. აშკარაა, რომ (1,39) სახით ფერმას პრინციპს შეგვიძლია ვუწოდოთ შემოკლებული ფაზის პრინციპი.

ანალოგია. კლასიკური მექანიკისა და ოპტიკის ზემოთ მიღებული ფორმულები საშუალებას გვაძლევს დავამყაროთ მათ შორის ანალოგია. ამ მიზნით ჩამოვწეროთ ფორმულები, რომლებიც მივიღეთ ამ პარაგრაფში:

მ ე ქ ა ნ ი კ ა	ო პ ტ ი კ ა
ქმედება $S(\mathbf{r},\ t)$	ფაზა $\Theta(\mathbf{r},\ t)$
თანატოლი ქმედების ზედაპირი	თანატოლი ფაზის ზედაპირი
$S(\mathbf{r},\ t)=S_0$	$\Theta(\mathbf{r},\ t)=\Theta_0$
ქმედება კონსერვატულ ველში	ფაზა ჰარმონიულ მიახლოებაში
$S(\mathbf{r},\ t)=A(\mathbf{r})-Et$	$\Theta(\mathbf{r},\ t)=\Phi(\mathbf{r})-\omega t$
თავისუფალი ნაწილაკის ქმედება	ბრტყელი ტალღის ფაზა
$S(\mathbf{r},\ t)=\mathbf{pr}-Et$	$\Theta(\mathbf{r},\ t)=\mathbf{kr}-\omega t$
იმპულსი	ტალღური ვექტორი
$\mathbf{p}=\nabla S=\nabla A$	$\mathbf{k}=\nabla\Theta=\nabla\Phi$



ნახ. 1 ა

ე ნ ე რ გ ი ა	ს ი ხ შ ი რ ე
$E=-\dfrac{\partial S}{\partial t}$	$\omega=-\dfrac{\partial\Theta}{\partial t}$
ლაგრანჟ-მოპერტუის პრინციპი (შემოკლებული ქმედების პრინციპი)	ფერმას პრინციპი (შემოკლებული ფაზის პრინციპი)
$\delta A=\delta\int_A^B(\mathbf{p}d\mathbf{r})=0$	$\delta\Phi=\delta\int_A^B(\mathbf{k}d\mathbf{r})=0$
ჰამილტონ-იაკობის განტოლება კონსერვატულ ველში	ეიკონალის განტოლება
$(\nabla A)^2=2m\,[E-V(\mathbf{r})]$	$(\nabla\Phi)^2=\dfrac{\omega^2}{u^2}$
	ტალღური ოპტიკის ძირითადი განტოლება
. . . .	$\Delta\psi_0+\dfrac{\omega^2}{u^2}\psi_0=0$

ტოლი ქმედების ზედაპირი და სხივი აღებული არიან წყვეტილი ხაზებით, რადგან მათ კლასიკურ ფიზიკაში არავითარი ფიზიკური შინაარსი არა აქვთ; კლასიკურ ფიზიკაში აზრი აქვს მხოლოდ ნაწილაკის ტრაექტორიასა და ტალღის ზედაპირს. როგორც ვხედავთ, მათემატიკური ანალოგია კლასიკურ მექანიკასა და ოპტიკას

შორის ძალზე დიდია. საკმარისია დავუშვათ, რომ ფაზა და ქმედება ერთმანეთის პროპორციული სიდიდეებია, რომ ოპტიკისა და მექანიკის კანონები გარეგნულად ერთი და იგივე სახეს მიიღებენ. მართლაც, ავიღოთ,

$$\Theta = aS. \qquad (1,41)$$

აშკარაა, a-მუდმივს უნდა ჰქონდეს ქმედების შებრუნებული განზომილება; რათა, კერძო შემთხვევაში, სინათლისათვის, ავტომატურად გამომდინარეობდეს აინშტაინის ფორმულები $E=\hbar\omega$ და $\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$ საჭიროა ავიღოთ $a=1/\hbar$. ამგვარად, გვექნება

$$\Theta = \frac{S}{\hbar}. \qquad (1.42)$$

თუ ამ გამოსახულებას გავაწარმოებთ დროთი და გავითვალისწინებთ (1,6) და (1,16) ფორმულებს, მივიღებთ

$$E = -\frac{\partial S}{\partial t} = -\hbar\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \omega\hbar, \qquad (1,43)$$

ხოლო, თუ (1,42) გამოსახულებიდან ავიღებთ გრადიენტს, ანალოგიურად ვაჩვენებთ, რომ

$$\mathbf{p} = \nabla S = \hbar\nabla\Theta = \hbar\mathbf{k}. \qquad (1,44)$$

ამგვარად, საბოლოოდ მივიღებთ შემდეგ ფორმულებს:

$$E = \hbar\omega, \qquad (1,45)$$

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \qquad (1,46)$$

ნაწილაკისათვის მივიღეთ ისეთივე თანაფარდობები, როგორიც გვქონდა სინათლისათვის. სწორედ ამაში მდგომარეობს დე ბროილის იდეა. მისი აზრით, სულ ერთია, ვილაპარაკებთ ნაწილაკზე, რომელიც ხასიათდება იმპულსითა და ენერგიით, ე. ი. ოთხვექტორით $P\left(\mathbf{p}, \frac{i}{c}E\right)$, თუ ტალღაზე, რომელიც ხასიათდება ისეთი ტალღური ვექტორითა და სიხშირით $K\left(\mathbf{k}, \frac{i}{c}\omega\right)$, რომელიც დაკავშირებულია ნაწილაკის ენერგიასა და იმპულსთან (1,45) და (1,46) ფორმულებით ან $P=\hbar K$. დე ბროილის დამსახურება სწორედ იმაში მდგომარეობს, რომ ზემოთ აღნიშნულ ფორმალურ ანალოგიას მან ღრმა ფიზიკური აზრი მიანიჭა. (1,46) ფორმულიდან ცხადად ჩანს, რომ ყოველ ნაწილაკს, რომელსაც აქვს m მასა და მოძრაობს v სიჩქარით, შეესაბამება ტალღის სიგრძე

$$\lambdabar = \frac{\hbar}{mv}, \qquad (1,47)$$

რომელსაც დე ბროილის ტალღის სიგრძეს უწოდებენ. აქვე ვაჩვენოთ, რომ დუალური ბუნება გასათვალისწინებელია მხოლოდ მიკრო სხეულებისათვის. მაგალითად, თუ ავიღებთ მაკროსხეულს, რომლის მასა $m=1$ გრ. და $v=10^6\frac{\text{სმ}}{\text{სეკ}}$, მივიღებთ

$$\lambda = \frac{1.05.10^{-27}}{10^6}\ \text{სმ} = 1,05\cdot 10^{-33}\ \text{სმ}, \qquad (1,48)$$

რაც მეტად მცირე სიდიდეს წარმოადგენს. ახლა თუ ავიღებთ, მაგალითად ელექტრონს, რომლის მასა რიგით 10^{-27} გრამია, მივიღებთ $\lambda = 1,05\cdot 10^{-6}$ სმ $= 105\mathring{A}$,

რაც საკმარისად დიდი სიდიდეა. ეს კი იმას გვიჩვენებს, რომ დე ბროილის მოსაზრებები ნივთიერების ორმაგი ბუნების შესახებ დამახასიათებელია მხოლოდ და მხოლოდ მიკრო სხეულებისათვის.

ბრტყელი ტალღა აიწერება (1,20) ფუნქციით, ამიტომ მისი ფაზის შესაბამისი ქმედების ფუნქცია იქნება

$$S(\mathbf{r},\ t)=\hbar\,(\mathbf{kr}-\omega t)=\mathbf{pr}-Et, \tag{1,49}$$

რომელიც ემთხვევა თავისუფალი ნაწილაკის ქმედების ფუნქციას. მაშასადამე, დე ბროილის მოსაზრების თანახმად თავისუფალ ნაწილაკს უნდა შევუსაბამოთ ბრტყელი მონოქრომატული ტალღა

$$\psi(\mathbf{r},\ t)=Ae^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr}-\omega t)}\ . \tag{1,50}$$

აღსანიშნავია, რომ (1,42) ფორმულის თანახმად კავშირს ტალღური ოპტიკის განტოლების ამონახსნსა და კლასიკური მექანიკის დამახასიათებელ ქმედების ფუნქციას შორის ახორციელებს დამოკიდებულება

$$\psi(\mathbf{r},\ t)=e^{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{r},\ t)} \tag{1,51}$$

სადაც $S(\mathbf{r},\ t)$ არის ქმედების ფუნქცია; კერძოდ, თავისუფალი ნაწილაკის შემთხვევაში იგი ტოლია $(\mathbf{pr}-\omega t)$ გამოსახულებისა.

§ 2. შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების განტოლება

წინა პარაგრაფში მოტანილი სქემა გვიჩვენებს, რომ ანალოგია სრული არ არის. მართლაც, ჩვენ გვაქვს ეიკონალის განტოლება, რომლის ანალოგს წარმოადგენს ჰამილტონ-იაკობის განტოლება. მაგრამ ეიკონალის განტოლება გეომეტრიული ოპტიკის მიახლოების შედეგია. ამიტომ, თუ ანალოგია სრულია, მაშინ ჰამილტონ-იაკობის განტოლებაც რაღაც გარკვეული, გეომეტრიული ოპტიკის შესაბამისი მიახლოების შედეგი უნდა იყოს. ჩვენ ვნახეთ, რომ კლასიკური მექანიკა არ გამოდგება ატომური მოვლენების შესასწავლად, ე. ი. არ ვარგა ჰამილტონ-იაკობის განტოლება. შესაძლებელია, რომ ჰამილტონ-იაკობის განტოლება ისევე მიახლოებითია, როგორც გეომეტრიული ოპტიკის ეიკონალის განტოლება, რომლის ანალოგიასაც იგი წარმოადგენს. იქნებ ამით აიხსნება ის გარემოება, რომ კლასიკურმა მექანიკამ სრული მარცხი განიცადა ატომური მოვლენების შესწავლისას? ხომ არ შეიძლება დაიწეროს უფრო ზუსტი განტოლება, ვიდრე ჰამილტონ-იაკობის განტოლებაა? მაგალითად, ოპტიკაში გეომეტრიული ოპტიკის ეიკონალის განტოლების გარდა არსებობს უფრო ზუსტი განტოლებაც, რომელსაც ტალღის განტოლება ეწოდება და რომელიც კარგად აღწერს ისეთ მოვლენებს, რომლებიც გეომეტრიული ოპტიკის გამოყენების ფარგლებს გარეთ იმყოფება. თუ ჩვენ ანალოგიის გზით წავალთ, მექანიკისათვის უნდა ვეძებოთ ისეთი განტოლება, რომელიც ტალღური ოპტიკის განტოლების ანალოგიური იქნება; ამრიგად, რათა დავწეროთ ზუსტი განტოლება, რომლის ზღვრული შედეგი იქნება ჰამილტონ-იაკობის განტოლება, საჭიროა ვიპოვოთ ზუსტი ოპტიკური განტოლების (1,25) ანალოგიური განტოლება კლასიკური მექანიკისათვის, ე. ი. საჭიროა ტალღური ოპტიკის ანალოგიური „ტალღური მექანიკის“ შექმნა. ეს ამოცანა გადაწყვიტა შრედინგერმა დე ბროილის შრომის გამოქვეყნებიდან ორი წლის შემდეგ. შრედინგერმა ტალღის

განტოლებაში გაითვალისწინა ნაწილაკთა ორმაგი ბუნება, ე. ი. (1,45) და (1,46) თანაფარდობები. რადგან $\frac{\omega^2}{u^2} = \mathbf{k}^2$, ამიტომ აღნიშნული თანაფარდობების გამოყენებით გვექნება $\omega^2/u^2 = p^2/\hbar^2$ და, რადგან სრული ენერგია ტოლია გამოსახულების

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \tag{2,1}$$

სადაც $V(\mathbf{r})$ პოტენციალური ენერგიაა, ამიტომ

$$\mathbf{k}^2 = \frac{\omega^2}{u^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(\mathbf{r})]. \tag{2,2}$$

ამ გამოსახულების შეტანით ტალღის (1,25) განტოლებაში საბოლოოდ მივიღებთ[1],

$$\Delta\psi(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = 0 \tag{2,3}$$

ამასთან, $\psi(\mathbf{r})$ ფუნქციას ნულოვანი ნიშნაკი მოვაცილეთ. (2,3) განტოლებას უწოდებენ შრედინგერის განტოლებას სტაციონარული მოძრაობისათვის. (1.23) ფორმულის ანალოგიით (2,3) განტოლების ამონახსნი უნდა გავამრავლოთ $\exp(-i\omega t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)$ მამრავლზე, ე. ი.

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \tag{2,4}$$

აღმოჩნდა, რომ შრედინგერის განტოლება სწორად აღწერს ყველა ატომურ მოვლენას, ამიტომ იგი წარმოადგენს ტალღური მექანიკის, ან, როგორც მას ახლა უწოდებენ, კვანტური მექანიკის საფუძველს.

შრედინგერის განტოლების თეორიული გზით, მკაცრი გამოყვანა ისევე როგორც ნიუტონის განტოლებისა, შეუძლებელია. იგი მხოლოდ არსებული თეორიის შემდგომ განვითარებას—განზოგადებას—წარმოადგენს, ამიტომ მისი სამართლიანობა შეიძლება მხოლოდ ცდით შემოწმდეს.

აშკარაა, რომ შრედინგერის განტოლება თავისთავში ავტომატურად შეიცავს ნივთიერების ორმაგ ბუნებას. შევნიშნოთ, რომ (2,3) განტოლების მიღება შეიძლება უშუალოდ დე ბროილის მოსაზრებებიდანაც. მართლაც, დე ბროილმა თავისუფალ ნაწილაკს შეუსაბამა ბრტყელი ტალღა

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}[\mathbf{pr} - Et]} = \psi(\mathbf{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{2,5}$$

ცხადია, $\psi(\mathbf{r})$ აკმაყოფილებს განტოლებას

$$\Delta\psi(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi(\mathbf{r}) = 0, \tag{2,6}$$

სადაც E წარმოადგენს კინეტიკურ ენერგიას, რომელიც თავისუფალი ნაწილაკის შემთხვევაში ემთხვევა სრულ ენერგიას. როცა ნაწილაკი თავისუფალი არ არის, ე. ი. როცა პოტენციალური ენერგია $V(\mathbf{r}) \neq 0$, მაშინ კინეტიკური ენერგია $[E - V(\mathbf{r})]$-ის ტოლია და ამიტომ ბუნებრივია (2,6) განტოლების ისეთი განზოგადება, რომელიც მოგვცემს (2,3) განტოლებას.

[1] E. Schrödinger, Ann. der Phys. 79. 361, (1926).

$\psi(\mathbf{r})$-ფუნქციას ეწოდება ტალღური ფუნქცია; როგორც შემდგომში დავინახავთ, თითოეული კონკრეტული ამოცანისათვის საჭირო იქნება სათანადო შრედინგერის განტოლების ამოხსნის შედეგად ψ-ფუნქციის პოვნა.

შევნიშნოთ, რომ დე ბროილისა და შრედინგერის მოსაზრებები რამოდენიმე წლის შემდეგ (1927 წ) ბრწყინვალედ დადასტურდა ცდებით. დევისონმა და ჯერმერმა აღმოაჩინეს ელექტრონების დიფრაქციის მოვლენა და დაამტკიცეს, რომ ელექტრონების ნაკადი ისეთივე სახის დიფრაქციულ სურათს იძლევა, რასაც $\lambda = \hbar/mv$ ტალღის სიგრძის მქონე სინათლე. შემდეგ (1930 წ) ო. შტერნისა და მისი თანამშრომლების მიერ აღმოჩენილ იქნა ატომებისა და მოლეკულების ტალღური ყოფაქცევა, რამაც საბოლოოდ დაადასტურა დე ბროილის მოსაზრების სინამდვილე. ამჟამად ეჭვს არ იწვევს, რომ ნებისმიერ ნაწილაკებს: პროტონებს, ნეიტრონებს, პოზიტრონებს, მეზონებს და სხვა აგრეთვე ორმაგი ბუნება ახასიათებს.

შევნიშნოთ, რომ შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების განტოლება ასეც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \tag{2,7}$$

სადაც

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}). \tag{2,8}$$

ეს განტოლება კი შეიძლება მივიღოთ კლასიკური მექანიკის სტაციონარული მდგომარეობის ჰამილტონ-იაკობის განტოლებიდან

$$H(\mathbf{r}, \nabla S) = E, \tag{2,9}$$

თუ დავუშვებთ, რომ ამ განტოლების ორივე მხარე გამრავლებულია $\psi(\mathbf{r})$ ფუნქციაზე, ხოლო იმპულსის კლასიკური გამოხატულება შეცვლილია ოპერატორით

$$\mathbf{p} = \nabla S = -i\hbar\nabla. \tag{2,10}$$

მართლაც, თუ იმპულსის ოპერატორის ამ მნიშვნელობას შევიტანთ კლასიკური მექანიკის ჰამილტონის ფუნქციაში

$$H = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + V(\mathbf{r}) \tag{2,11}$$

და გავითვალისწინებთ, რომ $\nabla^2 = \Delta$, მივიღებთ (2,8) ოპერატორს, რომელსაც ჰამილტონის ოპერატორს უწოდებენ.

ამგვარად, შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების (2,7) განტოლება ყოფილა ჰამილტონის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება; ამასთან, საკუთარი მნიშვნელობები სრული ენერგიის მნიშვნელობებს ემთხვევა. აღვნიშნოთ, რომ (2,8) გამოსახულებას სრული ენერგიის ოპერატორსაც უწოდებენ, რამდენადაც (2,11) ჰამილტონიანი სრულ ენერგიას ემთხვევა.

§ 3. შრედინგერის არასტაციონარული მდგომარეობების განტოლება

წინა პარაგრაფში ჩვენ გამოვიყვანეთ შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების განტოლება. სტაციონარულ მდგომარეობაში პოტენციალური ენერგია დროზე ცხადად არ არის დამოკიდებული. ახლა ვთქვათ საქმე გვაქვს არასტაციონარულ მოძრაობასთან. შევეცადოთ დავწეროთ ისეთი განტოლება, რომელიც აღწერს ატომში მიმდინარე არასტაციონარულ პროცესებს. ამასთან ცხადია, რომ

არასტაციონარულ შემთხვევაში ტალღური ფუნქცია დროზე მხოლოდ $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)$ ჰარმონიული მამრავლის სახით აღარ იქნება დამოკიდებული. ამგვარად, საჭიროა დაიწეროს ისეთი განტოლება, რომელიც ტალღური ფუნქციის მნიშვნელობას $t=t_0>0$ მომენტში განსაზღვრავს $\psi(\mathbf{r}, t)$ ფუნქციის $t=0$ საწყისი მნიშვნელობის (ე. ი. $\psi(\mathbf{r}, 0)$) საშუალებით. ისევე, როგორც სტაციონარულ შემთხვევაში, ამ განტოლების გამოყვანაც შეუძლებელია, ამიტომ საჭიროა მისი პოსტულირება. ამ საქმეში კვლავ დაგვეხმარება ანალოგია კლასიკურ მექანიკასთან. ამისათვის გავიხსენოთ, რომ შრედინგერის განტოლება მივიღეთ (2,9) კლასიკური მექანიკის ჰამილტონ-იაკობის სტაციონარული მდგომარეობების განტოლებისაგან ოპერატორებზე გადასვლით. ბუნებრივია შრედინგერის არასტაციონარული მდგომარეობების განტოლების მიღებაც ჰამილტონ-იაკობის არასტაციონარული განტოლებიდან

$$\frac{\partial S}{\partial t}+H(\mathbf{r}, \nabla S, t)=0. \tag{3,1}$$

ეს განტოლება ვერ აღწერს მიკროსამყაროს მოვლენებს, ამიტომ, ისევე, როგორც სტაციონარულ შემთხვევაში, საჭიროა ისეთი განტოლება დაიწეროს, რომელიც ანალოგიური იქნება ტალღური ოპტიკის დროზე დამოკიდებული განტოლებისა. (3,1) განტოლება გავამრავლოთ $\psi(\mathbf{r}, t)$ ფუნქციაზე; გვექნება

$$\frac{\partial S}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t)+H\psi(\mathbf{r}, t)=0; \tag{3,2}$$

ამასთან, უნდა ვიგულისხმოთ, რომ რამდენადაც $\mathbf{p}=\nabla S=-i\hbar\nabla$ ოპერატორს წარმოადგენს, H-იც ოპერატორი იქნება და იგი კვლავ (2,8) ფორმულით გამოიხატება. ბუნებრივია, რომ $\frac{\partial S}{\partial t}$ დროითი წარმოებულიც ოპერატორი იქნება. ამ ოპერატორის მოძებნის მიზნით გავიხსენოთ, რომ კავშირს კლასიკურ და ტალღურ მოვლენებს შორის ახორციელებს $\psi=\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$ ფუნქცია. ამ ფუნქციიდან გრადიენტის აღებით მივიღებთ (2,10) ოპერატორს, ხოლო დროის მიხედვით გაწარმოებით გვექნება

$$\frac{\partial S}{\partial t}\psi=-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi, \tag{3,3}$$

საიდანაც

$$\frac{\partial S}{\partial t}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}; \tag{3,4}$$

მაშასადამე, (3.2) განტოლება მიიღებს სახეს

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}=H\psi(\mathbf{r}, t) \tag{3,5}$$

ან, თუ გავითვალისწინებთ ჰამილტონის ოპერატორის (2,8) ფორმულას, შეგვიძლია დავწეროთ

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}, t)+V(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t). \tag{3,6}$$

ამ განტოლებას უწოდებენ შრედინგერის დროით ან არასტაციონარულ მდგომარეობათა განტოლებას. რადგან (3,6) განტოლებაში დრო შედის ცხადად, ამიტომ

იგი წარმოადგენს კვანტური მექანიკის დინამიკურ განტოლებას და საშუალებას გვაძლევს შევისწავლოთ ფიზიკური სიდიდეების დროისა და სივრცის მიხედვით ცვლილება.

(3,5) განტოლება დროითი წარმოებულის მიმართ პირველი ხარისხისაა, ამიტომ საკმარისია ერთი საწყისი პირობის ცოდნა. მაგალითად, საკმარისია ვიცოდეთ ფუნქცია $\psi(\mathbf{r}, 0)$ საწყის მომენტში, რომ განვსაზღვროთ $\psi(\mathbf{r}, t)$ ფუნქცია დროის შემდგომ მომენტებში.

იმ დროს, როცა კლასიკურ მექანიკაში პერიოდული პროცესები მხოლოდ დროის მიხედვით მეორე რიგის განტოლებებიდან მიიღებოდა, კვანტურ მექანიკაში (3,5) განტოლებაში i-მამრავლის არსებობის გამო, (3,5) დროის მიმართ პირველი რიგის განტოლება პერიოდულ პროცესებსაც აღწერს. აღსანიშნავია, რომ კლასიკურ მექანიკაში დროის მიმართ პირველი რიგის განტოლებები მხოლოდ შეუქცევად პროცესებს აღწერენ, მაგალითად, დიფუზიას, სითბოგამტარობას და ა. შ.

თუ შრედინგერის არასტაციონარული მდგომარეობების განტოლებას შევადარებთ სტაციონარული მდგომარეობების (2,7) განტოლებას, დავინახავთ, რომ არასტაციონარულ შემთხვევაში ენერგიის ოპერატორისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$E=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}. \tag{3,7}$$

ენერგიის ოპერატორისათვის იგივე ფორმულას მივიღებთ, თუ იმპულსის ოპერატორის გამოსახულებას გავავრცელებთ ოთხ-იმპულსზე $P\left(\mathbf{p}, \frac{i}{c}E\right)$. მართლაც, რომ დავწეროთ $P_j=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}$, მაშინ, რადგან $x_4=ict$ მივიღებთ (3,7)-ს, ასე რომ, კვანტურ მექანიკაში იმპულსის ოთხ-ვექტორის ოპერატორს აქვს შემდეგი სახე:

$$P\left(-i\hbar\nabla,\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right). \tag{3,8}$$

ბოლოს საინტერესოა შევნიშნოთ, რომ ქმედების ფუნქციასა და იმპულსისა და ენერგიის ოპერატორებს შორის არსებობს შემდეგი კავშირი:

$$\mathbf{p}=\nabla S\to-i\hbar\nabla;\ E=-\frac{\partial S}{\partial t}\to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}. \tag{3,9}$$

საკმარისია მოვახდინოთ ეს შეცვლა, რომ კლასიკური მექანიკის ჰამილტონიაკობის განტოლება მოგვცემს შრედინგერის განტოლებას.

§ 4. ტალღური ფუნქციის ფიზიკური შინაარსი

ვთქვათ, რაიმე გარკვეული ამოცანისათვის ამოვხსენით შრედინგერის განტოლება და ვიპოვეთ ψ ფუნქცია, რა აზრი მივაწეროთ ამ ფუნქციას? რა ფიზიკურ სიდიდეს შევუსაბამოთ ეს ფუნქცია? სიმარტივისათვის განვიხილოთ თავისუფალი ნაწილაკი, რომელიც მოძრაობს x-ღერძის გასწვრივ; როგორც აღვნიშნეთ, ამ შემთხვევაში (2,6) შრედინგერის განტოლების ამოხსნა იქნება ბრტყელი ტალღა

$$\psi(x, t)=Ae^{i(kx-\omega t)}. \tag{4,1}$$

აშკარაა, რომ თვით $\psi(x, t)$ ფუნქციას არავითარი ფიზიკური აზრი არ უნდა ჰქონდეს. მართლაც, თუ თავისუფალ ნაწილაკს, რომლის იმპულსია $\mathbf{p}$ და ენერ-

გია E შევუსაბამებთ (4,1) ტალღას, მაშინ ამ ტალღის ფაზური სიჩქარე იქნება $u=\omega/k$ ან დე ბროილის თანაფარდობის გათვალისწინებით $u=E/p$; რადგან $E=mc^2$ და $\mathbf{p}=m\mathbf{v}$, სადაც m მოძრაობის მასაა, ამიტომ მივიღებთ

$$c^2=uv, \tag{4,2}$$

სადაც v ნაწილაკის შესაბამისი სიჩქარეა. უკანასკნელი ყოველთვის სინათლის სიჩქარეზე ნაკლებია, ამიტომ (4,2) ფორმულის თანახმად გამოდის, რომ ფაზური სიჩქარე სინათლის სიჩქარეზე მეტია; როგორც ცნობილია, ფარდობითობის თეორიიდან, რეალურ პროცესებში c-ზე მეტი სიჩქარის მიღწევა პრინციპულად შეუძლებელია, ამიტომ უშუალოდ $\psi(x, t)$ ფუნქციას ფიზიკური შინაარსი არ უნდა ჰქონდეს.

გარდა ამისა, (4,1) ტალღა გავრცელებულია მთელს სივრცეზე და ამიტომ არ შეიძლება იგი შეესაბამებოდეს ნაწილაკს, რომელიც ლოკალიზებულია მხოლოდ სივრცის სასრულ არეში.

ამ ორი წინააღმდეგობის თავიდან აცილება შეიძლება, თუ ნაწილაკს შევუსაბამებთ ერთ მონოქრომატულ ტალღას კი არა, არამედ (4,1) ტალღათა ჯგუფს, რომელთა სიხშირეები და გავრცელების მიმართულება მოთავსებულია მცირე ინტერვალში, ასეთ ტალღათა ჯგუფს ტალღის პაკეტს უწოდებენ. თუ ავიღებთ ამ ტალღათა ჯგუფში რაიმე ცენტრალურ სიხშირეს ω_0 და განვიხილავთ სიხშირეთა ძალიან მცირე ინტერვალს $\Delta\omega$, რომელიც სიმეტრიულად არის განლაგებული ω_0-ის მიმართ, მაშინ პაკეტის ტალღური ფუნქცია მოიცემა გამოსახულებით

$$\Psi(x, t)=\int_{\omega_0-\Delta\omega/2}^{\omega_0+\Delta\omega/2} A(\omega)\, e^{i(kx-\omega t)}\, d\omega. \tag{4,3}$$

ვაჩვენოთ, რომ ეს ტალღური პაკეტი ფაქტიურად ლოკალიზებულია სივრცის სასრულ არეში და მისი მოძრაობის სიჩქარე (ე. წ. ჯგუფური სიჩქარე) ისეთივეა, როგორც ნაწილაკის სიჩქარე.

ცხადია, რომ ზოგად შემთხვევაში ω არის k-ს ფუნქცია, ამიტომ შეგვიძლია k გავშალოთ $(\omega-\omega_0)$-ის ხარისხების მწკრივად, ე. ი.

$$k=k_0+\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0(\omega-\omega_0)+\left(\frac{d^2k}{d\omega^2}\right)_0\frac{(\omega-\omega_0)^2}{2}+\cdots+ \tag{4,4}$$

ვიგულისხმოთ, რომ ამპლიტუდა $A(\omega)$ სიხშირეზე დამოკიდებით იმდენად ნელა იცვლება სხვა სიდიდეებთან შედარებით, რომ მისთვის შეგვიძლია ავიღოთ მნიშვნელობა $\omega=\omega_0$ წერტილში და ინტეგრალის ნიშნის გარეთ გავიტანოთ. ამასთანავე, რადგან $\Delta\omega$ ინტერვალი ძალიან მცირეა, (4,4) მწკრივში შემოვისაზღვროთ პირველი ორი წევრით. მაშინ (4,3) გამოსახულებისათვის გვექნება

$$\Psi(x, t)=A(\omega_0)e^{i\left\{k_0x-\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0\omega_0x\right\}}\cdot$$

$$\int_{\omega_0-\Delta\omega/2}^{\omega_0+\Delta\omega/2} e^{i\left\{\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0x-t\right\}\omega}\, d\omega$$

ანდა, თუ შემოვიღებთ ახალ ცვლადს $\xi=\omega-\omega_0$, მივიღებთ

$$\Psi(x, t)=A(\omega_0)e^{i(k_0x-\omega t)}\int_{-\Delta\omega/2}^{\Delta\omega/2} e^{i\left\{\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0x-t\right\}\xi}\, d\xi \tag{4,5}$$

ინტეგრალის ამოხსნით გვექნება

$$\Psi(x,\ t)=e^{i(k_0 x-\omega_0 t)}\ \frac{2A\sin\left\{\frac{\Delta\omega}{2}\left[\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x-t\right]\right\}}{\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x-t} \tag{4,6}$$

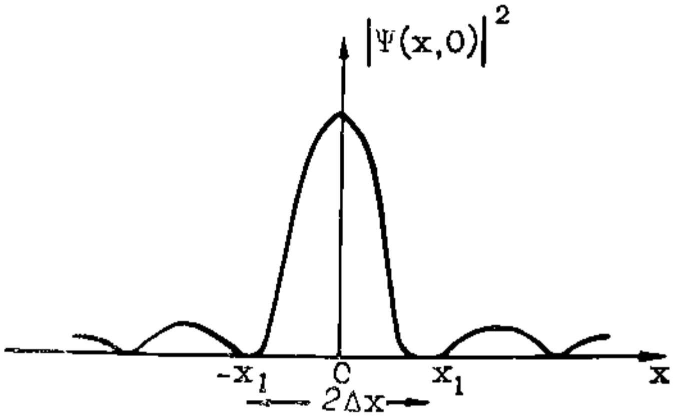
მიღებული $\Psi(x,\ t)$ ფუნქციის აბსოლუტური მნიშვნელობის კვადრატისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$|\Psi(x,\ t)|^2=4|A(\omega_0)|^2\ \frac{\sin^2\left\{\frac{\Delta\omega}{2}\left[\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x-t\right]\right\}}{\left[\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x-t\right]^2}. \tag{4,7}$$

გამოვარკვიოთ ამ გამოსახულების ყოფაქცევა დროის საწყისი მომენტისათვის ($t=0$); გვექნება

$$|\Psi(x,\ 0)|^2=4|A|^2\ \frac{\sin\left\{\frac{\Delta\omega}{2}\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x\right\}}{\left\{\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x\right\}^2} \tag{4,8}$$

პირველ ნახაზზე მოცემულია ამ ფუნქციის გრაფიკი. $x=0$ წერტილში მას აქვს მაქსიმუმი. მაქსიმუმის შესაბამის კოორდინატს უწოდებენ პაკეტის ცენტრს. თუ



ნახ. 1.

მივიღებთ მხედველობაში, რომ შემდგომი მაქსიმუმები სწრაფად კლებულობენ სიდიდით, მაშინ შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ ფაქტიურად პაკეტი სასრულ არეშია გავრცელებული. კერძოდ, პაკეტის სიგანეს ვუწოდებთ იმ მანძილს, რომელიც გვაქვს ცენტრიდან ორ უახლოეს მინიმუმს შორის (x_1 და $-x_1$ წერტილები); აღვნიშნოთ იგი $2\Delta x$-ით. (4,8) ფორმულის თანახმად, რადგან პირველი ნული გვექნება ცენტრიდან Δx მანძილზე, ამიტომ პაკეტის სიგანე შეგვიძლია განვსაზღვროთ პირველი მინიმუმის პირობიდან, ე. ი.

$$\frac{1}{2}\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 \Delta x\Delta\omega=\pi. \tag{4,9}$$

მაგრამ, რადგან $\Delta\omega$ სიმცირის გამო (4,4)-ში შემოვისაზღვრეთ მხოლოდ ორი წევრით, ე. ი. მივიღეთ, რომ

$$\Delta k = \left(\frac{dk}{d\omega}\right) \Delta\omega,$$

ამიტომ (4,9) ფორმულა მოგვცემს

$$\Delta k \Delta x = 2\pi. \tag{4,10}$$

როგორც ვხედავთ, ყველაზე დიდი მაქსიმუმი გვაქვს კოორდინატთა სათავეში, ე. ი. ეს ტალღები სათავეში ერთმანეთს აძლიერებენ, შორ მანძილზე კი აქრობენ[1].

როცა $t \neq 0$, მაშინ პაკეტი სივრცეში გადაინაცვლებს და მაქსიმუმისათვის საჭიროა პირობა

$$\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x - t = 0.$$

ამ განტოლებიდან ამოხსნილი

$$x = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t \tag{4,11}$$

არის ის ადგილი, სადაც $|\Psi(x, t)|^2$-ს აქვს მაქსიმუმი. (4,11) გამოხატავს ამ მაქსიმუმის, ე. ი. ტალღური პაკეტის მიერ განვლილ გზას t დროის განმავლობაში. ამგვარად, ტალღური პაკეტი იმოძრავებს სიჩქარით

$$v' = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0. \tag{4,12}$$

ამ სიჩქარეს უწოდებენ ჯგუფურ სიჩქარეს. (4,6) ფორმულა გვიჩვენებს, რომ ტალღის პაკეტის ცენტრი ისე მოძრაობს, როგორც ბრტყელი ტალღა k_0 ტალღური ვექტორით, ω_0 სიხშირითა და კოორდინატებისა და დროის ნელად ცვლადი ამპლიტუდით

$$\frac{2A(\omega_0)\,\mathrm{sim}\left\{\frac{1}{2}\Delta\omega\left[\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x - t\right]\right\}}{\left\{\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x - t\right\}}. \tag{4,13}$$

(ეს გამოსახულება ნელად ცვლადია იმიტომ, რომ არგუმენტში გვაქვს მცირე $\Delta\omega$ სიდიდე).

გამოვარკვიოთ ახლა, როგორია ჯგუფური სიჩქარე იმ ნაწილაკისა, რომელსაც ვუსაბამებთ ტალღათა ჯგუფს. რადგან

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4, \quad E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \tag{4,14}$$

ამიტომ

$$(\hbar\omega)^2 = c^2(\hbar k)^2 + m^2c^4. \tag{4,15}$$

ამ გამოსახულების გადიფერენციალება მოგვცემს $\omega d\omega = c^2 k dk$, საიდანაც ვღებულობთ

$$v' = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 = \frac{dE}{dp} = v, \tag{4,16}$$

ე. ი. ტალღათა ჯგუფის სიჩქარე ემთხვევა ნაწილაკის სიჩქარეს. ამგვარად, ისეთი შთაბეჭდილება იქმნება, რომ ნაწილაკი თითქოს შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც ტალღათა ჯგუფი—პაკეტი. მაგრამ ტალღური პაკეტის შემოღება თავის მხრივ

[1] სინამდვილეში უნდა დავწეროთ $\Delta k\Delta x \geqslant 2\pi$, რადგან პაკეტში გარკვეული წვლილი სხვა მაქსიმუმებსაც შეაქვს.

აწყდება სერიოზულ წინააღმდეგობას, რომელიც გვაიძულებს ეს მოსაზრებაც უკუვაგდოთ. სახელდობრ, დე ბროილის ტალღას ის დამახასიათებელი თავისებურება აქვს, რომ იგი დამოკიდებულია სიჩქარეზე (ეს ჩანს განმარტებიდან $\lambda = \hbar/mv$), ამიტომ სიცარიელეშიც კი ტალღები დისპერსიას განიცდიან. მაშასადამე, ტალღური პაკეტი არ შეიძლება რაიმე მყარსა და უცვლელს წარმოადგენდეს, იგი გარკვეული დროის გავლის შემდეგ, დისპერსიის გამო, სხვადასხვა სიხშირის ტალღებად უნდა დაიშალოს, რაც ნაწილაკის უცვლელ ზომას არ შეიძლება შეესაბამებოდეს.

ტალღური ფუნქციის სწორი ფიზიკური შინაარსი განსაზღვრული იყო მ. ბორნის მიერ[1]. ბორნის თანახმად, ფიზიკური შინაარსი აქვს არა თვით $\psi(x, y, z, t)$ ფუნქციას[2], არამედ მისი აბსოლუტური მნიშვნელობის კვადრატს, რომელიც ცდით შეიძლება გაიზომოს; სახელდობრ,

$$dw = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau = \psi^* \psi \, d\tau \tag{4,17}$$

გამოხატავს ალბათობას იმისა, რომ დროის t მომენტში ნაწილაკი მოხვდება სივრცის $d\tau$ მოცულობაში. $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi^*\psi$ კი იქნება ალბათობის სიმკვრივე. ალბათობის ჩვეულებრივი განმარტების შედეგად ყველა ალბათობის ჯამი ერთის ტოლი უნდა იყოს, ე. ი.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau = 1. \tag{4,18}$$

ეს უკანასკნელი წარმოადგენს ალბათობას იმისა, რომ ნაწილაკი სადღაც იმყოფება, ე. ი. უბრალოდ ნაწილაკის არსებობის ფაქტს აღნიშნავს. (4,18) ამავე დროს ტალღური ფუნქციის ნორმირების პირობასაც წარმოადგენს. რადგან შრედინგერის განტოლება წრფივი დიფერენციალური განტოლებაა, ამიტომ მისი ამონახსნი დამოკიდებული იქნება ნებისმიერ მუდმივებზე. ნორმირების (4,18) პირობა ერთი ნებისმიერი მუდმივის განსაზღვრის საშუალებას მოგვცემს. სახელდობრ, ნებისმიერი მუდმივი ისე შეგვიძლია შევარჩიოთ, რომ დაცული იყოს (4,18) ნორმირების პირობა; თუ (4,18) დაცული არ არის, მაშინ $d\tau$ მოცულობაში მოხვედრის ალბათობა შემდეგნაირად ჩაიწერება

$$\frac{|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau}. \tag{4,19}$$

ამ გამოხატულების ინტეგრალი, რადგან მნიშვნელი მუდმივ რიცხვია, უდრის ერთს.

ნორმირების (4,18) პირობა მოითხოვს, რომ ψ-ფუნქცია იყოს კვადრატულად ინტეგრებადი, ე. ი. მას ჰქონდეს ისეთი სახე, რომელიც უსასრულობაში სწრაფად ისპობა. ასეთი მდგომარეობა დამახასიათებელია დისკრეტული სპექტრისათვის. მაგრამ შრედინგერის განტოლებას შეიძლება ჰქონდეს როგორც დისკრეტული, ისე უწყვეტი სპექტრი. უწყვეტი სპექტრისათვის (4,18) ტიპის ინტეგრალი განშლადია, ამიტომ საჭირო ხდება ტალღური ფუნქციის სხვა ტიპის ნორმირების შემოღება. ასე მაგალითად, ჩვენ შეიძლება ვიგულისხმოთ, რომ ალბათობა ნორ-

---

[1] M. Born, Zeits. f. Phys. 37, 863, (1926),

[2] თვით ტალღურ ფუნქციას რომ ფიზიკური შინაარსი არა აქვს, იქიდანაც ჩანს, რომ საზოგადოდ იგი არის კომპლექსური სიდიდე.

მირებულია ძალიან დიდ, მაგრამ სასრულ მოცულობაზე, რომელიც შემდგომ უსასრულობისაკენ უნდა მივასწრაფოთ. ამასთან, ცხადია ნორმირების ხასიათი ფიზიკური სიდიდეების მნიშვნელობაზე არ იმოქმედებს.

სპექტრის ხასიათი დამოკიდებულია ამოცანის პირობებზე. დისკრეტული სპექტრი დამახასიათებელია ბმული მდგომარეობებისათვის, როცა ნაწილაკის მოძრაობის არე შემოსაზღვრულია სივრცის სასრული არით, ე. ი. მოძრაობა ფინიტურია. ამ შემთხვევაში თუ მიზიდვის პოტენციალური ენერგია ისეა ნორმირებული, რომ უსასრულობაში იგი ნულის ტოლია, სრული ენერგია უარყოფითია $E<0$. შრედინგერის განტოლების ამონახსნს ფინიტური მოძრაობისათვის უნდა მოვთხოვოთ, რომ უსასრულობაში იგი სწრაფად ისპობოდეს. ასეთი სასაზღვრო პირობა უზრუნველყოფს განტოლების დისკრეტულ სპექტრს როცა მოძრაობა ინფინიტურია, მაშინ ნაწილაკს შეუძლია მოძრაობა მთელს უსასრულო სივრცეში; სრული ენერგია დადებითია $E>0$ და სასაზღვრო პირობებში ასახული უნდა იყოს ის გარემოება, რომ ნაწილაკს შეუძლია გარკვეული ალბათობით უსასრულობაში მოხვედრა. ამ შემთხვევაში შრედინგერის განტოლების სპექტრი იქნება უწყვეტი. სრული ენერგია უწყვეტ მნიშვნელობებს მიიღებს და ტალღური ფუნქციაც ენერგიაზე როგორც პარამეტრზე უწყვეტად იქნება დამოკიდებული: $\psi=\psi(\mathbf{r},\ E)$.

რადგან, საზოგადოდ, ψ ფუნქცია გავრცელებულია მთელს სივრცეზე, ამიტომ არსებობს ალბათობა იმისა, რომ ნაწილაკი აღმოჩნდება სივრცის ნებისმიერ წერტილში; მაშასადამე, მკაცრი კვანტური მექანიკური მსჯელობის თანახმად ნაწილაკი თითქოს მთელ სივრცეზეა „განფენილი“.

ამგვარად, გვაქვს შემდეგი დასკვნი: შრედინგერის განტოლებიდან ნაპოვნ ψ ფუნქციას არავითარი ფიზიკური შინაარსი არა აქვს. ფიზიკური აზრი აქვს ამ ფუნქციის აბსოლუტური მნიშვნელობის კვადრატს, რომელიც მდებარეობის ალბათობის სიმკვრივეს გამოხატავს.

აშკარაა, რომ ψ ფუნქცია უნდა აკმაყოფილებდეს გარკვეულ სასაზღვრო პირობებს. ამ პირობების სახე დამოკიდებულია კონკრეტულ ამოცანებზე, ე. ი. პოტენციალურ ენერგიაზე. მის შემდეგ, რაც ტალღური ფუნქციის აბსოლუტური მნიშვნელობის კვადრატს მივაწერეთ ალბათობის შინაარსი, ბუნებრივია, შრედინგერის განტოლების ამოხსნას მოვთხოვოთ შემდეგი პირობები, რომლებსაც სტანდარტულ პირობებს უწოდებენ. ψ ფუნქცია უნდა იყოს:

1) უწყვეტი და ჰქონდეს უწყვეტი პირველი რიგის წარმოებულები, 2) სასრული, 3) ცალსახა.

ტალღური ფუნქციისათვის უწყვეტობის სასრულობისა და ცალსახობის მოთხოვნა ფიზიკურად გასაგებია, რადგან მდებარეობის განმსაზღვრელი ალბათობა არ შეიძლება იყოს უსასრულოდ დიდი ანდა მრავალსახა. შრედინგერის განტოლება მეორე რიგის დიფერენციალური განტოლებაა, ამიტომ, თუ პოტენციალური ენერგია სასრულოა (ამასთან შეიძლება უწყვეტი არც იყოს), მაშინ როცა მოცემულია ტალღური ფუნქცია და მისი წარმოებულები რაიმე ზედაპირზე, შეგვიძლია მოვახდინოთ შრედინგერის განტოლების ინტეგრაცია და ვიპოვოთ $\psi(\mathbf{r},\ t)$ ფუნქციის მნიშვნელობა ნებისმიერ წერტილში. მაშასადამე, რადგან ჩვენ გვსურს ტალღურმა ფუნქციამ ცალსახად განსაზღვროს ნაწილაკის მდგომარეობა, საჭიროა მოვითხოვოთ, რომ არა მხოლოდ $\psi(\mathbf{r},t)$ იყოს უწყვეტი, არამედ უწყვეტი უნდა იყოს მისი პირველი რიგის წარმოებულებიც.

დაბოლოს, შევნიშნოთ, რომ რადგან ფიზიკური აზრი აქვს $\psi^*\psi$-ს, ამიტომ ტალღური ფუნქციები განსაზღვრული იქნება $\exp(\pm i\alpha)$ ფაზური მამრავლის სი-

ზუსტით, სადაც α არის ნამდვილი რიცხვი. ამიტომ, ყოველი ფიზიკური სიდიდე, რომელსაც კი შემდეგში გამოვთვლით ψ ფუნქციის დახმარებით, არ უნდა იცვლებოდეს ψ ფუნქციის $\psi e^{\pm i\alpha}$ შეცვლის დროს; კერძოდ, აქედან გამომდინარეობს, რომ ის ნებისმიერი კოეფიციენტი რომელიც უნდა განისაზღვროს ნორმირების პირობიდან, შეგვიძლია ჩავთვალოთ ნამდვილ სიდიდედ.

§ 5. დენის ვექტორი, უწყვეტობის განტოლება

ჩვენ ვაჩვენეთ, რომ შრედინგერის განტოლების ამონახსნის საშუალებით შეგვიძლია ვიპოვოთ დროის რომელიმე მომენტში ნაწილაკის მოხვედრის ალბათობა სივრცის ამა თუ იმ ადგილას. კერძოდ, $\psi^*\psi$ სიდიდე წარმოადგენს მდებარეობის ალბათობის სიმკვრივეს. ცხადია, რომ თუ ამ გამოსახულებას გავამრავლებთ ელექტრონის მუხტზე, მაშინ იგი მოგვცემს ელექტრული მუხტის სიმკვრივეს. მისი საშუალებით შეგვიძლია ვიპოვოთ მასის სიმკვრივეც, ნაწილაკთა რიცხვიც და სხვ. რადგან, ისევე როგორც კლასიკურ მექანიკაში, ადგილი უნდა ჰქონდეს მუხტის მუდმივობას, ნაწილაკთა რიცხვის შენახვასა და სხვა, კვანტურ მექანიკაში შესაძლებელი უნდა იყოს უწყვეტობის განტოლების გამოყვანა. ქვემოთ ვაჩვენებთ, რომ ასეთი განტოლება მართლაც ადვილად მიიღება შრედინგერის განტოლებიდან.

დავწეროთ შრედინგერის დროითი განტოლება

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\mathbf{r},\ t)\,\psi \tag{5,1}$$

ამ განტოლებაში გადავიდეთ კომპლექსურად შეუღლებულზე; ამასთან, გავითვალისწინოთ, რომ პოტენციალური ენერგია ნამდვილი ფუნქციაა; გვექნება

$$-i\hbar \frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* + V(\mathbf{r},\ t)\,\psi^*. \tag{5,2}$$

(5,1) განტოლება გავამრავლოთ მარცხნიდან ψ^*-ზე, (5,2) კი ψ-ზე და პირველს გამოვაკლოთ მეორე, მივიღებთ

$$i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*). \tag{5,3}$$

გარდავქმნათ ამ გამოსახულების მარჯვენა მხარე. ამისათვის გავითვალისწინოთ ვექტორული ანალიზის შემდეგი ფორმულა:

$$\operatorname{div}\mathbf{A}\varphi = \varphi\operatorname{div}\mathbf{A} + (\mathbf{A}\operatorname{grad}\varphi). \tag{5,4}$$

რამდენადაც $\operatorname{div}\operatorname{grad}\varphi = \Delta\varphi$, გვექნება

$$\operatorname{div}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) = \psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^* + (\nabla\psi^*, \nabla\psi) - (\nabla\psi, \nabla\psi^*) \tag{5,5}$$

ბოლო ორი წევრი ერთმანეთს აბათილებს, ამიტომ დაგვრჩება

$$\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^* = \operatorname{div}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*). \tag{5,5'}$$

ამგვარად, (5,3) განტოლება მიიღებს სახეს

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\psi^*\psi = \frac{i\hbar}{2m}\operatorname{div}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \tag{5,6}$$

თუ შემოვიღებთ აღნიშვნებს:

$$w = \psi^*\psi, \tag{5,7}$$

$$\mathbf{J}=\frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi), \tag{5,8}$$

მაშინ (5,6) განტოლება მიიღებს უწყვეტობის განტოლების კარგად ცნობილ გამოხატულებას

$$\frac{\partial w}{\partial t}+\operatorname{div}\mathbf{J}=0. \tag{5,9}$$

რამდენადაც w ალბათობის სიმკვრივეა, იმდენად, ბუნებრივია, $\mathbf{J}$-ს ვუწოდოთ ალბათობის დენის სიმკვრივის ვექტორი. (5,9) უწყვეტობის განტოლებას შეიძლება მივცეთ ინტეგრალური ფორმა. ამისათვის განვიხილოთ რაიმე τ-მოცულობა, რომელიც შემოსაზღვრულია S-ფართით და ავიღოთ ინტეგრალი (5,9) გამოსახულებიდან მთელს მოცულობაზე; მივიღებთ

$$-\frac{\partial}{\partial t}\int_\tau w\,d\tau=\int_\tau \operatorname{div}\mathbf{J}d\tau. \tag{5,10}$$

თუ მარჯვენა მხარისათვის გამოვიყენებთ გაუს-ოსტროგრადსკის თეორემას, გვექნება

$$-\frac{\partial}{\partial t}\int_\tau w\,d\tau=\oint_S J_n dS. \tag{5,11}$$

ეს უკანასკნელი გვიჩვენებს, რომ აღებულ τ-მოცულობაში ალბათობის შემცირება დროის ერთეულში უდრის ალბათობის დენის ვექტორის ნაკადს τ-მოცულობის შემომსაზღვრელ ჩაკეტილ ზედაპირში.

იმის მიხედვით, თუ რა სიდიდეებთან გვაქვს საქმე (5,9), შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც მუხტის ისე მასის, ნაწილაკთა რიცხვისა და სხვათა მუდმივობის კანონი. მართლაც, თუ გავამრავლებთ w და $\mathbf{J}$-ს მასაზე, გვექნება

$$\rho_m=m\psi^*\psi,\quad \mathbf{J}_m=\frac{i\hbar}{2}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi). \tag{5,12}$$

ρ_m იქნება მასის სიმკვრივე, ხოლო $\mathbf{J}_m$ მასის სიმკვრივის ნაკადის ვექტორი. შესაბამისად (5,9)-ის გამრავლებით მასაზე მივიღებთ მასის უწყვეტობის განტოლებას. ასევე, აშკარაა, რომ თუ e ნაწილაკის მუხტია, მაშინ

$$\rho_e=e\psi^*\psi,\quad \mathbf{J}_e=\frac{ie\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi). \tag{5,13}$$

შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც მუხტის სიმკვრივე და ელექტრული დენის სიმკვრივის ვექტორი შესაბამისად, ხოლო (5,9) ამ შემთხვევაში გამოხატავს მუხტის მუდმივობის კანონს.

როცა ალბათობა დროის მიხედვით არ იცვლება, მაშინ $\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\psi=0$ და უწყვეტობის განტოლება მიიღებს მარტივ სახეს

$$\operatorname{div}\mathbf{J}=0. \tag{5,14}$$

ავიღოთ ამ გამოსახულებიდან მოცულობითი ინტეგრალი და შემდეგ გამოვიყენოთ გაუს-ოსტროგრადსკის თეორემა. გვექნება

$$\oint_S J_n dS=0; \tag{5,15}$$

მაშასადამე, ამ შემთხვევაში τ-მოცულობის შემომსაზღვრელ ფართში ნაკადი ნულის ტოლია.

აშკარაა, რომ დენის ვექტორის (5,8) ფორმულა შემდეგი სახითაც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$\mathbf{J} = -\frac{\hbar}{m} Im\,(\psi\nabla\psi^*) \tag{5,16}$$

სადაც Im აღნიშნავს კომპლექსურ ნაწილს. აღსანიშნავია, რომ როცა ტალღური ფუნქცია ნამდვილია, მაშინ დენის ვექტორი ნულის ტოლია.

§ 6. კვანტური მექანიკის სტატისტიკური ხასიათი

ჩვენ ვნახეთ, რომ კვანტური მექანიკის ძირითადი განტოლების ამოხსნა საშუალებას გვაძლევს განვსაზღვროთ ნაწილაკის მდებარეობის ალბათობა, ე. ი. კვანტურ მექანიკას აქვს სტატისტიკური ხასიათი. გამოვარკვიოთ, რით არის გამოწვეული ალბათობებზე გადასვლისა და მოვლენების სტატისტიკური მეთოდით აღწერის აუცილებლობა. ამ საკითხის გასარკვევად განვიხილოთ წინა პარაგრაფის (4.10) ფორმულა

$$\Delta k \Delta x = 2\pi$$

რადგან $\Delta p_x = \hbar \Delta k$, ამიტომ

$$\Delta p_x \Delta x = 2\pi\hbar. \tag{6,1}$$

ეს დამოკიდებულება ცნობილია როგორც ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის თანაფარდობა[1]. $2\Delta x$ აღნიშნავდა პაკეტის ზომას, იგი წარმოადგენს სივრცის იმ ნაწილს, რომელიც შეესაბამება ნაწილაკს, ე. ი. ნაწილაკის მდებარეობა ზუსტად კი არ განისაზღვრება, არამედ მისთვის მოცემულია კოორდინატის გაზომვის Δx შუალედი. ამიტომ, Δx შეგვიძლია განვიხილოთ, როგორც კოორდინატის განუზღვრელობის ზომა. ასევე, Δp_x იქნება იმპულსის განუზღვრელობა. ჩვენ ვხედავთ, რომ კოორდინატისა და იმპულსის განუზღვრელობათა ნამრავლი უნივერსალური მუდმივია, ე. ი. თუ განუზღვრელობა იმპულსის გაზომვისას ნულის ტოლია, $\Delta p_x = 0$ (ეს იმას ნიშნავს, რომ იმპულსის x მდგენელს ზუსტად ვზომავთ), მაშინ განუზღვრელობა კოორდინატის გაზომვაში $\Delta x = \infty$. ამგვარად, როდესაც ნაწილაკის იმპულსის სიდიდე ზუსტად ვიცით, მაშინ ნაწილაკის მდებარეობის შესახებ არაფერი არ ვიცით და პირიქით. შევნიშნოთ, რომ კოორდინატისა და იმპულსის ერთდროულად ზუსტად ცოდნის შეუძლებლობის საკითხი პრინციპული საკითხია და იგი არაა გამოწვეული გასაზომი იარაღის არა სიზუსტით ან ტექნიკის დონით.

შევნიშნოთ, რომ სამ განზომილებიანი მოძრაობის დროს, (6,1)-თან ერთად გვექნებოდა ასეთივე ფორმულები დანარჩენი ორი კოორდინატისათვისაც.

რადგან კოორდინატი და იმპულსი აუცილებელია ნაწილაკის ტრაექტორიის დასადგენად, ამიტომ განუზღვრელობის თანაფარდობის თანახმად, კვანტურ მექანიკაში ნაწილაკის ტრაექტორიაზე ლაპარაკს აზრი არა აქვს. ამიტომაც ისმის საკითხი ნაწილაკის მხოლოდ მდებარეობის ალბათობის შესწავლაზე. ამითაა გამოწვეული კვანტური მექანიკის სტატისტიკური ხასიათი.

განუზღვრელობის თანაფარდობას ადგილი აქვს არა მხოლოდ იმპულსისა და კოორდინატისათვის. განუზღვრელ სიდიდეთა წყვილები კვანტურ მექანიკაში მრავალია. ჩვენ ამ საკითხს შევეხებით მაშინ, როცა მოვიყვანთ განუზღვრელობის

[1] W. Heisenberg. Zeits f. Phys 43, 172, (1927)

თანაფარდობის ზოგად დამტკიცებას. წინასწარ შევნიშნოთ, რომ ჩვენ შეგვეძლო § 4-ში k კი არ გაგვეშალა ω-ს ხარისხებად, არამედ, პირიქით, ω გაგვეშალა $(k-k_0)$ ხარისხების მიხედვით, მაშინ სრულიად ანალოგიური მსჯელობით მივიღებდით ფორმულას

$$|\Psi(0,\ t)|^2 = 4|A|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{d\omega}{dk}\frac{t\Delta k}{2}\right)}{\left(\frac{d\omega}{dt}\,t\right)^2}, \tag{6,2}$$

რომლის მინიმუმის წერტილი Δt დროისათვის განისაზღვრებოდა პირობით

$$\frac{\Delta\omega}{\Delta k}\Delta t\Delta k = 2\pi.$$

საიდანაც, თუ გავითვალისწინებთ, რომ $\Delta E = \hbar\Delta\omega$, მივიღებთ

$$\Delta E\Delta t = 2\pi\hbar; \tag{6,3}$$

ე. ი. განუზღვრელობას აქვს ადგილი ენერგიასა და დროს შორისაც. აღვნიშნოთ, რომ ამ ფორმულის შინაარსი განსხვავდება კოორდინატისა და იმპულსისათვის დაწერილი განუზღვრელობის თანაფარდობის შინაარსისაგან, ამ საკითხსაც ჩვენ შემდგომში გავარკვევთ.

დაბოლოს ვაჩვენოთ, რომ განუზღვრელობის თანაფარდობას არ შეიძლება რაიმე მნიშვნელობა ჰქონოდა კლასიკურ მექანიკაში და რომ იგი მიკროსამყაროს დამახასიათებელ პრინციპს გამოხატავს. მართლაც დავუშვათ, რომ გვაქვს მაკრო სხეული 1 გრ. მასით. რა სიზუსტით შეგვიძლია ამ ნაწილაკის მდებარეობის განსაზღვრა, თუ სიჩქარის განსაზღვრაში დაშვებული ცდომილება, მაგალითად, $\Delta v \sim 10^{-5}\frac{\text{სმ}}{\text{სეკ}}$ რიგისაა? (6,1) ფორმულის თანახმად

$$\Delta x = \frac{2\pi\hbar}{m\Delta v} \sim 10^{-22}\ \text{სმ}, \tag{6,4}$$

ე. ი. ცდომილება კოორდინატის გაზომვაში ფაქტიურად ნულის ტოლია. ეს კი იმას ნიშნავს, რომ კოორდინატი ამ შემთხვევაში ზუსტად იზომება. თუ ახლა ავიღებთ ელექტრონს, რომლის მასა$\sim 10^{-27}$ გრამია, გვექნება, რომ $\Delta x \sim 10^5$ სმ., ე. ი. ამ შემთხვევაში კოორდინატის გაზომვის ცდომილება 1 კმ-ის რიგისაა, რისი მხედველობაში მიუღებლობაც შეუძლებელია.

როდესაც კლასიკურ მექანიკაში მოცემულია კოორდინატი და იმპულსი, მაშინ ამბობენ, რომ მოცემულია მდგომარეობა. თუ ჩვენ ვიცით ნაწილაკის კოორდინატისა და იმპულსის მნიშვნელობები დროის ყოველი მომენტისათვის, მაშინ შეგვიძლია ვიპოვოთ ნაწილაკის დამახასიათებელი ყველა ფიზიკური სიდიდე. ამისათვის კი, კლასიკურ მექანიკაში საჭიროა ამოიხსნას ნიუტონის მოძრაობის განტოლებანი. ამ განტოლებების ამოსახსნელად გვჭირდება საწყისი პირობები, რომლებიც განსაზღვრავენ საწყის მდგომარეობას (სამი კოორდინატი და სამი იმპულსის მდგენელი). საწყისი მდგომარეობითა და ნიუტონის განტოლებებით კლასიკურ მექანიკაში ნაწილაკის მოძრაობის ამოცანა ცალსახად იხსნება. მოკლედ რომ ვთქვათ, როდესაც კლასიკურ მექანიკაში „ნაწილაკის აწმყო“ ზუსტადაა განსაზღვრული, მოძრაობის განტოლებები საშუალებას გვაძლევს „ნაწილაკის მომავალიც“ ზუსტად განვსაზღვროთ. აშკარაა, რომ მიკროსამყაროში მდგომარეობის ასეთ აღწერას აზრი აღარა აქვს. ამ შემთხვევაში ჩვენ ზუსტად არ გვეცოდინება

არათუ მომავალი მდგომარეობა. არამედ საწყისიც კი (ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის თანაფარდობის ძალით შეუძლებელია კოორდინატებისა და იმპულსების ერთდროულად ზუსტად გაზომვა!). მაგრამ ეს გარემოება სრულებითაც არ უშლის ხელს კვანტურ მექანიკას მოვლენები აღწეროს ახალი სიდიდეებით, რომლებიც დამახასიათებელი არიან მიკრო სამყაროსათვის და რომელთათვისაც გარკვეული საწყისი მონაცემებისა და შრედინგერის განტოლების დახმარებით აღვწერთ ყველა იმ მოვლენას, რომელსაც კი ადგილი აქვს მიკრო სამყაროში. ამ საკითხს დაწვრილებით § 40-ში შევეხებით.

§ 7. სტაციონარული მდგომარეობა

ახლა გამოვარკვიოთ, რას ვუწოდებთ სტაციონარულ მდგომარეობას კვანტურ მექანიკაში· როცა ნაწილაკი არ იმყოფება გარეშე ცვალებად ველში, მაშინ ნაწილაკის ჰამილტონიანი დროზე ცხადად დამოკიდებული არ არის, ე. ი.

$$\frac{\partial H}{\partial t}=0. \tag{7,1}$$

ამ შემთხვევაში შრედინგერის განტოლებაში

$$i\hbar\,\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},\ t)}{\partial t}=H(\mathbf{r})\,\Psi(\mathbf{r},\ t) \tag{7,2}$$

შესაძლებელია ცვლადთა განცალება ფურიეს მეთოდით. ამონახსნი ვეძებოთ ორი $\psi(\mathbf{r})$ და $\varphi(t)$ ფუნქციის ნამრავლის სახით, ე. ი.

$$\Psi(\mathbf{r},\ t)=\psi(\mathbf{r})\,\varphi(t) \tag{7,3}$$

და შევიტანოთ (7,2) განტოლებაში; მიღებული შედეგი გავყოთ $\psi(\mathbf{r})\,\varphi(t)$ ნამრავლზე; გვექნება

$$\frac{i\hbar\,\dfrac{\partial\varphi(t)}{\partial t}}{\varphi(t)}=\frac{H\,\psi(\mathbf{r})}{\psi(\mathbf{r})}. \tag{7,4}$$

მარცხენა მხარე მხოლოდ დროის ფუნქციაა, მარჯვენა კი—კოორდინატების. ამიტომ ტოლობა მაშინაა შესაძლებელი, როცა თითოეული წევრი ამ შეფარდებისა მუდმივი რიცხვის ტოლია. ამ რიცხვს ცხადია ექნება ენერგიის განზომილება· აღვნიშნოთ იგი E-თი; მივიღებთ:

$$i\hbar\,\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t}=E\varphi(t), \tag{7,5}$$

$$H\psi(\mathbf{r})=E\psi(\mathbf{r}). \tag{7,6}$$

(7,6) წარმოადგენს დროზე დამოუკიდებელ შრედინგერის განტოლებას. (7,5)-ის ამონახსნს ექნება შემდეგი სახე:

$$\varphi(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}; \tag{7,7}$$

ამიტომ შრედინგერის (7,2) განტოლების ამონახსნი შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგნაირად:

$$\Psi(\mathbf{r},\ t)=\psi(\mathbf{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \tag{7,8}$$

მდგომარეობას, რომელიც აიწერება (7,8) ტიპის ფუნქციით, სტაციონარულ მდგომარეობას უწოდებენ. ამ შემთხვევაში ტალღური ფუნქცია დროზე მხოლოდ ჰარმონიულად არის დამოკიდებული $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)$ მამრავლის სახით. თუ (7,8) ამონახსნს შევიტანთ შრედინგერის (7,2) განტოლებაში, მივიღებთ შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების (7,6) განტოლებას.

სტაციონარული მდგომარეობა იმით ხასიათდება, რომ ამ მდგომარეობაში ალბათობა და დენის სიმკვრივის ვექტორი დროზე არაა დამოკიდებული. მართლაც, ალბათობისათვის გვექნება

$$w(\mathbf{r})=\Psi^*(\mathbf{r},\ t)\,\Psi(\mathbf{r},\ t)=\psi^*(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r}). \tag{7,9}$$

ასევე, რადგან დენის ვექტორის გამოსახულებაში შედის $\Psi^*\nabla\Psi$ კომბინაცია, მასში დროის შემცველი წევრი ამოვარდება.

ახლა ვთქვათ შრედინგერის (7,6) სტაციონარული მდგომარეობების განტოლებას აქვს დისკრეტული სპექტრი. ეს იმას ნიშნავს, რომ ენერგიებისათვის მივიღებთ დისკრეტულ მიმდევრობას $E_1,\ E_2,\dots E_n,\dots$, ასევე, ტალღური ფუნქციებიც გადაინომრება და გვექნება $\psi_1,\ \psi_2,\dots\psi_n\dots$ და ამ შემთხვევაში (7,8) გამოსახულებიდან გვექნება

$$\Psi_n(\mathbf{r},\ t)=\psi_n(\mathbf{r})\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}. \tag{7,10}$$

რადგან შრედინგერის (7,2) განტოლება წრფივია, ამიტომ მას დააკმაყოფილებს შემდეგი წრფივი კომბინაციაც

$$\Psi(\mathbf{r},\ t)=\sum_{n=1}^{\infty}C_n\psi_n(\mathbf{r})e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}, \tag{7,11}$$

სადაც C_n ნებისმიერი, საზოგადოდ კომპლექსური, დროზე დამოუკიდებელი, მუდმივებია. ცხადია, რომ (7,11) ფუნქცია იქნება შრედინგერის არასტაციონარული მდგომარეობების განტოლების ამონახსნი.

შრედინგერის განტოლებას შეიძლება ჰქონდეს უწყვეტი სპექტრიც. ამ შემთხვევაში მისი ამონახსნი უწყვეტად იქნება დამოკიდებული ენერგიაზე და ნაცვლად (7,11)-სა გვექნება შემდეგი გამოსახულება:

$$\Psi(\mathbf{r},\ t)=\int_{-\infty}^{+\infty}C(E)\,\psi(\mathbf{r},\ E)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\,dE. \tag{7,12}$$

აღსანიშნავია მეტად მნიშვნელოვანი გარემოება, რომ არც (7,11) და არც (7,12) სტაციონარულ მდგომარეობებს აღარ გამოხატავენ. როცა სხვადასხვა სტაციონარული მდგომარეობების ენერგიები ერთმანეთისაგან განსხვავებულია, მაშინ ამ ფუნქციებით გამოთვლილი ალბათობა და ალბათობის დენის ვექტორი დროზე

დამოუკიდებლები აღარ არიან. ამიტომ სტაციონარული მდგომარეობა ისეთ მდგომარეობას ეწოდება, რომელიც ხასიათდება ენერგიის განსაზღვრული მნიშვნელობით.

§ 8. სუპერპოზიციის პრინციპი

კვანტური მექანიკის ერთ-ერთ ფუნდამენტურ პრინციპს წარმოადგენს სუპერპოზიციის პრინციპი. რომელიც უშუალოდ ექსპერიმენტის შედეგია.

განვიხილოთ რაიმე ფიზიკური A სიდიდე, რომელმაც შეიძლება მიიღოს მნიშვნელობათა დისკრეტული მიმდევრობა:

$$A_1,\ A_2,\cdots,A_n,\cdots \tag{8,1}$$

შესაბამისი მდგომარეობის ფუნქციები აღვნიშნოთ:

$$\psi_1,\ \psi_2,\cdots\ \psi_n,\cdots \tag{8,2}$$

რომელიმე ψ_k ფუნქციის მოცემა ნიშნავს, რომ მისი შესაბამისი A ზუსტად უდრის A_k-ს, ე. ი. $A=A_k$.

სუპერპოზიციის პრინციპი ასე შეგვიძლია ჩამოვაყალიბოთ: თუ მოცემულ ფიზიკურ პირობებში ნაწილაკს შეუძლია იმყოფებოდეს თითოეულ (8,2) მდგომარეობაში, მაშინ მას შეუძლია იმყოფებოდეს მდგომარეობაშიც, რომელიც ხასიათდება (8,2) ფუნქციების წრფივი კომბინაციით, ე. ი.

$$\Psi=\sum_{n=1}^{\infty} C_n\psi_n \tag{8,3}$$

აღსანიშნავია, რომ სუპერპოზიციის ამ პირობას აკმაყოფილებს შრედინგერის განტოლება, რამდენადაც იგი წრფივი განტოლებაა. შრედინგერის განტოლების ეს თვისება ჩვენ უკვე გამოვიყენეთ წინა პარაგრაფში. ამგვარად, მათემატიკურ ენაზე სუპერპოზიციის პრინციპი იმას ნიშნავს, რომ კვანტური მექანიკის ყველა განტოლება, რომელსაც კი აკმაყოფილებს ψ ფუნქცია, წრფივი უნდა იყოს.

თუ ცალკეულ ψ_i ფუნქციას შეესაბამება გარკვეული $A=A_i$ მნიშვნელობა, (8,3) ფუნქციით განსაზღვრულ მდგომარეობას გარკვეული A-სიდიდე აღარ შეესაბამება.

განვიხილოთ თავისუფალი ნაწილაკის ორი სხვადასხვა მდგომარეობა

$$\psi_1(\mathbf{r})=e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_1\mathbf{r}},\quad \psi_2(\mathbf{r})=e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_2\mathbf{r}} \tag{8,4}$$

პირველ ნაწილაკს აქვს განსაზღვრული იმპულსი $\mathbf{p}_1$ მეორეს კი $\mathbf{p}_2$. მათი სუპერპოზიციით მივიღებთ მდგომარეობას

$$\Psi(\mathbf{r})=C_1 e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_1\mathbf{r}}+C_2 e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_2\mathbf{r}}, \tag{8,5}$$

რომელსაც განსაზღვრული იმპულსი აღარ შეესაბამება. ადვილი დასანახია, რომ $|C_1|^2$ არის ალბათობა იმისა, რომ იმპულსს აქვს $\mathbf{p}=\mathbf{p}_1$ მნიშვნელობა, ხოლო $|C_2|^2$ წარმოადგენს $\mathbf{p}=\mathbf{p}_2$ მნიშვნელობის ალბათობას. სუპერპოზიციის პრინციპი გვეუბნება, რომ თავისუფალი ნაწილაკი შესაძლებელია ნაწილობრივ მოხვდეს მდგომა-

რეობაში, რომელშიაც აქვს $\mathbf{p}_1$ იმპულსი და ნაწილობრივ მდგომარეობაში, რომლის იმპულსი $\mathbf{p}_2$-ის ტოლია, ამას აშკარად დავინახავთ, თუ ვიპოვით $|\Psi(\mathbf{r})|^2$-ს. გვექნება:

$$|\Psi(\mathbf{r})|^2 = |C_1|^2 + |C_2|^2 + 2\,Re\,C_1 C_2^* \, e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2,\, \mathbf{r})}, \tag{8,6}$$

ბოლო წევრი გამოხატავს ინტერფერენციას აღნიშნულ ორ გარკვეულ მდგომარეობას შორის.

შევნიშნოთ, რომ სუპერპოზიციის პრინციპს ადგილი აქვს კლასიკურ მექანიკაშიაც. ვთქვათ, გვაქვს რაიმე პერიოდული მოძრაობა, რომელიც ხასიათდება ψ_i ფუნქციებით $(i=1,\ 2\ldots)$, მაშინ კლასიკურ მექანიკაში Ψ (სუპერპოზიცია) ნიშნავს რაღაც ახალ მდგომარეობას, რომელიც განსხვავდება $\psi_1, \psi_2, \ldots \psi_n, \ldots$ მდგომარეობისაგან. მაგალითად, კლასიკურ მექანიკაში ψ-ს შეკრება თავისთავთან $\psi+\psi=2\psi$ გვაძლევს ახალ მდგომარეობას, რომელიც განსხვავდება მოცემული ψ მდგომარეობისაგან (გავიხსენოთ ორი ერთნაირი ამპლიტუდისა და ფაზის მქონე ტალღის შეკრება, რის შედეგადაც ვღებულობთ ტალღას, რომლის ამპლიტუდა ორჯერ აღემატება მოცემული ტალღის ამპლიტუდას). კვანტურ მექანიკაში კი ψ და $C\psi$ ერთიდაიგივე მდგომარეობას გამოხატავს.

თავი II

ოპერატორული აღრიცხვა

მექანიკა თავისი განვითარების სხვადასხვა ეტაპზე მათემატიკის სხვადასხვა დარგებს იყენებდა. მათემატიკის ზოგიერთი დარგის შექმნა და განვითარება თვით მექანიკის განვათარების უშუალო შედეგი იყო. ასე მაგალითად, ნიუტონის მექანიკის ჩამოყალიბებასთან დაკავშირებულია დიფერენციალური და ინტეგრალური აღრიცხვის შექმნა. აინშტაინის რელატივისტურმა მექანიკამ ფართოდ გამოიყენა ტენზორული აღრიცხვის მეთოდები. კვანტურ მექანიკასაც დასჭირდა მათემატიკის სპეციალური დარგები, სახელდობრ, ოპერატორული და მატრიცული აღრიცხვა. ჩვენ ვხედავთ, რომ ახალი მოვლენების აღმოჩენასთან ერთად, ხდება მათემატიკური მეთოდების გაღრმავება და მათემატიკის ახალი ცნებების გამოყენება. ძველი მეთოდები და ცნებები, რომლებიც საკმარისი იყო ცნობილი მოვლენების ასახსნელად, აღარ გამოდგებიან ბუნების მოვლენების უფრო დეტალურ თავისებურებათა ასაწერად. ატომური მოვლენების ახსნის აუცილებლობამ მოითხოვა ფიზიკაში ახალი მათემატიკური მეთოდების გამოყენება. იმ მათემატიკურ მეთოდებს შორის, რომლებიც გამოიყენება კვანტურ მექანიკაში, ძირითადია ოპერატორთა თეორია, რომლის მთავარი დებულებანი მოცემულია ამ თავში.

§ 9. ოპერატორთა თვისებები

L ოპერატორის ცნების ქვეშ იგულისხმება მათემატიკურ ოპერაციათა ის ერთობლიობა, რომელიც უნდა ჩატარდეს რაიმე $\varphi(\mathbf{r})$ ფუნქციაზე, რომ მივიღოთ $f(\mathbf{r})$ ფუნქცია, ე. ი.

$$L\varphi(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}). \tag{9,1}$$

L შეიძლება იყოს ნებისმიერი ოპერაცია: კოორდინატზე გამრავლების, გაყოფის, n-ჯერ გაწარმოების და სხვა.

კვანტურ მექანიკაში, ძირითადად, ისეთი ოპერატორები გამოიყენება, რომელთაც აქვთ შემდეგი თვისება:

$$L\left\{\sum_i C_i \varphi_i(\mathbf{r})\right\} = \sum_i C_i L\varphi_i(\mathbf{r}) \tag{9,2}$$

ასეთ ოპერატორებს წრფივ ოპერატორებს უწოდებენ. წრფივი ოპერატორია, მაგალითად, ლაპლასის ოპერატორი

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \tag{9,3}$$

წრფივია აგრეთვე

$$L = a\frac{\partial}{\partial x} \tag{9,4}$$

ოპერატორი და ა. შ.[1]

ოპერატორს ზოგჯერ შეიძლება ინტეგრალური სახეც ჰქონდეს; მაგალითად

$$Lf(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') f(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'. \tag{9,5}$$

ასეთ შემთხვევაში $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ფუნქციას ინტეგრალური ოპერატორის გულს უწოდებენ[2].

განვიხილოთ მაგალითად პუასონის განტოლება:

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}); \tag{9,6}$$

$\mathbf{r}$ არის რადიუსვექტორი. ცნობილია, რომ (9,6)-ის ამონახსნს აქვს სახე

$$\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi}\int \frac{F(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \tag{9,7}$$

სადაც $d\mathbf{r}' = dx'\, dy'\, dz'$ არის მოცულობის ელემენტი. (9,7) შეგვიძლია ჩავწეროთ ოპერატორული სახითაც

$$DF(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}), \tag{9,8}$$

სადაც D შემდეგი ინტეგრალური ოპერატორია

$$D = -\frac{1}{4\pi}\int \frac{d\mathbf{r}' \ldots}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \tag{9,9}$$

თანახმად განმარტებისა D ინტეგრალური ოპერატორის გული ყოფილა (9,6) განტოლების გრინის ფუნქცია:

$$G = -\frac{1}{4\pi}\, \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \tag{9,10}$$

თუ (9,6)-ზე ვიმოქმედებთ მარცხნიდან D ოპერატორით, მივიღებთ

$$D\Delta\varphi = DF = \varphi. \tag{9,11}$$

ეს კი იმას გვიჩვენებს, რომ ნამრავლი $D\Delta$ ერთზე გამრავლების ტოლფასია. ამ გარემოებას ფორმალურად ასე წერენ

$$D\Delta = 1. \tag{9,12}$$

ამ შემთხვევაში ამბობენ, რომ D და Δ ოპერატორები ერთმანეთის შებრუნებულია, ე. ი.

$$D = \Delta^{-1} \quad \text{ან} \quad D^{-1} = \Delta. \tag{9,13}$$

საზოგადოდ, თუ ორი ოპერატორის ნამრავლი ტოლფასია ერთზე გამრავლებისა, მაშინ ამ ოპერატორებს ურთიერთშებრუნებულს უწოდებენ. იმისათვის, რომ შემდგომში საშუალება გვქონდეს გამოსახულებების მოკლედ ჩაწერისა და ფორმალური ოპერაციების ჩატარებისა, ხელსაყრელია გამოვიყენოთ დირაკის აბსტრაქტული უსასრულო ვექტორული (საზოგადოდ კომპლექსური) სივრცის მეთოდი. დირაკის

---

[1] წრფივია მაგალითად, ჩვენს მიერ წინა თავში განხილული ჰამილტონის ოპერატორი:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}).$$

[2] შემდგომში მოცულობის ელემენტის აღსანიშნავად გამოვიყენებთ $d\mathbf{r} = dxdydz$ აღნიშვნას.

აბსტრაქტულ სივრცეში შემოვიღოთ სკალარული ნამრავლი $\langle\psi \mid \varphi\rangle$, რომელიც განვსაზღვროთ შემდეგნაირად:

$$\langle\psi \mid \varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\mathbf{r})\,\varphi(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}. \tag{9,14}$$

აშკარაა, რომ ასეთნაირად განმარტებულ სკალარულ ნამრავლს ექნება შემდეგი თვისებები:

$$\langle\psi \mid \varphi\rangle^* = \langle\varphi \mid \psi\rangle, \tag{9,15}$$

$$\langle\psi \mid \varphi_1 \pm \varphi_2\rangle = \langle\psi \mid \varphi_1\rangle \pm \langle\psi \mid \varphi_2\rangle; \tag{9,16}$$

თუ C არის მუდმივი, მაშინ

$$\langle C\psi \mid \varphi\rangle = C^*\langle\psi \mid \varphi\rangle, \tag{9,17}$$

$$\langle\psi \mid C\varphi\rangle = C\langle\psi \mid \varphi\rangle; \tag{9,18}$$

როცა ψ და φ ფუნქციები უწყვეტად არიან დამოკიდებული რაიმე t პარამეტრზე, მაშინ აშკარაა შემდეგი ტოლობის სამართლიანობაც:

$$\frac{d}{dt}\langle\psi \mid \varphi\rangle = \left\langle\frac{\partial\psi}{\partial t} \,\middle|\, \varphi\right\rangle + \left\langle\psi \,\middle|\, \frac{\partial\varphi}{\partial t}\right\rangle. \tag{9,19}$$

შეიძლება დამტკიცდეს, რომ შესრულებულია შვარც-ბუნიაკოვსკის უტოლობა[1]

$$|\langle\psi \mid \varphi\rangle|^2 \leqslant \langle\psi \mid \psi\rangle\langle\varphi \mid \varphi\rangle. \tag{9,20}$$

დაბოლოს ნათელია, რომ $\langle\psi \mid \psi\rangle \geqslant 0$; ამასთან, ნულთან ტოლობა გვექნება მაშინ, როცა ψ იგივურად ნულის ტოლია. სიდიდეს

$$\langle\psi \mid \psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*\psi\,d\mathbf{r} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 d\mathbf{r} \tag{9,21}$$

უწოდებენ ფუნქციის ნორმას. ამასთან, თუ ფუნქციის ნორმა სასრულია, მაშინ ψ ფუნქცია კვადრატულად ინტეგრებადია. ასეთ შემთხვევაში ყოველთვის შეიძლება ნორმა ერთის ტოლი გავხადოთ

$$\langle\psi \mid \psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\mathbf{r})|^2\,d\mathbf{r} = 1. \tag{9,22}$$

ასეთ ფუნქციებს ნორმირებულს უწოდებენ. შევნიშნოთ, რომ ჩვენ ხშირად საქმე გვექნება ისეთ ფუნქციებთანაც, რომელთა ნორმა სასრული სიდიდე არ არის. ასე მაგალითად, ცხადია, რომ თავისუფალი ნაწილაკის შესაბამისი ტალღური ფუნქციის, ე. ი. ბრტყელი ტალღის $\psi(\mathbf{r}) = A\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}\right)$ ნორმა უსასრულობის ტოლია.

ახლა გავარკვიოთ, რას წარმოადგენენ ჩვენ მიერ ზემოთ შემოღებულ აბსტრაქტულ სივრცეში განხილული ვექტორები. ავიღოთ $\langle\psi \mid \varphi\rangle$ სკალარული ნამ-

---

[1] შვარც-ბუნიაკოვსკის უტოლობის გამოყვანა ადვილია, თუ გამოვალთ აშკარა გამოსახულებიდან

$$(a\psi + b\varphi \mid a\psi + b\varphi) = |a|^2(\psi \mid \psi) + ab^*(\varphi \mid \psi) + a^*b(\psi \mid \varphi) + b^2(\varphi \mid \varphi) \geqslant 0.$$

ამ კვადრატული ფორმის არაუარყოფითობისათვის საჭიროა

$$(\psi \mid \psi)(\varphi \mid \varphi) - (\psi \mid \varphi)(\varphi \mid \psi) \geqslant 0,$$

რაც გვაძლევს დასამტკიცებელ უტოლობას.

რავლი და გავყოთ იგი ორ შემადგენელ ნაწილად $\langle\psi\,|$ და $|\,\varphi\rangle$. პირველს დირაკის მიხედვით ეწოდება ბრა-ვექტორი, მეორეს კი — კეტ-ვექტორი. ასეთი სახელწოდებები წარმოდგება ინგლისური სიტყვის „ფრჩხილების“ „bracket“ შუაზე გაყოფით. ამასთან, თანახმად (9,15) თვისებისა

$$\langle\psi\,|^{*}=\langle\psi\,|\,, \tag{9,23}$$

ე. ი. ბრა-ვექტორის შეუღლებული წარმოადგენს კეტ-ვექტორს და პირიქით. თუ ყურადღებით დავაკვირდებით სკალარული ნამრავლის თვისებებს, დავინახავთ, რომ აბსტრაქტული სივრცის ვექტორებს ჩვეულებრივი ვექტორების (ოღონდ კომპლექსური) ყველა თვისება გააჩნიათ. მაგალითად, (9,16)-დან ნათელია, რომ

$$|\,\psi_1+\psi_2\rangle=|\psi_1\rangle+|\psi_2\rangle \tag{9,24}$$

და სხვა.

თვითშეუღლებული ოპერატორები. შემოვიღოთ შეუღლებული ოპერატორის ცნება. მოცემული L ოპერატორის ერმიტულად შეუღლებული (და არა კომპლექსურად შეუღლებული!) L^+ ოპერატორი განისაზღვრება შემდეგი პირობით:

$$\langle\psi\,|\,L\varphi\rangle=\langle L^+\psi\,|\,\varphi\rangle \tag{9,25}$$

ან ცხადი სახით

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^* L\varphi\, d\mathbf{r}=\int_{-\infty}^{+\infty}(L^+\psi)^*\varphi d\mathbf{r}, \tag{9,26}$$

სადაც ψ და φ ნებისმიერი ფუნქციებია, რომლებიც ისპობიან ინტეგრების საზღვარზე.

კვანტურ მექანიკაში განსაკუთრებულ როლს თამაშობენ ე. წ. თვითშეუღლებული, ანდა ერმიტული ოპერატორები. თუ ადგილი აქვს ტოლობას $L^+=L$, მაშინ ოპერატორს თვითშეუღლებული (ერმიტული) ეწოდება. ამ შემთხვევაში თანახმად (9,25) ფორმულისა გვაქვს

$$\langle\psi\,|\,L\varphi\rangle=\langle L\psi\,|\,\varphi\rangle, \tag{9,27}$$

ანდა ცხადად ერმიტულობის პირობას შემდეგი სახე ექნება:

$$\int\psi^*(L\varphi)\,d\mathbf{r}=\int(L\psi)^*\varphi d\mathbf{r}. \tag{9,28}$$

ვიპოვოთ ახლა იმ ერმიტული ოპერატორების სახე, რომლებიც ფართოდ გამოიყენებიან კვანტურ მექანიკაში. ვაჩვენოთ, მაგალითად, რომ ოპერატორი $L=ia\dfrac{\partial}{\partial x}$, სადაც a ნამდვილი მუდმივია, ერმიტული ოპერატორია. ამისათვის შევამოწმოთ (9,27) პირობა. გვექნება

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left(ia\psi^*\frac{\partial\varphi}{\partial x}-i^*a\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\varphi\right)dx=ia\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\psi^*\frac{\partial\varphi}{\partial x}+\varphi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)dx=0,$$

ე. ი.

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d}{dx}(\psi^*\varphi)\,dx=(\psi^*\varphi)\Big|_{-\infty}^{+\infty}=0,$$

რადგან ψ და φ პირობის თანახმად საზღვრებზე ისპობა. ჩვენ ვხედავთ, რომ (9,28) პირობა დაცულია და, მაშასადამე, $ia\dfrac{\partial}{\partial x}$ ყოფილა ერმიტული ოპერა-

ტორი. აშკარაა, რომ ოპერატორი $L = a\frac{\partial}{\partial x}$ არ იქნება თვითშეუღლებული, რადგან (9,28) პირობა დაცული აღარ არის. ამგვარად, თუ განვიხილავთ სამგანზომილებიან შემთხვევას, შეიძლება ვთქვათ, რომ ოპერატორი

$$L = i a \nabla = i a \,\mathrm{grad} \tag{9,29}$$

არის თვითშეუღლებული.

ასევე ცხადია, რომ ყველა ნამდვილ სიდიდეზე გამრავლების ოპერატორიც თვითშეუღლებულია. მართლაც, თუ $L = x$, რადგან კოორდინატი ნამდვილი სიდიდეა, გვექნება

$$\langle \psi \,|\, x\varphi \rangle = \langle x\psi \,|\, \varphi \rangle.$$

ცხადია, რომ ასევე ერმიტული იქნება კოორდინატების ნებისმიერი ნამდვილი ფუნქცია. ახლა დავამტკიცოთ, რომ ლაპლასის ოპერატორიც ერმიტული ოპერატორია. ამისათვის გავიხსენოთ, რომ $\Delta = \nabla \cdot \nabla$ შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით: $\Delta = \nabla / i\,(i\nabla)$. შევამოწმოთ (9,28) ერმიტულობის პირობა. ამისათვის განვიხილოთ $\langle \psi \,|\, \Delta\varphi \rangle$ სკალარული ნამრავლი. იგი ასე შეგვიძლია დავწეროთ:

$$\langle \psi \,|\, \Delta\varphi \rangle = \langle \psi \;|\; -i\nabla i\nabla\varphi \rangle = \langle \psi \;|\; -i\nabla\varphi_1 \rangle, \tag{9,30}$$

სადაც $\varphi_1 \equiv i\nabla\varphi$. გავიხსენოთ ახლა, რომ ∇ / i ერმიტული ოპერატორია; მაშინ (9,30) ტოლობა მიიღებს სახეს

$$\langle \psi \,|\, \Delta\varphi \rangle = \langle -i\nabla\psi \,|\, \varphi_1 \rangle. \tag{9,31}$$

შევიტანოთ მარჯვენა მხარეში $\varphi_1 = i\nabla\varphi$ და კვლავ გამოვიყენოთ $i\nabla$ ოპერატორის ერმიტულობის თვისება. შედეგად მივიღებთ

$$\langle \psi \;|\; \Delta\varphi \rangle = \langle \Delta\psi \;|\; \varphi \rangle.$$

ამგვარად, ლაპლასის ოპერატორიც ერმიტული ყოფილა. ამრიგად, ჩვენ ვიპოვეთ შემდეგი ერმიტული ოპერატორები:

x-ზე გამრავლების ოპერატორი,

$$i a \frac{\partial}{\partial x} \tag{9,32}$$

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \tag{9,33}$$

შემდეგში ჩვენ დავინახავთ, რომ ფიზიკურ სიდიდეებს სწორედ ერმიტული ოპერატორები შეესაბამება. მაგალითად, ჩვენ მიერ განხილული ჰამილტონის ოპერატორი ერმიტულია, რამდენადაც იგი შეიცავს ლაპლასიანს და პოტენციალურ ენერგიას, რომლებიც ერმიტულებია.

ალგებრული მოქმედებანი ოპერატორებზე. A და B ორი ოპერატორის ჯამი ან სხვაობა ეწოდება ისეთ L ოპერატორს, რომლისთვისაც ადგილი აქვს ტოლობას

$$L\psi = A\psi \pm B\psi$$

ან ფორმალურად

$$L = A \pm B. \tag{9,34}$$

ვიმოქმედოთ ახლა ტოლობაზე

$$L\psi = \varphi$$

მარცხნიდან M ოპერატორით. მივიღებთ

$$ML\psi = M\varphi = f.$$

ოპერატორს

$$K = ML \tag{9,35}$$

ეწოდება M და L ოპერატორების ნამრავლი. აშკარაა, რომ საზოგადოდ $ML \neq LM$. მაგალითად, თუ $L = x$ და $M = \dfrac{\partial}{\partial x}$, მაშინ

$$\left(x \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi \neq \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) \tag{9,36}$$

როცა $LM = ML$ ოპერატორებს ურთიერთ გადასმადი ან კომუტატური ეწოდებათ.

ვთქვათ, მოცემულია ორი ოპერატორი A და B და ცნობილია მათი შეუღლებული ოპერატორები A^+ და B^+. როგორ ვიპოვოთ ამ ორი ოპერატორის ნამრავლის შეუღლებული ოპერატორი $(AB)^+$? განმარტებით

$$\langle \psi \mid AB\varphi \rangle = \langle (AB)^+ \psi \mid \varphi \rangle. \tag{9,37}$$

გარდავქმნათ მარცხენა მხარე. $B\varphi$ დროებით φ_1-ით აღვნიშნოთ და გამოვიყენოთ შეუღლებულობის პირობა A ოპერატორისათვის

$$\langle \psi \mid AB\varphi \rangle = \langle \psi \mid A\varphi_1 \rangle = \langle A^+ \psi \mid \varphi_1 \rangle. \tag{9,38}$$

ახლა $A^+\psi$ აღვნიშნოთ დროებით ψ_1-ით და φ_1-ისათვის შევიტანოთ $B\varphi$; გვექნება

$$\langle A^+ \psi \mid \varphi_1 \rangle = \langle \psi_1 \mid B\varphi \rangle. \tag{9,39}$$

გამოვიყენოთ შეუღლებულობის პირობა B ოპერატორისათვის და შემდეგ ψ_1-ისათვის კვლავ დავუბრუნდეთ $A^+\psi$ მნიშვნელობას; მივიღებთ

$$\langle \psi_1 \mid B\varphi \rangle = \langle B^+ \psi_1 \mid \varphi \rangle = \langle B^+ A^+ \psi \mid \varphi \rangle. \tag{9,40}$$

ასე გარდაიქმნება (9,37) ტოლობის მარცხენა მხარე და გვექნება ტოლობა

$$\langle B^+ A^+ \psi \mid \varphi \rangle = \langle (AB)^+ \psi \mid \varphi \rangle, \tag{9,41}$$

საიდანაც დავასკვნით, რომ

$$(AB)^+ = B^+ A^+. \tag{9,42}$$

როცა A და B ერმიტული ოპერატორებია, მაშინ

$$(AB)^+ = BA \tag{9,43}$$

ე. ი. AB ჯერ კიდევ არ არის ერმიტული. AB-ს ერმიტულობისათვის A და B-ს ერმიტულობის გარდა საჭიროა მათი კომუტატურობაც[1].

ვაჩვენოთ, რომ მუდმივი რიცხვისათვის ერმიტულად შეუღლებულობა ემთხვევა კომპლექსურად შეუღლებულობას. მართლაც დავუშვათ, რომ $L = c$, სადაც c რაიმე რიცხვია, კომპლექსური ან ნამდვილი; მაშინ ოპერატორის შეუღლებულობის (9,15) პირობა მოგვცემს

$$\langle \psi \mid c\varphi \rangle = \langle c^+ \psi \mid \varphi \rangle.$$

რადგან c მუდმივია, გვექნება, რომ

$$c = (c^+)^* \tag{9,44}$$

---

[1] (9,42) ფორმულის გამოყენებით ადვილად ვაჩვენებთ, რომ ლაპლასიანი ერმიტული ოპერატორია. მართლაც, $\Delta^+ = [(i\nabla)(\nabla/i)]^+ = \Delta$, ე. ი. $\Delta^+ = \Delta$.

საიდანაც $c^+=c^*$. კერძო შემთხვევაში, როცა $c=i$ მივიღებთ

$$i^+=i^*=-i. \tag{9,45}$$

როცა c ნამდვილია, $c^+=c$, ე. ი. ნამდვილი რიცხვი ყოველთვის თვითშეუღლებულია.

როგორც მაგალითი ვაჩვენოთ: თუ ოპერატორი ერმიტულია, მისი შებრუნებული ოპერატორიც ერმიტული იქნება. ვთქვათ, $AB=1$. ავიღოთ ერმიტულად შეუღლებული და გამოვიყენოთ (9,42), გვექნება $B^+A^+=1$. ცხადია, რომ თუ $A^+=A$, მაშინ $B^+=A^{-1}$. მაგრამ მეორეს მხრით, $A^{-1}=B$ და მაშასადამე $B^+=B$. ნათელია, ამიტომ, რომ ლაპლასის ოპერატორის შებრუნებული ოპერატორი D, რომელიც განმარტებულია (9,9) ფორმულით, ერმიტული ოპერატორი იქნება.

§ 10. ოპერატორთა საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები

ავიღოთ რაიმე წრფივი ოპერატორი L და შევადგინოთ შემდეგი ერთგვაროვანი განტოლება:

$$L\psi=\lambda\psi, \tag{10,1}$$

სადაც λ რაღაც პარამეტრია. ამ განტოლებას, სათანადო სასაზღვრო პირობების გათვალისწინებით, ნებისმიერი λ პარამეტრისათვის საზოგადოდ ამოხსნა არა აქვს. პარამეტრის იმ მნიშვნელობებს, რომელთათვისაც (10,1) განტოლებას აქვს არატრივიალური ამოხსნა (ψ ნულს არ უდრის იგივურად) ეწოდება საკუთარი მნიშვნელობები, შესაბამის ამოხსნებს კი საკუთარი ფუნქციები. ხოლო (10,1)-ს უწოდებენ საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლებას. საკუთარი მნიშვნელობების ერთობლიობას განტოლების სპექტრი ეწოდება. როცა საკუთარი მნიშვნელობები ისეთია, რომ ისინი შეადგენენ სიდიდეთა წყვეტილ მიმდევრობას ისე, რომ შეიძლება მათი გადანომვრა

$$\lambda_1,\ \lambda_2,\ \lambda_3,\dots\lambda_n,\dots \tag{10,1'}$$

მაშინ ამბობენ, რომ სპექტრი წყვეტილია (დისკრეტულია). ასეთ შემთხვევაში შესაძლებელია საკუთარი ფუნქციების გადანომვრაც: $\psi_1,\ \psi_2,\ \psi_3,\dots\psi_n$. როცა საკუთარი მნიშვნელობები უწყვეტად იცვლებიან რაიმე შუალედში, მაშინ სპექტრს უწყვეტი ეწოდება და ამ შემთხვევაში არ შეიძლება არც საკუთარი ფუნქციებისა და არც საკუთარი მნიშვნელობების გადანომვრა. ამ შემთხვევაში ფუნქციები უწყვეტად იქნებიან დამოკიდებული λ პარამეტრზე (საკუთარ მნიშვნელობებზე) $\psi=\psi(x,\ \lambda)$.

როცა ერთ საკუთარ მნიშვნელობას შეესაბამება ერთი საკუთარი ფუნქცია, მაშინ ამბობენ, რომ სპექტრი მარტივია; ხოლო როცა ერთ საკუთარ მნიშვნელობას რამოდენიმე საკუთარი ფუნქცია შეესაბამება, სპექტრს გადაგვარებული ეწოდება. ხოლო ფუნქციათა რიცხვი, რომელიც ერთ საკუთარ მნიშვნელობას შეესაბამება, განსაზღვრავს გადაგვარების ჯერადობას.

თუ (10,1) განტოლებას გავამრავლებთ მარცხნიდან ψ^* და ავიღებთ ინტეგრალს, გვექნება

$$\int \psi^* L\psi d\mathbf{r}=\lambda\int \psi^*\psi d\mathbf{r},$$

საიდანაც შეგვიძლია განვსაზღვროთ საკუთარი მნიშვნელობა

$$\lambda=\frac{\int \psi^* L\psi d\mathbf{r}}{\int \psi^*\psi d\mathbf{r}}=\frac{\langle \psi | L\psi\rangle}{\langle \psi | \psi\rangle} \tag{10,2}$$

ახლა დავამტკიცოთ მეტად მნიშვნელოვანი დებულება, რომ ერმიტული ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობა ნამდვილი (არსი) სიდიდეა. რადგან (10,2) გამოსახულების მნიშვნელი ყოველთვის ნამდვილია, ამ დებულების დასამტკიცებლად საკმარისია ვაჩვენოთ, რომ მრიცხველიც ნამდვილი სიდიდეა. ავიღოთ $\langle\psi \mid L\psi\rangle^*$ და გამოვიყენოთ L-ოპერატორის ერმიტულობის პირობა

$$\langle\psi \mid L\psi\rangle^* = \langle L\psi \mid \psi\rangle = \langle\psi \mid L\psi\rangle. \tag{10,3}$$

ამრიგად, (10,2)-ის მრიცხველიც ნამდვილი სიდიდეა და, მაშასადამე, $\lambda^* = \lambda$, რაც ამტკიცებს დებულებას. ერმიტული ოპერატორების ამ თვისების გამო მათ განსაკუთრებული მნიშვნელობა ენიჭებათ კვანტურ მექანიკაში.

ბოლოს განვიხილოთ მაგალითი. ვიპოვოთ

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \tag{10,4}$$

ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები. ადვილი შესამჩნევია, რომ ეს ოპერატორი ემთხვევა ჰამილტონის ოპერატორს ერთგანზომილებიანი მოძრაობის შემთხვევაში, როცა პოტენციალური ენერგია $V(x) = 0$. დავწეროთ საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება

$$H_0\psi(x) = E\psi(x), \tag{10,5}$$

სადაც E ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობებია. ამ განტოლებას სასაზღვრო პირობების მიხედვით შეიძლება ჰქონდეს როგორც უწყვეტი, ისე წყვეტილი სპექტრი. ჯერ ვიპოვოთ ისეთი ამონახსნები, რომლებიც სასრულია, უწყვეტია და აქვთ უწყვეტი წარმოებულები მთელს x-ღერძზე. ამ მიზნით (10,5) განტოლება გადავწეროთ შემდეგი სახით:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0, \tag{10,6}$$

სადაც

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \tag{10,7}$$

როგორც ვიცით, (10,6) განტოლებას ექნება ორი წრფივად დამოუკიდებელი ამონახსნი

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx}, \quad \psi_2(x) = Be^{-ikx}, \tag{10,8}$$

სადაც A და B ნებისმიერი მუდმივებია. სასაზღვრო პირობები დაცულია ნებისმიერი ნამდვილი k-თვის, რომელიც ძევს შუალედში $-\infty \leqslant k \leqslant +\infty$, ე. ი., როცა ენერგია E უწყვეტად იცვლება $(0, \infty)$ შუალედში:

$$0 \leqslant E \leqslant \infty; \tag{10,8'}$$

მაშასადამე, აღნიშნული სასაზღვრო პირობების დროს (10,5) განტოლების სპექტრი უწყვეტია. ამასთან, ენერგიის ერთ მნიშვნელობას შეესაბამება ორი საკუთარი ფუნქცია, რაც იმას ნიშნავს, რომ (10,5) განტოლების სპექტრი ორჯერადად გადაგვარებულია.

რადგან (10,5) განტოლება წრფივია, ამიტომ ადგილი ექნება სუპერპოზიციის პრინციპს და განტოლებას დააკმაყოფილებს ფუნქციაც

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \tag{10,9}$$

რომელსაც ზოგადი ამონახსნი ეწოდება.

ახლა (10,5) განტოლების ამონახსნს დამატებით დავადოთ შემდეგი სასაზღვრო პირობები:

$$\psi(0)=0, \quad \psi(a)=0; \tag{10,10}$$

მაშინ პირველი პირობის გამოყენებით (10,9)-ს შეიძლება მივცეთ სახე

$$\psi(x)=c \sin kx. \tag{10,11}$$

მეორე სასაზღვრო პირობა კი გვეუბნება, რომ

$$\sin ka=0, \tag{10,12}$$

რომლის ამონახსნია $ka=n\pi$, სადაც $n=1, 2, 3\ldots$. თუ გავიხსენებთ (10,7) ფორმულას საკუთარი მნიშვნელობებისათვის მივიღებთ

$$E_n=\frac{n^2\hbar^2}{2ma^2}, \tag{10,13}$$

ე. ი. განტოლებას ჰქონია დისკრეტული სპექტრი: E_1, E_2, $E_3, \ldots$ რომელთა შესაბამის ფუნქციებს ექნებათ სახე

$$\psi_n(x)=C \sin \frac{n\pi}{a} x. \tag{10,14}$$

ენერგიის ერთ საკუთარ მნიშვნელობას შეესაბამება ერთი საკუთარი ფუნქცია, ამიტომ სპექტრი მარტივია. ზემოთ ნაპოვნ ამონახსნებში შემავალი ნებისმიერი მუდმივების განსაზღვრა შეიძლება ნორმირების პირობით, რომელსაც ქვემოთ განვიხილავთ.

როგორც ვხედავთ, წყვეტილი სპექტრის ფუნქცია დამოკიდებულია ინდექსზე, რომელიც ღებულობს დისკრეტულ მნიშვნელობებს მაშინ, როცა უწყვეტი სპექტრის ფუნქციები უწყვეტად არის დამოკიდებული საკუთარ მნიშვნელობებზე.

§ 11. კრონეკერ-ვეიერშტრასის სიმბოლო და დირაკის ფუნქცია

ფიზიკაში და მათემატიკაში ხშირად იხმარება ე. წ. კრონეკერ-ვეიერშტრასის სიმბოლო, რომელიც ასეა განმარტებული:

$$\delta_{mn}=\begin{cases} 1, & \text{როცა } m=n \\ 0, & \text{როცა } m\neq n \end{cases} \tag{11,1}$$

ცხადია, δ_{mn} შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ როგორც მეორე რანგის ტენზორი. განმარტებიდან გამომდინარეობს, რომ მას აქვს მხოლოდ ერთის ტოლი დიაგონალური ელემენტები. იგი სიმეტრიულია, ე. ი. $\delta_{mn}=\delta_{nm}$. ამ სიმბოლოს გააჩნია მთელი რიგი მნიშვნელოვანი თვისებები. განვიხილოთ ასეთი ჯამი

$$\sum_n \delta_{mn} A_n.$$

ამ ჯამში ნულისაგან განსხვავდება მხოლოდ ის ერთი წევრი, სადაც δ_{mn}-ის ორივე ინდექსი ტოლია. ამიტომ აშკარაა, რომ

$$\sum_n \delta_{mn} A_n = A_m. \tag{11,2}$$

ეს არის δ_{mn} სიმბოლოს ფილტრაციის თვისება.

განვიხილოთ ინტეგრალი

$$J = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{+\pi} e^{i(m-n)x}\, dx$$

როცა $m=n$, მაშინ $J=1$, ხოლო როცა $m \neq n$, $J=0$. ამგვარად

$$\delta_{mn} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{+\pi} e^{i(m-n)x}\, dx \tag{11,3}$$

მაგრამ ფიზიკაში საქმე გვაქვს არა მხოლოდ ისეთ სიდიდეებთან, რომელთა გადანომვრაც შეიძლება (ე, ი. სიდიდეებთან, რომლებიც დამოკიდებული არიან რაიმე მთელ ინდექსზე), არამედ ისეთ სიდიდეებთანაც, რომლებიც უწყვეტად არიან დამოკიდებული გარკვეულ პარამეტრზე, ე. ი. როცა საქმე გვაქვს უწყვეტ სპექტრთან. ასეთ შემთხვევაში იძულებული ვართ δ_{mn}-ის ნაცვლად შემოვიღოთ მისი ანალოგიური სიმბოლო უწყვეტი სიდიდეებისათვისაც. ასეთი სიმბოლო შემოღებული იყო დირაკის მიერ 1926 წელს და მას დირაკის $\delta(x)$ ფუნქციას უწოდებენ. იმისათვის, რათა $\delta(x)$ ფუნქციას უწყვეტი სპექტრისათვის ისეთივე თვისებები ჰქონდეს, რაც δ_{mn}-ს—წყვეტილი სპექტრისათვის, საჭიროა $\delta(x)$ ფუნქცია განვმარტოთ ასე:

$$\delta(x-a) = \begin{cases} 0, & x \neq a \\ \infty, & x = a \end{cases} \tag{11,4}$$

და

$$\int_{\alpha}^{\beta} \delta(x-a)\,dx = 1 \tag{11,5}$$

აქ აუცილებელია, რომ a მოცემული იყოს საინტეგრაციო შუალედში. კერძო შემთხვევაში შეგვიძლია ავიღოთ $a=0$. $\delta(x)$ ფუნქციის გრაფიკი მოცემულია ნახ. 2. აშკარაა, რომ $\delta(x)$ ფუნქციის ეს განსაზღვრა არ ემთხვევა მათემატიკაში ცნობილი ფუნქციის განსაზღვრას, მაგრამ მიუხედავად ამისა, $\delta(x)$ ფუნქცია ყოველთვის შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ როგორც რაიმე უწყვეტი ფუნქციის ზღვრული მნიშვნელობა. აღსანიშნავია, რომ ისეთი უწყვეტი ფუნქცია, რომელსაც ექნებოდა (11,4) თვისება, სინამდვილეში არ არსებობს; სამაგიეროდ, არსებობს (11,5) ინტეგრალი. ამიტომ, საბოლოო ფორმულებში $\delta(x-a)$ ფუნქცია ინტეგრალქვეშა გამოსახულებაში უნდა შედიოდეს როგორც მამრავლი.

ნახ. 2.

შეიძლებოდა, რა თქმა უნდა, $\delta(x)$ ფუნქცია სულაც არ შემოგვეღო და გვეხელმძღვანელა სტილტიესის ინტეგრალებით, მაგრამ ამ შემთხვევაში საჭირო იქნებოდა ძალიან რთული გამოთვლების ჩატარება, იმ დროს, როცა $\delta(x)$ ფუნქციის საშუალებით გამოთვლები გაცილებით მარტივია.

$\delta(x)$ ფუნქციის განმარტებიდანვე ჩანს, რომ იგი ლუწი ფუნქციაა

$$\delta(-x) = \delta(x). \tag{11,6}$$

ასევე განმარტებიდანვე აშკარაა, რომ მას აქვს ფილტრაციის თვისება

$$\int f(x)\,\delta(x-a)\,dx = f(a). \tag{11,7}$$

მართლაც, რადგან $\delta(x-a)$ მხოლოდ მაშინაა ნულისაგან განსხვავებული, როცა $x=a$, შეგვიძლია ფუნქციის მნიშვნელობა ამ წერტილში ინტეგრალის ნიშნის გარეთ გავიტანოთ; დარჩენილი ინტეგრალი კი (11,5)-ის თანახმად ერთის ტოლია. კერძო შემთხვევაში, როცა $a=0$, (11,7) მოგვცემს

$$\int f(x)\,\delta(x)\,dx = f(0). \tag{11,7'}$$

სამი განზომილების შემთხვევაში გვაქვს ფორმულა

$$\delta(\mathbf{r}) = \delta(x)\,\delta(y)\,\delta(z). \tag{11,8}$$

ვაჩვენოთ, ახლა, რომ

$$\lim_{k\to\infty}\frac{\sin kx}{\pi x} = \delta(x). \tag{11,9}$$

მართლაც, როცა $x=0$, ზღვარი გვაძლევს უსასრულობას, ხოლო როცა $x\neq 0$, ზღვარს საზოგადოდ მათემატიკურად აზრი არა აქვს. როცა $k\to\infty$, $\frac{\sin kx}{\pi x}$ ძალიან სწრაფად ცვალებადი ფუნქციაა, ან, როგორც ამბობენ, სწრაფად ოსცილირებადია, ამიტომ მისი საშუალო მნიშვნელობა x-ის ნებისმიერად მცირე ინტერვალში ნულის ტოლი იქნება. გარდა ამისა,

$$\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin kx}{x}\,dx = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin t}{t}\,dt = 1. \tag{11,9'}$$

ამგვარად (11,9) სამართლიანია. ასევე მარტივად ვაჩვენებთ, რომ

$$\lim_{k\to\infty}\frac{\sin^2 kx}{\pi k x^2} = \delta(x). \tag{11,10}$$

განვიხილოთ ახლა შემდეგი გამოსახულება

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-c}^{+c} e^{ikx}\,dk = \frac{\sin xc}{\pi x}. \tag{11,10'}$$

თუ გადავალთ ზღვარზე, როცა $c\to\infty$, თანახმად (11,9), გვექნება

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\,dk \tag{11,11}$$

ან

$$\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(x-x')k}\,dk. \tag{11,11'}$$

როგორც ვხედავთ, ეს ფორმულაც სრულიად ანალოგიურია (11,3), ოღონდ წყვეტილი m, n ინდექსების ნაცვლად გვაქვს უწყვეტი x და x' პარამეტრები.

დავამტკიცოთ ახლა, რომ თუ $\alpha>0$, მაშინ სამართლიანია ფორმულა

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{\alpha}\,\delta(x). \tag{11,12}$$

თუ გამოვიყენებთ (11,11) გამოსახულებას, გვექნება

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik\alpha x}\,dk. \tag{11,13}$$

ამ ინტეგრალში შემოვიღოთ ახალი ცვლადი $\alpha k=t$, მაშინ $dk=dt/\alpha$. რადგან $\alpha>0$ ინტეგრაციის საზღვრები იგივე დარჩება და, ამიტომ

$$\delta(\alpha x)=\frac{1}{2\pi\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{itx}\,dt=\frac{1}{\alpha}\,\delta(x). \tag{11,14}$$

(11,11) გამოსახულებიდან გამოვყოთ ნამდვილი ნაწილი, მივიღებთ მნიშვნელოვან ფორმულას

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\cos kx\,dk. \tag{11,15}$$

სამგანზომილებიან შემთხვევაში (11,11) ასე გადაიწერება:

$$\delta(\mathbf{r})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\,d\mathbf{k}, \tag{11,16}$$

სადაც $d\mathbf{k}=dk_x dk_y dk_z$.

წინამდებარე კურსში დაგვჭირდება დირაკის $\delta(x)$ ფუნქციის ზოგიერთი სხვა თვისებაც, რომელთაც ქვემოთ მოვიტანთ და რომელთა დამტკიცება არ არის ძნელი ზემოთ მიღებული ფორმულების გამოყენებით. ეს თვისებებია:

$$x\delta(x)=0, \tag{11,17}$$

$$f(x)\,\delta(x-a)=f(a)\,\delta(x-a), \tag{11,18}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x'-x)\,\delta(x''-x)\,dx=\delta(x'-x'') \tag{11,19}$$

$$\delta[\varphi(x)]=\sum_i\frac{\delta(x-x_i)}{\left|\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x=x_i}\right|} \tag{11,20}$$

სადაც $x=x_i$ არის $\varphi(x)=0$ განტოლების მარტივი ფესვი. კერძო შემთხვევაში გვექნება მნიშვნელოვანი ფორმულა

$$\delta(x^2-a^2)=\frac{1}{2|a|}\{\delta(x-a)+\delta(x+a)\}. \tag{11,21}$$

ადვილად ვაჩვენებთ, რომ $\delta(x)$ ფუნქციის წარმოებული აკმაყოფილებს პირობას

$$x\,\frac{d\delta(x)}{dx}=-\delta(x). \tag{11,22}$$

ამასთან, წარმოებული კენტი ფუნქციაა x-ისა, რამდენადაც $\delta(x)$ ფუნქცია ლუწია, იმდენად იგი აკმაყოფილებს პირობას

$$\int_0^{\alpha}\delta(x)\,dx=\begin{cases}1/2, & \text{როცა } \alpha>0;\\ -1/2, & \text{როცა } \alpha<0.\end{cases} \tag{11,23}$$

ადვილია ჩვენება, რომ

$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=\frac{1}{rr'}\,\delta(r-r')\,\delta(\mathbf{n}-\mathbf{n}'), \tag{11,24}$$

სადაც $\mathbf{n}=\mathbf{r}/r$, $\mathbf{n}'=\mathbf{r}'/r'$ ერთეულოვანი ვექტორებია $\mathbf{r}$ და $\mathbf{r}'$-ის გასწვრივ. რადგან $r\geqslant 0$, ამიტომ ასეთი დელტა ფუნქციის განხილვის დროს ინტეგრირება აიღება $r=0$ წერტილიდან.

თუ გავიხსენებთ, რომ სფერული ფუნქციები ჩაკეტილ სისტემას ადგენენ, მაშინ ჩვენ შეგვიძლია დავწეროთ

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}^{*}(\overline{n})\, Y_{lm}(\overline{n'})=\delta(\mathbf{n}-\mathbf{n}'), \tag{11,25}$$

სადაც $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ ფუნქციაში $\overline{n}$ არგუმენტი აღნიშნავს იმას, რომ იგი დამოკიდებულია $\mathbf{n}=\mathbf{r}/r$ ორტის z-ღერძთან შედგენილ θ კუთხეზე და შესაბამის φ-აზიმუტზე; მაშასადამე, დირაკის $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ ფუნქცია შეგვიძლია გამოვხატოთ შემდეგი მწკრივის სახით:

$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=\frac{\delta(r-r')}{rr'}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}^{*}(\overline{n})\, Y_{lm}(\overline{n'}) \tag{11,26}$$

დელტა ფუნქციის ამ წარმოდგენას ხშირად იყენებენ გაფანტვის თეორიაში.

§ 12. საკუთარი ფუნქციების ორთო-ნორმირება

ახლა შევისწავლოთ საკუთარი ფუნქციების ნორმირებისა და ორთოგონალობის საკითხი. ჯერ განვიხილოთ დისკრეტული სპექტრის შემთხვევა, ე. ი. დავუშვათ, რომ L ერმიტული ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებია $\psi_1, \psi_2, \ldots \psi_k$. დავამტკიცოთ, რომ ნებისმიერი ერმიტული ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები ორთოგონალური და ნორმირებულია. ამისათვის ვიგულისხმოთ, რომ გადაგვარებას ადგილი არა აქვს და დავწეროთ ორი რომელიმე ψ_n და ψ_m ფუნქციისათვის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება:

$$L\psi_m=\lambda_m\psi_m, \tag{12,1}$$
$$L\psi_n=\lambda_n\psi_n.$$

λ_m და λ_n საკუთარი მნიშვნელობებია შესაბამისად ψ_m და ψ_n-ისა. ავიღოთ პირველი განტოლების კომპლექსურად შეუღლებული და შევადგინოთ სხვაობა

$$\psi_m^{*}L\psi_n-\psi_n(L\psi_m)^{*}=(\lambda_n-\lambda_m)\,\psi_m^{*}\psi_n, \tag{12,1'}$$

თუ მოვახდენთ ინტეგრაციას და გავიხსენებთ L ოპერატორის ერმიტულობის პირობას, გვექნება

$$(\lambda_n-\lambda_m)\int \psi_m^{*}\psi_n d\mathbf{r}=0. \tag{12,2}$$

განვიხილოთ ორი შემთხვევა. როცა $n\neq m$, მაშინ, რადგან გადაგვარება არა გვაქვს, ე. ი. $\lambda_n\neq\lambda_m$, მივიღებთ

$$\int \psi_m^{*}(\mathbf{r})\,\psi_n(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}=0 \tag{12,2'}$$

როცა $n=m$, მაშინ $\lambda_n-\lambda_m=0$. ამ შემთხვევაში ინტეგრალი შეგვიძლია ავიღოთ ნებისმიერი სიდიდის. ჩვენ მივიღებთ, რომ იგი ერთის ტოლია, ე. ი.

$$\langle\psi_m\,|\,\psi_m\rangle=\int \psi_m^{*}\psi_m\,d\mathbf{r}=\int |\,\psi_m|^2 d\mathbf{r}=1. \tag{12,2''}$$

ორთოგონალობის (12,2′) და ნორმირების (12,2″) პირობები ერთად ასე ჩაიწერება

$$\langle\psi_m\,|\,\psi_n\rangle=\int\psi_m^*\psi_n\,d\mathbf{r}=\delta_{mn}, \tag{12,3}$$

სადაც δ_{mn} არის კრონეკერ-ვეიერშტრასის სიმბოლო. (12,3) პირობას საკუთარ ფუნქციათა ორთო-ნორმირების პირობას უწოდებენ. შევნიშნოთ, რომ ორთოგონალური ფუნქციები ყოველთვის წრფივად დამოუკიდებლები არიან. მართლაც, ფუნქციები რომ წრფივად დამოკიდებული ყოფილიყვნენ გვექნებოდა

$$\sum_{i=1}^{n}c_i\psi_i=c_1\psi_1+c_2\psi_2+\cdots+c_n\psi_n=0, \tag{12,3′}$$

სადაც c_i მუდმივი კოეფიციენტებიდან ყველა არ არის ნულის ტოლი. თუ გავამრავლებთ ამ ტოლობას ψ_k^* და ავიღებთ ინტეგრალს, მივიღებთ

$$\sum c_i\int\psi_k^*\psi_i\,d\mathbf{r}=\sum_{i=1}^{n}c_i\delta_{ik}=0 \tag{12,4}$$

საიდანაც გვექნება, რომ ყველა $c_i=0$. ეს კი იმას ნიშნავს, რომ ორთოგონალური ფუნქციების სისტემა წრფივად დამოუკიდებელია.

ახლა განვიხილოთ ორთო-ნორმირების საკითხი გადაგვარების შემთხვევაში. დავუშვათ, რომ ერთ საკუთარ მნიშვნელობას შეესაბამება n საკუთარი ფუნქცია ψ_1, $\psi_2,\dots\psi_n$, ე. ი. ადგილი აქვს

$$\hat{L}\psi_1=\lambda_k\psi_1,\quad \hat{L}\psi_2=\lambda_k\psi_2\dots\hat{L}\psi_n=\lambda_k\psi_n \tag{12,5}$$

მაშინ აშკარაა, რომ ψ_1, $\psi_2,\dots\psi_n$ ფუნქციებიდან შეგვიძლია შევადგინოთ უსასრულო რაოდენობის კომბინაციები, რომლებიც იგივე განტოლებას აკმაყოფილებს და ეკუთვნის იგივე λ საკუთარ მნიშვნელობას. მართლაც, თუ ავიღებთ

$$\Phi=\sum_{i=1}^{n}c_i\psi_i \tag{12,6}$$

და ვიმოქმედებთ მასზე L ოპერატორით, მივიღებთ

$$\hat{L}\sum_{i=1}^{n}c_i\,\psi_i=\sum_i c_i\hat{L}\,\psi_i=\lambda_k\sum c_i\psi_i, \tag{12,7}$$

ზოგადობის დაურღვევლად შეგვიძლია ვიგულისხმოთ, რომ ψ_1, $\psi_2,\dots\psi_n$ წრფივად დამოუკიდებლები არიან. ვაჩვენოთ რომ გადაგვარებული საკუთარი ფუნქციებიდან შეგვიძლია შევადგინოთ ისეთი წრფივი კომბინაციები, რომლებიც ორთო-ნორმირებულები იქნებიან. ამისათვის მოვახდინოთ ჯერ ψ_1 ფუნქციის ნორმირება. a იყოს ნორმირების კოეფიციენტი. მაშინ $a^2\int\psi_1^*\psi_1 dx=1$, საიდანაც $a=\dfrac{1}{\sqrt{\langle\psi_1|\psi_1\rangle}}$.
თუ შემოვიღებთ ახალ φ_1 ფუნქციას, რომელიც ასეა განმარტებული

$$\varphi_1=\frac{\psi_1}{\sqrt{\langle\psi_1|\psi_1\rangle}}, \tag{12,8}$$

მაშინ იგი ერთზე ნორმირებული იქნება. ავიღოთ ახლა ნებისმიერი ორი ისეთი c_1 და c_2 რიცხვი. რომელიც ერთდროულად ნულის ტოლი არ არის და შევადგი-

ნოთ ისეთი ახალი ფუნქცია $\varphi_2' = c_1\varphi_1 + e_2\psi_2$, რომელიც ორთოგონალური იქნება φ_1-თან, ე. ი. რომ ადგილი ჰქონდეს ტოლობას

$$0 = \langle \varphi_1 \mid \varphi_2' \rangle = c_1 + c_2 \langle \varphi_1 \mid \psi_2 \rangle. \tag{12,9}$$

ψ_1, ψ_2 და, მაშასადამე, φ_1 და ψ_2-ის წრფივად დამოუკიდებლობის ძალით φ_2' ფუნქცია იგივურად არ შეიძლება ნული იყოს. ადვილია იმის ჩვენება, რომ

$$\varphi_2 = \frac{\varphi_2'}{\sqrt{\langle \varphi_2' \mid \varphi_2' \rangle}} \tag{12,10}$$

იქნება ნორმირებული ფუნქცია, რომელიც ამავე დროს ორთოგონალურია φ_1 ფუნქციასთან. შემდეგ შევადგინოთ $\varphi_3' = c_1^* \varphi_1 + c_2^* \varphi_2 + c_3^* \psi_3$ ფუნქცია, სადაც კოეფიციენტები c_1^*, c_2^*, c_3^*, რომლებიც ერთდროულად ნული არ არის, ისე შევარჩიოთ, რომ φ_3' ორთოგონალური იყოს φ_1 და φ_2-თან, ე. ი. ადგილი ჰქონდეს დამოკიდებულებებს:

$$\langle \varphi_1 \mid \varphi_3' \rangle = c_1^* + c_3^* \langle \varphi_1 \mid \varphi_3 \rangle = 0 \quad \text{და} \quad \langle \varphi_2 \mid \varphi_3' \rangle = c_2^* + c_3^* \langle \varphi_2 \mid \psi_3 \rangle = 0 \tag{12,11}$$

ψ_1, ψ_2, ψ_3 და მაშასადამე φ_1, φ_2, ψ_3 ფუნქციების წრფივად დამოუკიდებლობის ძალით φ_3' ფუნქცია არ შეიძლება იგივურად ნულის ტოლი იყოს. აქაც

$$\varphi_3 = \frac{\varphi_3'}{\sqrt{\langle \varphi_3' \mid \varphi_3' \rangle}} \tag{12,12}$$

იქნება ნორმირებული ფუნქცია, ორთოგონალური φ_1 და φ_2-თან. შეგვიძლია ეს პროცესი გავაგრძელოთ მანამ, სანამ $\psi_1, \psi_2, \ldots \psi_n$ ფუნქციების ნაცვლად არ შემოვიყვანთ ისეთ ახალ $\varphi_1, \varphi_2, \cdots \varphi_n$ ფუნქციებს, რომლებიც ორთონორმირებული იქნებიან.

მოვახდინოთ ახლა უწყვეტი სპექტრის შესაბამისი ფუნქციების ნორმირება. უწყვეტი სპექტრის შემთხვევაში ტალღური ფუნქციების გადანომვრა ისე, როგორც ეს გვქონდა წყვეტილი სპექტრის შემთხვევაში, აღარ შეიძლება. თუ წყვეტილი სპექტრის შემთხვევაში გვქონდა, m და n ინდექსებზე დამოკიდებული ψ_m და ψ_n ფუნქციები, უწყვეტი სპექტრის შემთხვევაში ტალღური ფუნქციები დამოკიდებული არიან უწყვეტ λ და λ' პარამეტრზე (საკუთარ მნიშვნელობაზე), ე. ი.

$$\psi_\lambda(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}, \lambda) \quad \text{და} \quad \psi_{\lambda'}(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}, \lambda'). \tag{12,13}$$

ჩვენ ვნახეთ, რომ უწყვეტი სპექტრი ფორმალურად ისეთივე ფორმულებით უნდა დავახასიათოთ, როგორიც გვაქვს წყვეტილი სპექტრის შემთხვევაში, ოღონდ წყვეტილი სპექტრის დამახასიათებელი δ_{mn} სიმბოლო უნდა შევცვალოთ დირაკის $\delta_{\lambda\lambda'} = \delta(\lambda - \lambda')$ ფუნქციით. ამიტომ (12,3) ფორმულის ანალოგიით უწყვეტი სპექტრისათვის გვექნება შემდეგი ორთო-ნორმირების პირობა:

$$\langle \psi_\lambda \mid \psi_{\lambda'} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\mathbf{r}, \lambda)\, \psi(\mathbf{r}', \lambda')\, dx = \delta(\lambda - \lambda'), \tag{12,14}$$

როცა ადგილი აქვს ამ პირობას, მაშინ ამბობენ, რომ $\psi(\mathbf{r}, \lambda)$ ფუნქცია ნორმირებულია დირაკის $\delta(\lambda - \lambda')$ ფუნქციაზე, ანდა ნორმირება მოხდენილია λ საკუთარი მნიშვნელობის სკალაზე. როგორც ვხედავთ, (12,14) ინტეგრალი, როცა $\lambda = \lambda'$, განშლადია. ეს მდგომარეობა დამახასიათებელია უწყვეტი სპექტრისათვის[1].

---

[1] შეიძლება ჩვენება, რომ თუ უწყვეტი სპექტრის ფუნქციების ნაცვლად ავიღებთ მათ პაკეტებს $\Psi = \int_{\lambda}^{\lambda + \Delta\lambda} \psi(x, \lambda)\, d\lambda$, მაშინ ამ პაკეტების ნორმირება და ორთოგონალობა ზუსტად ისეთი იქნება, რაც დისკრეტული სპექტრის ფუნქციებისათვის.

მოვახდინოთ მეათე პარაგრაფში განხილული მაგალითის შესაბამისი საკუთარი ფუნქციების ნორმირება. ჯერ განვიხილოთ დისკრეტული სპექტრი. შესაბამის ფუნქციას აქვს (10,14) სახე. (12,2'') პირობის თანახმად გვექნება

$$C^2\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}\,x\right)dx=1, \qquad (12,15)$$

საიდანაც C-სთვის მივიღებთ მნიშვნელობას $C=(2/a)^{1/2}$. ამგვარად, განხილულ მაგალითში ნორმირებულ დისკრეტული სპექტრის ფუნქციებს ექნებათ გამოსახულება

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}\,x\right); \qquad (12,16)$$

აშკარაა, რომ ეს ფუნქციები ორთოგონალურებიცაა.

ახლა მოვახდინოთ უწყვეტი სპექტრის (10,9) ფუნქციების ნორმირება. ეს ფუნქცია ჩავწეროთ შემდეგი სახით:

$$\psi_k(x)=Ae^{ikx} \qquad (12,17)$$

და ნორმირება მოვახდინოთ დირაკის $\delta(k-k')$ ფუნქციაზე. გვექნება

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^*(x)\,\psi_{k'}(x)\,dx=\delta(k-k'). \qquad (12,18)$$

შევიტანოთ (12,17) ფუნქციის მნიშვნელობა; მივიღებთ

$$A^2\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i(k'-k)x}\,dx=\delta(k-k'). \qquad (12,19)$$

თუ ამ გამოსახულებას შევადარებთ დირაკის დელტა ფუნქციის (11,11') წარმოდგენას, დავინახავთ, რომ $A=(2\pi)^{-1/2}$. მაშასადამე,

$$\psi_k(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{ikx}. \qquad (12,20)$$

საინტერესოა აღვნიშნოთ, რომ უწყვეტი სპექტრის განხილული ფუნქციის ნორმა განშლადია $\langle\psi_k|\psi_k\rangle=\infty$. ამიტომაც არ შეიძლება მათი ნორმირება (12,2'') პირობით.

§ 13. ნებისმიერი ფუნქციის გაშლა საკუთარი ფუნქციების მიხედვით

განვიხილოთ ახლა ერთი მნიშვნელოვანი საკითხი ფურიეს მწკრივთა თეორიიდან. ვთქვათ, გვაქვს ერმიტული ოპერატორი L და მისი ორთო-ნორმირებული სპექტრი; განვიხილოთ ჯერ დისკრეტული სპექტრის შემთხვევა. ვთქვათ, რომ $f(\mathbf{r})$ არის რაიმე ნებისმიერი კვადრატულად ინტეგრებადი ფუნქცია და შევეცადოთ იგი გავშალოთ L ოპერატორის საკუთარი ფუნქციების მიხედვით. დავუშვათ, რომ ეს გაშლა მოვახერხეთ და მას აქვს შემდეგი სახე:

$$f(\mathbf{r})=\sum_{m=0}^{n}a_m\psi_m(\mathbf{r})+R_n(\mathbf{r}). \qquad (13,1)$$

$R_n(\mathbf{r})$ არის ნაშთი. ჩვენი მიზანია გამოვარკვიოთ, თუ როდის გვექნება ისეთი გაშლა, როცა ნაშთი ნულია და $f(\mathbf{r})$ სავსებით დახასიათდება (13,1)-ის პირველი

წევრით. ამისათვის საჭიროა a_m კოეფიციენტების სათანადოდ შერჩევა. ცდომილება არჩევენ შემდეგ სიდიდეს:

$$\rho_n=\int |R_n(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}=\int \left| f(\mathbf{r})-\sum_{m=0}^{n} a_m\psi_m(\mathbf{r})\right|^2 d\mathbf{r}\cdot \tag{13,2}$$

საკუთარ ψ_m ფუნქციათა ორთო-ნორმირების გამო

$$\rho_n=\int |f(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}-\sum_m a_m^* \int f(\mathbf{r})\psi_m^*(\mathbf{r})d\mathbf{r}-$$

$$-\sum_m a_m \int f^*(\mathbf{r})\psi_m(\mathbf{r})d\mathbf{r}+\sum_m a_m^* a_m\cdot \tag{13,3}$$

ჩვენი მიზნისათვის საჭიროა ამ გამოსახულებას ჰქონდეს მინიმუმი a_m და a_m^* კოეფიციენტების მიმართ. მინიმუმის $\dfrac{\partial\rho_n}{\partial a_m^*}=0$ პირობიდან გვექნება

$$-\int f(\mathbf{r})\psi_m^*(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}+a_m=0, \tag{13,3'}$$

საიდანაც

$$a_m=\int f(\mathbf{r})\psi_m^*(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}. \tag{13,4}$$

ანალოგიურად

$$a_m^*=\int f^*(\mathbf{r})\psi_m(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}. \tag{13,5}$$

კოეფიციენტების ეს ექსტრემალური მნიშვნელობანი შევიტანოთ (13,3)-ში, მივიღებთ:

$$\rho_n=\int |f(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}-\sum_{m=0}^{n}|a_m|^2. \tag{13,6}$$

რადგან ვანმარტების თანახმად $\rho_n\geqslant 0$, ამიტომ უკანასკნელი ტოლობა მოგვცემს

$$\sum_{m=0}^{n}|a_m|^2\leqslant\int |f(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}. \tag{13,7}$$

ამ უტოლობას ბესელის უტოლობას უწოდებენ. თუ $f(\mathbf{r})$ ნებისმიერი ფუნქციისათვის

$$\lim_{n\to\infty}\rho_n=0 \tag{13,7'}$$

ან, რაც იგივეა,

$$\sum_{m=0}^{\infty}|a_m|^2=\int |f(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}. \tag{13,7''}$$

მაშინ ψ_m საკუთარ ფუნქციათა ერთობლიობას ეწოდება ჩაკეტილი. ასეთ შემთხვევაში არ შეიძლება მოინახოს ისეთი სხვა ახალი ფუნქცია, რომელიც ორთოგონალური იქნებოდა ყველა ψ_m ფუნქციასთან. მაშასადამე, ჩაკეტილი ფუნქციებისათვის ნაშთი $R_n=0$ და ნებისმიერი $f(\mathbf{r})$ ფუნქციისათვის გვექნება შემდეგი გაშლა:

$$f(\mathbf{r})=\sum_{m=0}^{\infty} a_m\psi_m(\mathbf{r}), \tag{13,8}$$

სადაც

$$a_m = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* (\mathbf{r}) f(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}; \tag{13,9}$$

a_m-ს ფურიეს კოეფიციენტი ეწოდება.

როცა ოპერატორის სპექტრი უწყვეტია, ე. ი. როცა ფუნქციებს აქვთ $\psi = \psi(\mathbf{r}, \lambda)$ სახე, მაშინ ნებისმიერი ფუნქცია სრულიად ანალოგიურად შეგვიძლია გავშალოთ ფურიეს ინტეგრალად

$$f(\mathbf{r}) = \int a(\lambda)\, \psi(\mathbf{r}, \lambda)\, d\lambda \tag{13,10}$$

სადაც

$$a(\lambda) = \int f(\mathbf{r}) \psi^* (\mathbf{r}, \lambda) d\mathbf{r}. \tag{13,11}$$

$f(\mathbf{r})$ შევიტანოთ (13,10) ფორმულიდან (13,11) ფორმულაში. მივიღებთ

$$a(\lambda) = \int a(\lambda') \left\{ \int \psi^* (\mathbf{r}, \lambda)\, \psi(\mathbf{r}, \lambda') d\mathbf{r} \right\} d\lambda'. \tag{13,12}$$

იგივეობა რომ მივიღოთ, საჭიროა უწყვეტი სპექტრის ფორმულები აკმაყოფილებდნენ პირობას

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* (\mathbf{r}, \lambda)\, \psi(\mathbf{r}, \lambda')\, d\mathbf{r} - \delta(\lambda - \lambda'); \tag{13,13}$$

ეს კი უწყვეტი სპექტრის ფუნქციების ნორმირების პირობაა.

ნებისმიერი ფუნქციის გაშლას ერმიტული ოპერატორის საკუთარი ფუნქციების მიხედვით დიდი გამოყენება აქვს კვანტურ მექანიკაში.

ახლა ტალღური ფუნქციების სრულობის პირობა ჩავწეროთ სხვა სახითაც. ამ მიზნით შევიტანოთ (13,9) ტოლობით განსაზღვრული ფურიეს კოეფიციენტი (13,8) გაშლაში; გვექნება

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* (\mathbf{r}') f(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}' \right) \psi_m(\mathbf{r}). \tag{13,14}$$

შევცვალოთ აჯამვისა და ინტეგრაციის რიგი; მივიღებთ

$$f(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r}' f(\mathbf{r}') \left(\sum_{m=0}^{\infty} \psi_m^* (\mathbf{r}')\, \psi_m(\mathbf{r}) \right), \tag{13,15}$$

საიდანაც ნათელია, რომ

$$\sum_{m=0}^{\infty} \psi_m^* (\mathbf{r}')\, \psi_m(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{13,16}$$

ამ ფორმულას უწოდებენ დისკრეტული სპექტრის $\psi_m(\mathbf{r})$ ფუნქციების სრულობის პირობას[1]. თუ (13,11) კოეფიციენტს შევიტანთ (13,10) გაშლაში, სრულიად ანალოგიურად მივიღებთ $\psi(\mathbf{r}, \lambda)$ უწყვეტი სპექტრის სრულობის შემდეგ პირობას:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_\lambda^* (\mathbf{r})\, \psi_\lambda (\mathbf{r}') d\lambda = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{13,17}$$

[1] ამ ფორმულის კერძო შემთხვევას წარმოადგენს, მაგალითად, (11,26) გამოსახულება.

კვანტურ მექანიკაში ჩვენ გვხვდება ისეთი ოპერატორებიც, რომელთაც აქვთ როგორც დისკრეტული, ისე უწყვეტი სპექტრი; ამასთან, უწყვეტი სპექტრის ფუნქციები ორთოგონალური არიან დისკრეტული სპექტრის ფუნქციებისა. აღნიშნულ შემთხვევაში ჩაკეტილ სისტემას ცალკე დისკრეტული და ცალკე უწყვეტი სპექტრის ფუნქციები აღარ ადგენენ. სრულ სისტემას ამ დროს ადგენენ ორივე სპექტრის ფუნქციები. ამიტომ ნებისმიერი ფუნქცია შეგვიძლია გავშალოთ ამ სრულ სისტემად; გვექნება

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \psi_m(\mathbf{r}) + \int_{-\infty}^{+\infty} a(\lambda)\, \psi(\mathbf{r}, \lambda)\, d\lambda, \tag{13,18}$$

სადაც ჯამი აიღება მთელი დისკრეტული სპექტრის მიხედვით, ინტეგრალი—მთელი უწყვეტი სპექტრით. საკუთარ ფუნქციათა ჩაკეტილობის პირობას კი ექნება სახე

$$\sum_m \psi_m^*(\mathbf{r}')\psi_m(\mathbf{r}) + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_\lambda^*(\mathbf{r})\, \psi_\lambda(\mathbf{r}')\, d\lambda = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{13,19}$$

ამ გამოსახულებას ხშირად ფორმალურად ასეც წერენ ხოლმე

$$\left(\sum + \int\right) \psi_\lambda^*(\mathbf{r})\psi_\lambda(\mathbf{r}')\, d\lambda = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \tag{13,20}$$

სადაც იგულისხმება, რომ λ იღებს როგორც დისკრეტულ, ისე უწყვეტ მნიშვნელობებს.

§ 14. კომუტატურ ოპერატორთა თვისებები

კომუტატურ ოპერატორებს დიდი მნიშვნელობა აქვს კვანტურ მექანიკაში; კერძოდ დიდი გამოყენება აქვს შემდეგ თეორემას:

კომუტატურ ოპერატორებს აქვთ საერთო საკუთარი ფუნქცია. ვთქვათ, მოცემული გვაქვს L და M ოპერატორი, რომლებიც აკმაყოფილებენ პირობას $ML = LM$. დავწეროთ L ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება

$$L\psi = \lambda\psi. \tag{14,1}$$

ამ ტოლობაზე მარცხნიდან ვიმოქმედოთ M ოპერატორით; გვექნება

$$ML\psi = \lambda M\psi. \tag{14,2}$$

კომუტატურობის ძალით ეს ტოლობა ასეც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$L(M\psi) = \lambda(M\psi), \tag{14,3}$$

თუ აღვნიშნავთ $M\psi = \psi_1$, მივიღებთ

$$L\psi_1 = \lambda\psi_1. \tag{14,4}$$

ვიგულისხმოთ, რომ (14,1) განტოლებას აქვს ერთადერთი ამოხსნა[1]. ამისათვის საჭიროა, რომ ψ და ψ_1 ერთმანეთისაგან მხოლოდ მუდმივით განსხვავდებოდნენ, ე. ი.

$$\psi_1 = \mu\psi \tag{14,5}$$

ან, თუ გავიხსენებთ ψ_1 აღნიშვნას, მაშინ

$$M\psi = \mu\psi. \tag{14,6}$$

---

[1] აღნიშნულ თეორემას გადაგვარების შემთხვევაში, საზოგადოდ, ადგილი არა აქვს.

ამრიგად ψ ფუნქცია აკმაყოფილებს M ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლებასაც და ამით თეორემა დამტკიცებულია.

ვაჩვენოთ, რომ ადგილი აქვს შებრუნებულ თეორემასაც. გარკვეულობის მიზნით განვიხილოთ დისკრეტული სპექტრი და დავუშვათ, რომ ψ_n არის საერთო საკუთარი ფუნქცია ორი L და M ოპერატორის, ე. ი. ადგილი აქვს ტოლობებს:

$$L\psi_n = \lambda_n \psi_n, \tag{14,7}$$

$$M\psi_n = \mu_n \psi_n. \tag{14,8}$$

ვაჩვენოთ, რომ L და M ოპერატორები კომუტატური არიან. ამისათვის პირველ ტოლობაზე მარცხნიდან ვიმოქმედოთ M ოპერატორით, მეორეზე კი—L-ით. მივიღებთ:

$$ML\psi_n = \lambda_n M\psi_n = \lambda_n \mu_n \psi_n,$$

$$LM\psi_n = \mu_n L\psi_n - \mu_n \lambda_n \psi_n.$$

თუ პირველს გამოვაკლებთ მეორეს, გვექნება

$$(ML - LM)\,\psi_n = 0. \tag{14,9}$$

გავშალოთ ნებისმიერი $\varphi(x)$ ფუნქცია L და M ოპერატორის საერთო საკუთარი ψ_n ფუნქციების ფურიეს მწკრივად

$$\varphi(x) = \sum a_n \psi_n(x). \tag{14,10}$$

რადგან (14,9) ტოლობა დაცულია ყველა $\psi_n(x)$ ფუნქციებისათვის, იგი დაცული იქნება ნებისმიერი $\varphi(x)$ ფუნქციისათვისაც, საიდანაც დავასკვნით, რომ

$$ML = LM. \tag{14,11}$$

იგივეს მივიღებდით ოპერატორებს უწყვეტი სპექტრი რომ ჰქონოდა. აღვნიშნოთ, რომ იგივე თეორემებს ადგილი აქვთ ოპერატორთა ნებისმიერი რიცხვის შემთხვევაშიც. სახელდობრ, იმისათვის, რომ რამოდენიმე ოპერატორს ჰქონდეს საერთო საკუთარი ფუნქცია, საჭიროა ყველა ეს ოპერატორი ერთმანეთთან კომუტატური იყოს.

ამგვარად, ჩვენ დავამტკიცეთ შემდეგი: თუ ოპერატორები კომუტატურნი არიან, მათ საერთო საკუთარი ფუნქცია აქვთ და, პირიქით, თუ ოპერატორებს აქვთ საერთო საკუთარი ფუნქცია, მაშინ ისინი ერთმანეთთან კომუტატურნი არიან.

დავამთავრეთ რა ოპერატორთა ზოგიერთი თვისების შესწავლა, გავაკეთოთ შემდეგი შენიშვნები:

1. კვანტურ მექანიკას საქმე აქვს წრფივ ერმიტულ ოპერატორებთან, ამიტომ ხშირად ერმიტულობასა და წრფივობას აღარ მივუთითებთ. ოპერატორებზე მოქმედებისას შეცდომა რომ არ დავუშვათ, საჭიროა ოპერატორს მარჯვნივ მივუწეროთ ის ფუნქცია, რომელზედაც იგი მოქმედებს. როცა გვაქვს ოპერატორთა ნამრავლი, ყოველთვის უნდა დავიცვათ ოპერატორთა რიგი; ჯერ მოქმედებს ψ-თან მარცხნიდან ყველაზე ახლოს მდგომი ოპერატორი, შემდეგ მარცხნიდან მეორე უახლოესი ოპერატორი და ა. შ. წინააღმდეგ შემთხვევაში, როცა ოპერატორები კომუტატური არ არიან, დავუშვებთ შეცდომას. $\left(\text{გავიხსენოთ } \frac{\partial}{\partial x}\, x\psi \neq x\frac{\partial\psi}{\partial x} \text{ მაგალითი}\right)$.

2. ოპერატორთა ჯამის ხარისხში უნდა გავიგოთ ამ ჯამის მოქმედება თანმიმდევრობით იმდენჯერ, რამდენიც არის ხარისხის მაჩვენებელი, მაგალითად, ორი ოპერატორის კვადრატის შემთხვევაში

$$(L+M)^2\psi=(L+M)(L+M)\psi=(L^2+LM+ML+M^2)\psi \tag{14,12}$$

და არა

$$(L+M)^2\psi=(L^2+2LM+M^2)\psi \tag{14,13}$$

ეს უკანასკნელი ტოლობა სამართლიანია მხოლოდ მაშინ, როცა L და M ოპერატორები კომუტატურებია, ე. ი. როცა $LM=ML$.

3. როდესაც მოცემული გვაქვს L ოპერატორის რაიმე ფუნქცია $f(L)$, მაშინ ასეთი რთული ოპერატორის მოქმედება უნდა განვიხილოთ როგორც $f(L)$ ოპერატორის მწკრივად გაშლა, ე. ი.

$$f(L)=f(0)+L\left(\frac{\partial f}{\partial L}\right)_0+\frac{L^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial L^2}\right)_0+\cdots \tag{14,14}$$

ასე, მაგალითად, $f(L)=\exp(L)$ ოპერატორში იგულისხმება შემდეგი მწკრივი

$$e^L=1+L+\frac{L^2}{2}+\ldots=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{L^n}{n!} \tag{14,15}$$

4. ოპერატორსა და მის შესაბამის საკუთარ მნიშვნელობას ზოგჯერ ერთიდაიგივე ასოთი აღვნიშნავთ. ოღონდ ოპერატორს თავზე „ქუდს" — $\wedge$ — გავუკეთებთ. ასე მაგალითად, იმპულსის ოპერატორს აღვნიშნავთ $\hat{\mathbf{p}}$-თი, ხოლო მის საკუთარ მნიშვნელობას — p-თი, და ა. შ. თუ ოპერატორი ამავე დროს ვექტორიც არის, მაშინ იგი უფრო მუქი ასოთი იქნება აღნიშნული. მაგალითად, $\hat{\mathbf{p}}$ არის იმპულსის ვექტოროპერატორი, ხოლო p იქნება მისი საკუთარი მნიშვნელობა.

§ 15. ბრა- და კეტ-ვექტორების თვისებები

ჩვენ ადრე შემოვიღეთ დირაკის ბრა- და კეტ-ვექტორები. ახლა შევისწავლოთ მათი ზოგიერთი მნიშვნელოვანი თვისება. ჯერ ერთი, ცხადია, რომ $|\psi\rangle$ ვექტორზე წრფივი ოპერატორის მოქმედებით კვლავ კეტ-ვექტორს მივიღებთ

$$\hat{A}\,|\psi\rangle=|\Phi\rangle; \tag{15,1}$$

ამიტომ ჩვენ შეგვიძლია დავწეროთ რაიმე $\hat{A}$ ოპერატორის საკუთარი ვექტორებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება

$$\hat{A}\,|\psi\rangle=a\,|\psi\rangle. \tag{15,2}$$

ამ განტოლებას შეიძლება ჰქონდეს როგორც დისკრეტული, ისე უწყვეტი სპექტრი. დისკრეტული სპექტრის შემთხვევაში საკუთარი ვექტორები შეგვიძლია აღვნიშნოთ $|\psi_n\rangle$-ით. როცა $\hat{A}$ ერმიტული ოპერატორია, მაშინ ეს ვექტორები ორთო-ნორმირებული იქნებიან პირობით

$$\langle\psi_n\,|\,\psi_m\rangle=\delta_{mn}. \tag{15,3}$$

უწყვეტი სპექტრის შემთხვევაში საკუთარი ვექტორები შეგვიძლია აღვნიშნოთ $|\psi_a\rangle$-თი, მაშინ მათი ორთო-ნორმირება შეგვიძლია მოვახდინოთ დირაკის დელტა ფუნქციაზე

$$\langle\psi_{a'}\,|\,\psi_a\rangle=\delta(a'-a). \tag{15,4}$$

აქვე მივუთითოთ, რომ ხშირად წერის გამარტივების მიზნით დირაკის ვექტორებს მხოლოდ მათი საკუთარი მნიშვნელობებით გამოხატავენ; ასე მაგალითად, ნაცვლად $|\psi_m\rangle$-ისა წერენ $|m\rangle$, ხოლო ნაცვლად $|\psi_a\rangle$-სი წერენ $|a\rangle$.

დირაკის ვექტორებს აქვთ ორი შესანიშნავი თვისება. ერთი, რომ ბრა და კეტ-ვექტორების ნამრავლი წარმოადგენს წრფივ ოპერატორს, ე. ი.

$$\hat{B} = |\psi\rangle\langle\varphi| \tag{15,5}$$

წრფივი ოპერატორია. დამტკიცების მიზნით ეს გამოსახულება გავამრავლოთ მარჯვნიდან რაიმე $|\chi\rangle$ კეტ-ვექტორზე; გვექნება

$$\hat{B}\,|\chi\rangle = |\psi\rangle\langle\varphi|\chi\rangle. \tag{15,6}$$

$\langle\varphi|\chi\rangle$ სკალარული ნამრავლი მუდმივი რიცხვია, თუ მას აღვნიშნავთ b-თი, მაშინ

$$\hat{B}\,|\chi\rangle = b\,|\psi\rangle, \tag{15,7}$$

რომელიც გვიჩვენებს, რომ კეტ-ვექტორზე რაიმე $\hat{B}$ ოპერატორის მოქმედებით მიიღება კვლავ კეტ-ვექტორი.

მეორე თვისების თანახმად ბრა- და კეტ-ვექტორებისაგან შეგვიძლია შევადგინოთ ერთეულოვანი ოპერატორი; კერძოდ, დისკრეტული სპექტრის შემთხვევაში, შეგვიძლია დავწეროთ

$$\sum_{n=1}^{\infty}|\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1, \tag{15,8}$$

სადაც იგულისხმება, რომ $|\psi_n\rangle$ ვექტორები ადგენენ სრულ სისტემას. (15,8) ტოლობის დამტკიცების მიზნით გავამრავლოთ იგი მარცხნიდან $\langle\psi_m|$-ზე, ხოლო მარჯვნიდან $|\psi_{m'}\rangle$-ვექტორზე, გვექნება

$$\sum_{n=1}^{\infty}\langle\psi_m|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi_{m'}\rangle = \langle\psi_m|\psi_{m'}\rangle. \tag{15,9}$$

დირაკის ვექტორების ორთო-ნორმირების ძალით

$$\sum_n \delta_{mn}\delta_{nm'} = \delta_{mm'}, \tag{15,10}$$

საიდანაც ფილტრაციის თვისების გათვალისწინებით მივიღებთ იგივეობას. უწყვეტი სპექტრის შემთხვევაში ჩვენ შეგვიძლია შევადგინოთ შემდეგი ერთეულოვანი ოპერატორი:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} da\,|\psi_a\rangle\langle\psi_a| = 1, \tag{15,11}$$

რომელიც ასევე მარტივად დამტკიცდება.

როცა ოპერატორს აქვს როგორც დისკრეტული, ისე უწყვეტი სპექტრი, მაშინ სრულ სისტემას ადგენენ დისკრეტული და უწყვეტი სპექტრის ვექტორები, ამიტომ ერთეულოვან ოპერატორს ექნება სახე:

$$\sum_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m| + \int_{-\infty}^{+\infty} da\,|\psi_a\rangle\langle\psi_a| = 1 \tag{15,12}$$

ბრა- და კეტ-ვექტორების (15,8) და (15,11) თვისებები დიდ შესაძლებლობებს იძლევა ამ ვექტორებზე ფორმალური ოპერაციების ჩატარებისა, რამდენადაც ოპერატორებს ან ვექტორებს შორის ყოველთვის შეგვიძლია ჩავსვათ ამ ტოლობებით განსაზღვრული ერთიანები; მაგალითად, $\langle \chi \mid \varphi \rangle$ სკალარული ნამრავლი ასე შეგვიძლია წარმოვადგინოთ:

$$\langle \chi \mid \varphi \rangle = \sum_n \langle \chi \mid \psi_n \rangle \langle \psi_n \mid \varphi \rangle. \tag{15,13}$$

იბადება კითხვა, როგორ გადავიდეთ რაიმე ოპერატორის შესაბამისი დირაკის ვექტორებიდან საკუთარ ფუნქციებზე? ამასთან, საკუთარი ფუნქციები შეიძლება დამოკიდებული იყოს სხვადასხვა ცვლადზე: კოორდინატებზე, იმპულსებზე და სხვ. კოორდინატების შერჩევას კვანტურ მექანიკაში წარმოდგენის შერჩევას უწოდებენ. როცა $\psi = \psi(\mathbf{r})$, მაშინ ამბობენ, რომ არჩეული გვაქვს კოორდინატული, ან „x-წარმოდგენა", როცა $\psi = \psi(\mathbf{p})$, მაშინ ტალღური ფუნქცია მოცემულია იმპულსურ ან, „p-წარმოდგენაში" და ა. შ. ჯერ განვიხილოთ კოორდინატული წარმოდგენა; ამ მიზნით დავწეროთ რადიუსვექტორის (კოორდინატების) საკუთარი ვექტორებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება

$$\hat{\mathbf{r}} \mid \psi_{\mathbf{r}} \rangle = \mathbf{r} \mid \psi_{\mathbf{r}} \rangle, \tag{15,14}$$

აქ $\mid \psi_{\mathbf{r}} \rangle = \mid \mathbf{r} \rangle$ რადიუსვექტორის საკუთარი კეტ-ვექტორია. (15,14) განტოლებას უწყვეტი სპექტრი ექნება; თუ მას მარცხნიდან გავამრავლებთ $\langle \psi_{\mathbf{r}'} \mid \equiv \langle \mathbf{r}' \mid$ ბრა-ვექტორზე გვექნება

$$\langle \psi_{\mathbf{r}'} \mid \hat{\mathbf{r}} \mid \psi_{\mathbf{r}} \rangle = \mathbf{r} \langle \psi_{\mathbf{r}'} \mid \psi_{\mathbf{r}} \rangle. \tag{15,15}$$

უწყვეტი ფუნქციების ორთო-ნორმირების პირობით

$$\langle \psi_{\mathbf{r}'} \mid \psi_{\mathbf{r}} \rangle \equiv \langle \mathbf{r}' \mid \mathbf{r} \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \tag{15,16}$$

ამიტომ კოორდინატულ წარმოდგენაში

$$\langle \mathbf{r}' \mid \hat{\mathbf{r}} \mid \mathbf{r} \rangle = \mathbf{r}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{15,17}$$

საინტერესოა აღვნიშნოთ, რომ ნებისმიერ $V(\mathbf{r})$ ოპერატორს კოორდინატულ წარმოდგენაში ექნება სახე

$$\langle \mathbf{r} \mid \hat{V} \mid \mathbf{r}' \rangle = V(\mathbf{r})\, \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{15,18}$$

ამ ტოლობის დამტკიცება ადვილია, თუ გამოვალთ განტოლებიდან

$$\hat{V}(\mathbf{r}) \mid \psi \rangle = V(\mathbf{r}) \mid \psi \rangle, \tag{15,19}$$

საიდანაც

$$\int \langle \mathbf{r} \mid \hat{V} \mid \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' \mid \psi \rangle d\mathbf{r}' = V(r) \langle \mathbf{r} \mid \psi \rangle, \tag{15,20}$$

რომელსაც აკმაყოფილებს (15,18) გამოსახულება.

როგორც ვხედავთ, საკუთარი $\mid \mathbf{r} \rangle$ ვექტორები ადგენენ სრულ სისტემას, ამიტომ შეგვიძლია შემოვიღოთ მეტად მნიშვნელოვანი ერთეულოვანი ოპერატორი

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r} \mid \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} \mid = 1, \tag{15,21}$$

რომელსაც კოორდინატული ბაზისის ერთეულოვანი ოპერატორი ვუწოდოთ. (15,21) ფორმულის სამართლიანობაში ადვილად დავრწმუნდებით მარცხნიდან

$\langle \mathbf{r}' \mid$ მარჯვნიდან კი $\mid \mathbf{r} \rangle$- ვექტორზე გამრავლებით და ორთო-ნორმირების (15,16) პირობის გათვალისწინებით.

ახლა ჩავსვათ (15,21) ოპერატორი $\langle \psi \mid \varphi \rangle$ სკალარულ ნამრავლში; გვექნება

$$\langle \psi \mid \varphi \rangle = \int d\mathbf{r} \, \langle \psi \mid \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} \mid \varphi \rangle. \tag{15,22}$$

თუ ამ გამოსახულებას შევადარებთ სკალარული ნამრავლის (9,14) განმარტებას, დავინახავთ, რომ

$$\langle \mathbf{r} \mid \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}); \quad \langle \psi \mid \mathbf{r} \rangle = \psi^*(\mathbf{r}), \tag{15,23}$$

მაშასადამე, თუ ჩვენ გვაქვს რაიმე $\hat{A}$ ოპერატორის საკუთარი $\mid \psi \rangle$ კეტ-ვექტორი და მას სკალარულად გავამრავლებთ კოორდინატული ბაზისის $\langle \mathbf{r} \mid$ ვექტორზე, მივიღებთ ამავე ოპერატორის კოორდინატული წარმოდგენის $\psi(\mathbf{r})$ ფუნქციას. როგორც ვხედავთ, გვაქვს სრული ანალოგია ჩვეულებრივ ვექტორებთან. თუ $\mathbf{e}_i$ არის i-ური ღერძის ორტი, მაშინ $\mathbf{A}$ ვექტორის i-ური მდგენელის მისაღებად საჭიროა $\mathbf{A}$ სკალარულად გავამრავლოთ $\mathbf{e}_i$-ზე, ე. ი. $A_i = (\mathbf{A}, \mathbf{e}_i)$. დირაკის ვექტორის საშუალებით ანალოგიურად შეგვიძლია განვსაზღვროთ საკუთარი ფუნქცია სხვა ცვლადებში. ვთქვათ, მაგალითად, ჩვენ გვსურს დირაკის $\mid \psi \rangle$ ვექტორიდან მივიღოთ საკუთარი $\psi(\mathbf{p})$ ფუნქცია იმპულსურ წარმოდგენაში. ამ მიზნით უნდა შემოვიღოთ იმპულსური წარმოდგენის ბაზისის $\langle \mathbf{p} \mid$ ვექტორი, რომლის სკალარული ნამრავლი $\mid \psi \rangle$-სთან მოგვცემს იმპულსური წარმოდგენის საკუთარ $\psi(\mathbf{p})$ ფუნქციას. ცხადია ამასთან, რომ

$$\langle \mathbf{p} \mid \mathbf{p}' \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \tag{15,24}$$

ხოლო იმპულსური ბაზისის ერთეულოვან ოპერატორს ექნება სახე

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{p} \mid \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} \mid = 1. \tag{15,25}$$

ასევე ნათელია, რომ იმპულსურ წარმოდგენაში

$$\langle \mathbf{p}' \mid \hat{\mathbf{p}} \mid \mathbf{p} \rangle = \mathbf{p} \, \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \tag{15,26}$$

სრულიად ანალოგიურად ვიპოვით საკუთარ ფუნქციებს ნებისმიერ სხვა წარმოდგენაში.

დირაკის ფუნქციის ფურიე-ინტეგრალად წარმოდგენის ფორმულის თანახმად ნათელია, რომ (15,24) ასე შეგვიძლია დავწეროთ:

$$\langle \mathbf{p} \mid \mathbf{p}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}} \, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\mathbf{r}} \, d\mathbf{r}, \tag{15,27}$$

საიდანაც, რამდენადაც ადგილი აქვს იგივეობას

$$\langle \mathbf{p} \mid \mathbf{p}' \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \mathbf{p} \mid \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} \mid \mathbf{p}' \rangle d\mathbf{r}, \tag{15,28}$$

გვექნება

$$\langle \mathbf{r} \mid \mathbf{p} \rangle = \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}}, \tag{15,29}$$

რომელიც წარმოადგენს ბრტყელ ტალღას. მაშასადამე, კოორდინატული და იმპულსური წარმოდგენების ბაზისური ვექტორების სკალარული ნამრავლი ბრტყელ

ტალღას გამოხატავს. ნათელია, რომ $\langle \mathbf{r} \mid \mathbf{p} \rangle$ სკალარულ ნამრავლში $\mathbf{r}$ და $\mathbf{p}$ სიდიდეები სრულიად სიმეტრიულად შედიან. $\mathbf{r}$-ს განვიხილავთ ცვლადად, $\mathbf{p}$-ს კი საკუთარ მნიშვნელობად, თუ პირიქით ტალღური ფუნქცია მხოლოდ კომპლექსურად შეუღლებულით იცვლება $\langle \mathbf{p} \mid \mathbf{r} \rangle = \langle \mathbf{r} \mid \mathbf{p} \rangle^*$.

ადვილად ჩაიწერება შრედინგერის განტოლება დირაკის აბსტრაქტულ ვექტორულ სივრცეში. მაგალითად, სტაციონარულ შემთხვევაში გვექნება

$$\hat{H} \mid \psi \rangle = E \mid \psi \rangle. \tag{15,30}$$

შრედინგერის განტოლების ასე ჩაწერა მეტად მოსახერხებელია სხვადასხვა წარმოდგენაზე გადასვლის დროს. კოორდინატულ წარმოდგენაში (15,30)-დან ჩვენ მივიღებთ შრედინგერის განტოლების ცნობილ სახეს. მართლაც, (15,30) გავამრავლოთ კოორდინატული წარმოდგენის ბაზისის $\langle \mathbf{r} \mid$ ვექტორზე და თანაც გამოვიყენოთ (15,21) ოპერატორი; გვექნება:

$$\int \langle \mathbf{r} \mid \hat{H} \mid \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' \mid \psi \rangle \, d\mathbf{r}' = E \langle \mathbf{r} \mid \psi \rangle. \tag{15,31}$$

კოორდინატულ წარმოდგენაში (15,18) ფორმულის თანახმად

$$\langle \mathbf{r} \mid \hat{H} \mid \mathbf{r}' \rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \tag{15,32}$$

ამიტომ მივიღებთ

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \tag{15,33}$$

რომელიც შრედინგერის ჩვენთვის ცნობილი სტაციონარული მდგომარეობების განტოლებას ემთხვევა.

ასევე მარტივია დირაკის აბსტრაქტულ სივრცეში არასტაციონარული მდგომარეობების შრედინგერის განტოლების ჩაწერა. სახელდობრ, გვექნება

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mid \psi(t) \rangle = \hat{H} \mid \psi(t) \rangle. \tag{15,34}$$

$\mid \psi(t) \rangle$ შრედინგერის დროზე დამოკიდებული კეტ-ვექტორია. ცხადია, რომ $\langle \mathbf{r} \mid \psi(t) \rangle = \psi(\mathbf{r}, t)$ არასტაციონარული მდგომარეობის ტალღურ ფუნქციას წარმოადგენს.

§ 16. პუასონის ფრჩხილები

პუასონის კლასიკური ფრჩხილები. გავიხსენოთ ჯერ პუასონის კლასიკური ფრჩხილების განმარტება. ვთქვათ, მოცემული გვაქვს განზოგადოებული კოორდინატებისა და იმპულსების რაიმე ფუნქცია $F = F(q_1, q_2 \cdots q_n; p_1, p_2 \cdots p_n; t)$. დავწეროთ მისი სრული წარმოებული დროით

$$\frac{dF}{dt} = \frac{dF}{dt} + \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial F}{\partial q_k} \frac{dq_k}{dt} + \frac{dF}{\partial p_k} \frac{dp_k}{dt} \right). \tag{16,1}$$

თუ შევიტანთ $\dot{q}_k$ და $\dot{p}_k$ მნიშვნელობებს ჰამილტონის განტოლებებიდან

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial p_k}, \tag{16,2}$$

მივიღებთ

$$\frac{dF}{dt}=\frac{\partial F}{\partial t}+[H,\ F], \tag{16,2'}$$

სადაც

$$[H,\ F]=\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial F}{\partial q_k}-\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial F}{\partial p_k}\right) \tag{16,2''}$$

წარმოადგენს პუასონის კლასიკურ ფრჩხილებს (შემდგომში ვექტორულ ნამრავლს განსხვავების მიზნით $[\mathbf{A}\times\mathbf{B}]$ აღვნიშნავთ). (16,2'') ფრჩხილები შეიძლება განვაზოგადოთ და ორი ფუნქციის კლასიკური პუასონის ფრჩხილები ასე განვმარტოთ:

$$[f,\ g]=\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial p_k}\frac{\partial g}{\partial q_k}-\frac{\partial f}{\partial q_k}\frac{\partial g}{\partial p_k}\right); \tag{16,3}$$

ასეთნაირად განმარტებულ პუასონის ფრჩხილებს აქვს შემდგი ძირითადი თვისებები:

$$[f,\ g]=-[g,\ f], \tag{16,4}$$

$$[f,\ c]=0, \quad c=\mathrm{const}, \tag{16,5}$$

$$[f_1\pm f_2,\ g]=[f_1, g]\pm[f_2,\ g], \tag{16,6}$$

$$[f,\ cg]=[cf,\ g]=c\,[f,\ g], \tag{16,7}$$

$$[f_1 f_2,\ g]=f_1\,[f_2,\ g]+f_2\,[f_1,\ g], \tag{16,8}$$

$$[f,\ g_1 g_2]=g_1\,[f,\ g_2]+g_2\,[f,\ g_1], \tag{16,9}$$

$$[p_k,\ q_i]=\delta_{ki}, \tag{16,10}$$

$$[q_k,\ q_i]=[p_k,\ p_i]=0, \tag{16,11}$$

$$[p_i,\ f]=\frac{\partial f}{\partial q_i}$$

პუასონის კვანტური ფრჩხილები. ახლა ვნახოთ, რა სახე აქვს პუასონის კვანტურ ფრჩხილებს. პუასონის კვანტური ფრჩხილების გამოხატულება პირველად ნაპოვნი იყო დირაკის მიერ. მან დაუშვა, რომ პუასონის კვანტურ ფრჩხილებს ისეთივე მნიშვნელობა აქვს, რაც კლასიკურს, ოღონდ პუასონის კვანტური ფრჩხილები აიღება ოპერატორებიდან და ისინი მოქმედებენ ψ ფუნქციაზე, რის გამოც საჭიროა დავიცვათ ოპერატორთა თანმიმდევრობის წესი. ამგვარად პუასონის კვანტურ ფრჩხილებს ექნებათ შემდეგი თვისებები:

$$[\hat{A},\ \hat{B}]=-[\hat{B},\ \hat{A}], \tag{16,12}$$

$$[\hat{A},\ c]=0,\ c=\mathrm{const}, \tag{16,13}$$

$$[\hat{A}_1\pm\hat{A}_2,\ \hat{B}]=[\hat{A}_1,\ \hat{B}]\pm[\hat{A}_2,\ \hat{B}], \tag{16,14}$$

$$[\hat{A},\ c\hat{B}]=[c\hat{A},\ \hat{B}]=c\,[\hat{A},\ \hat{B}]. \tag{16,15}$$

$$[\hat{A}_1\hat{A}_2,\ \hat{B}]=\hat{A}_1\,[\hat{A}_2,\ \hat{B}]+[\hat{A}_1,\ \hat{B}]\,\hat{A}_2, \tag{16,16}$$

$$[\hat{A},\ \hat{B}_1\hat{B}_2]=\hat{B}_1\,[\hat{A},\ \hat{B}_2]+[\hat{A},\ \hat{B}_1]\,\hat{B}_2, \tag{16,17}$$

$$[\hat{p}_k, \ \hat{q}_i] = \delta_{ik}, \tag{16,18}$$

$$[\hat{q}_k, \ \hat{q}_i] = [\hat{p}_k, \ \hat{p}_i] = 0, \quad [\hat{p}_i, \ f] = \frac{\partial f}{\partial q_i} \tag{16,19}$$

გამოვიყენოთ (16,8′) და (16,9′) თვისებები პუასონის კვანტური ფრჩხილების გამოსახულების დასადგენად. პირველ ტოლობაში ავიღოთ $\hat{B} = \hat{B}_1\hat{B}_2$, მეორეში კი $\hat{A} = \hat{A}_1\hat{A}_2$ და მარჯვენა მხარეში თითოეული პუასონის ფრჩხილებისათვის გამოვიყენოთ იგივე თვისებები. გვექნება

$$[\hat{A}_1\hat{A}_2, \ \hat{B}_1\hat{B}_2] = \hat{A}_1[\hat{A}_2, \ \hat{B}_1\hat{B}_2] + [\hat{A}_1, \ \hat{B}_1\hat{B}_2]\hat{A}_2 =$$

$$= \hat{A}_1\hat{B}_1[\hat{A}_2, \hat{B}_2] + \hat{A}_1[\hat{A}_2, \ \hat{B}_1]\hat{B}_2 + \hat{B}_1[\hat{A}_1, \ \hat{B}_2]\hat{A}_2 + [\hat{A}_1, \hat{B}_1]\hat{B}_2\hat{A}_2,$$

ანალოგიურად მეორე განტოლება მოგვცემს

$$[\hat{A}_1\hat{A}_2, \ \hat{B}_1\hat{B}_2] = \hat{B}_1\hat{A}_1[\hat{A}_2, \ \hat{B}_2] + \hat{B}_1[\hat{A}_1, \ \hat{B}_2]A_2 +$$

$$+ \hat{A}_1[\hat{A}_2, \ \hat{B}_1]\hat{B}_2 + [\hat{A}_1, \ \hat{B}_1]\hat{A}_2\hat{B}_2.$$

ამ ორი უკანასკნელი ტოლობის შედარება გვაძლევს

$$\hat{A}_1\hat{B}_1[\hat{A}_2, \ \hat{B}_2] + [\hat{A}_1, \ \hat{B}_1]\hat{B}_2\hat{A}_2 = \hat{B}_1\hat{A}_1[\hat{A}_2, \ \hat{B}_2] + [\hat{A}_1, \ \hat{B}_1]\hat{A}_2\hat{B}_2,$$

საიდანაც, დაჯგუფებით, მივიღებთ:

$$(\hat{A}_1\hat{B}_1 - \hat{B}_1\hat{A}_1)[\hat{A}_2, \ \hat{B}_2] = [\hat{A}_1, \ \hat{B}_1](\hat{A}_2\hat{B}_2 - \hat{B}_2\hat{A}_2).$$

ეს ტოლობა რომ იგივურად სამართლიანი იყოს ნებისმიერი ოპერატორისათვის, საჭიროა პუასონის კვანტურ ფრჩხილებს შემდეგი სახე ჰქონდეს:

$$[\hat{A}, \ \hat{B}] = c(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}), \tag{16,20}$$

სადაც c არის ყველა ოპერატორთან კომუტატური ოპერატორი, ე. ი. მუდმივი. რადგან შემდგომში პუასონის კვანტურ ფრჩხილებს ფიზიკური სიდიდეების შესაბამისი ოპერატორებიდან, ე. ი. ერმიტული ოპერატორებიდან ავიღებთ, ამიტომ უნდა მოვითხოვოთ, რომ პუასონის ფრჩხილებიც ერმიტული ოპერატორი იყოს:

$$[\hat{A}, \hat{B}]^+ = [\hat{A}, \ \hat{B}]. \tag{16,21}$$

ადვილად ვაჩვენებთ, რომ თუ ეს პირობა შესრულებულია, როცა $A^+ = A$, $B^+ = B$, მაშინ c არის წმინდა წარმოსახვითი სიდიდე. მართლაც, რადგან $c^+ = c^*$, ამიტომ გვექნება

$$[\hat{A}, \ \hat{B}]^+ = c^+(B^+A^+ - A^+B^+) = -c^*(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}). \tag{16,22}$$

მეორეს მხრით, რადგან ადგილი აქვს (16,20) და (16,21) ტოლობებს, ამიტომ $c^* = -c$, ე. ი. მართლაც c წმინდა წარმოსახვითი რიცხვია. რათა შემდგომში პუასონის კვანტური ფრჩხილებიდან განსაზღვრული ფიზიკური სიდიდეები სწორი განზომილებისა გამოვიდნენ და ცდის მონაცემებს ემთხვეოდნენ, საჭიროა ავიღოთ

$$c = \frac{i}{\hbar}, \tag{16,23}$$

სადაც ℏ პლანკის მუდმივია. ამგვარად, პუასონის კვანტურ ფრჩხილებს ექნება სახე

$$[\hat{A},\ \hat{B}] = \frac{i}{\hbar}\,(\hat{A}\,\hat{B} - \hat{B}\,\hat{A}). \qquad (16,24)$$

ადვილად შეიძლება შემოწმდეს, რომ ასეთნაირად განმარტებულ კვანტურ ფრჩხილებს აქვს ყველა ის თვისება, რომელიც ზემოთ მოცემულია (16,12)—(16,19) ფორმულებით.

როცა პუასონის ფრჩხილები ნულის ტოლია,

$$[\hat{A},\ \hat{B}] = \frac{i}{\hbar}\,(\hat{A}\,\hat{B} - \hat{B}\,\hat{A}) = 0, \qquad (16,25)$$

მაშინ $\hat{A}\,\hat{B} = \hat{B}\,\hat{A}$, ე. ი. ოპერატორები კომუტატური არიან.

$$[A, B] = \hat{A}\,\hat{B} - \hat{B}\,\hat{A} = \frac{\hbar}{i}\,[\,\hat{A},\ \hat{B}] \qquad (16,26)$$

სიდიდეს კომუტატურს უწოდებენ.

განვიხილოთ ასეთი ფრჩხილები $\left[\frac{\partial}{\partial x},\ f(x)\right]$. განმარტების თანახმად, გვექნება:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x},\ f(x)\right]\psi(x) = \frac{i}{\hbar}\left\{\frac{\partial}{\partial x}(f\psi) - f\,\frac{\partial\psi}{\partial x}\right\}, \qquad (16,27)$$

საიდანაც, გაწარმოების ოპერაციის ჩატარების შემდეგ, მივიღებთ

$$\left[\frac{\partial}{\partial x},\ f(x)\right] = \frac{i}{\hbar}\,\frac{\partial f}{\partial x} \quad \text{ან} \quad \left[\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial x},\quad f(x)\right] = \frac{\partial f}{\partial x}. \qquad (16,28)$$

კერძო შემთხვევაში, როცა $f(x) = x$, გვექნება, რომ

$$\left[\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial x},\ x\right] = 1, \qquad (16,29)$$

ე. ი. ასეთი პუასონის ფრჩხილები ერთზე გამრავლების ოპერატორის ტოლფასია. რადგან პუასონის კვანტური ფრჩხილები ოპერატორებიდან აიგება, ბუნებრივია (16,2′) მოძრაობის განტოლება ოპერატორებისათვის შემდეგნაირად განზოგადდეს:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} + [\hat{H},\ \hat{A}], \qquad (16,30)$$

სადაც $\hat{H}$ წარმოადგენს ჰამილტონის ოპერატორს. ამ გამოსახულებას უწოდებენ ოპერატორის დროითი წარმოებულის ფორმულას ან მოძრაობის კვანტურ განტოლებას. ამ ფორმულით განსაზღვრულ დროით წარმოებულს გაწარმოების ყველა თვისება გააჩნია, ოღონდ, რადგან საქმე გვაქვს ოპერატორებთან, ყოველთვის უნდა დავიცვათ ოპერატორთა რიგი. ვიპოვოთ, მაგალითად, $\frac{d}{dt}\,(\hat{L}\hat{M})$ წ.რმოებული. (16,30) ფორმულის თანახმად გვექნება

$$\frac{d}{dt}\,(\hat{L}\hat{M}) = \frac{\partial\hat{L}}{\partial t}\,\hat{M} + \hat{L}\,\frac{\partial\hat{M}}{\partial t} + \hat{L}\,[\,\hat{H},\ \hat{M}] + [\hat{H},\ \hat{L}]\,\hat{M}, \qquad (16,31)$$

ან დაჯგუფებით მივიღებთ

$$\frac{d}{dt}(\hat{L}\hat{M})=\left\{\frac{\partial \hat{L}}{\partial t}+[\hat{H},\ \hat{L}]\right\}\hat{M}+\hat{L}\left\{\frac{\partial \hat{M}}{\partial t}+[\hat{H},\hat{M}]\right\}, \qquad (16,32)$$

საიდანაც საბოლოოდ შეგვიძლია დავწეროთ

$$\frac{d}{dt}(\hat{L}\hat{M})=\frac{d\hat{L}}{dt}\hat{M}+\hat{L}\frac{d\hat{M}}{dt}. \qquad (16,33)$$

ასევე ნათელია, რომ ოპერატორთა ჯამის წარმოებული უდრის წარმოებულთა ჯამს და ა. შ.

სავარჯიშო მაგალითები

1 ვიმოქმედოთ $\hat{L}=\left(\frac{\partial}{\partial x}+x\right)^2$ ოპერატორით რაიმე Ψ ფუნქციაზე.

2. ვიმოქმედოთ $\hat{M}=\left(\frac{\partial}{\partial x}+A\right)^2$ ოპერატორით რაიმე ψ ფუნქციაზე. $A=\mathrm{const}$.

3. ვიმოქმედოთ $\hat{N}=\left(\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}\right)^2$ ოპერატორით რაიმე ψ ფუნქციაზე. გამოვარკვიოთ რატომაა, რომ მეორე და მესამე მაგალითის შემთხვევაში შეგვიძლია ოპერატორის როგორც ორი წევრის ჯამის კვადრატის წარმოდგენა, პირველ შემთხვევაში კი არა.

4. თუ $\hat{A}$ და $\hat{B}$ ოპერატორებია, იქნება თუ არა ერთმანეთის ტოლი ორი ოპერატორი $\exp(\hat{A}+\hat{B})$ და $\exp(\hat{B}+\hat{A})$?

5. თუ მოცემულია, რომ $\hat{L}\psi=\lambda\psi$, მაშინ ვაჩვენოთ, რომ $\hat{L}^n\psi=\lambda^n\psi$ (n-მთელი რიცხვია $n=1, 2, 3,\ldots$).

6. თუ მოცემულია $\hat{L}\psi=\lambda\psi$, ვაჩვენოთ, რომ $\hat{L}^{-1}\psi=\lambda^{-1}\psi$.

7. რის ტოლი იქნება $\hat{B}=\exp(\hat{A})$ ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობა, თუ $\hat{A}$ ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობა ტოლია a-სი?

8. ვაჩვენოთ, რომ თუ ნებისმიერ $\hat{A}$ ოპერატორს აქვს შებრუნებული, მაშინ იგი ერთადერთია.

9. ვაჩვენოთ, რომ პუასონის ფრჩხილი

$$\left[x, (\cos^2\alpha)x\frac{d}{dx}+\sin^2\alpha\frac{d}{dx}x\right],$$

სადაც $\alpha=\mathrm{const}$, დამოკიდებული არ არის α-ზე.

10. იგივე ვაჩვენოთ პუასონის შემდეგი ფრჩხილისათვის

$$\left[\frac{d}{dx},\ (\cos^2\alpha)\,x\frac{d}{dx}+(\sin^2\alpha)\frac{d}{dx}x\right].$$

11. ვიპოვოთ პუასონის $\left[x\frac{d}{dx}+ax^2, \sin ax\frac{d}{dx}x+bx\right]$ ფრჩხილის გამოსახულება (a და b მუდმივებია).

12. ვაჩვენოთ, რომ $\hat{L}=x\frac{\partial}{\partial x}$ და $\hat{M}=\frac{\partial}{\partial x}x$ ოპერატორები ერთმანეთთან კომუტატურია.

13. დავამტკიცოთ, რომ პუასონის ფრჩხილები $-i\hbar[(\mathbf{a}\nabla), \mathbf{r}]=\mathbf{a}$, სადაც $\mathbf{a}$ მუდმივი ვექტორია.

14. დავამტკიცოთ, რომ ადგილი აქვს ფორმულას

$$e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}}=\hat{B}+\lambda\frac{\hbar}{i}[\hat{A},\hat{B}]+\frac{\lambda^2}{2!}\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]+\cdots+.$$

თუ $\hat{M} \equiv e^{-\lambda\hat{A}}\,\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}}$, მაშინ

$$\hat{M} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!}\left(\frac{d^n\hat{M}}{d\lambda^n}\right)_{\lambda=0}.$$

ვიპოვოთ წარმოებულები. ცხადია, რომ

$$\frac{d\hat{M}}{d\lambda} = e^{\lambda\hat{A}}\,\hat{A}\,\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}} - e^{\lambda\hat{A}}\,\hat{B}\,\hat{A}e^{-\lambda\hat{A}} = e^{\lambda\hat{A}}\,(\hat{A}\,\hat{B} - \hat{B}\,\hat{A})e^{-\lambda\hat{A}}.$$

ან, თუ გავიხსენებთ პუასონის ფრჩხილების განმარტებას, მივიღებთ

$$\frac{d\hat{M}}{dt} = \frac{\hbar}{i}\,e^{\lambda\hat{A}}\,[\hat{A},\ \hat{B}]\,e^{-\lambda\hat{A}}.$$

სრულიად ანალოგიურად ამ გამოსახულების გაწარმოებით გვექნება

$$\frac{d^2\hat{M}}{dt^2} = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 e^{\lambda\hat{A}}\,[\hat{A}\,[\hat{A},\ \hat{B}]]\,e^{-\lambda\hat{A}}$$

და ა. შ. წარმოებულების შეტანით $\hat{M}$-ის მწკრივად გაშლაში მივიღებთ დასამტკიცებელ ტოლობას.