თავი IV

ფიზიკურ სიდიდეთა ოპერატორებით წარმოდგენა

მეოთხე თავში განხილულია კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზა, რომლის მიხედვით ყველა ფიზიკურ სიდიდეს კვანტურ მექანიკაში შეესაბამება წრფივი ერმიტული ოპერატორი. ნაპოვნია ფიზიკური სიდიდეების შესაბამისი ოპერატორების კონკრეტული გამოხატულებანი.

§ 28. კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზა

როგორც უკვე ვიცით, კვანტური მექანიკის მოძრაობის განტოლებას წარმოადგენს შრედინგერის განტოლება, რომელიც სტაციონარული მდგომარეობისათვის იწერება შემდეგი სახით:

$$\Delta\psi(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = 0. \qquad (28,1)$$

ეს განტოლება შეგვიძლია გადავწეროთ ოპერატორული განტოლების ფორმითაც; სახელდობრ, გვექნება

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \qquad (28,2)$$

სადაც $\hat{H}$ ოპერატორი განისაზღვრება ფორმულით

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}), \qquad (28,3)$$

რომელსაც ჩვენ სრული ენერგიის ოპერატორი ან სტაციონარული მდგომარეობის ჰამილტონიანი ვუწოდეთ. ეს ოპერატორი არის წრფივი და ერმიტული. ერმიტული ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობები ნამდვილია, ამიტომ (28,2) განტოლებაში E იქნება ნამდვილი სიდიდე. ცხადია, ეს ასეც უნდა იყოს, რამდენადაც შრედინგერის განტოლებაში E არის სრული ენერგია, რომელიც ცდაზე იზომება და ამიტომ იგი შეუძლებელია ნამდვილი არ იყოს.

ჩვენ ვხედავთ, რომ შრედინგერის განტოლების ამოხსნა და ენერგიის მნიშვნელობებისა და ტალღური ფუნქციის მოძებნის ამოცანა ეკვივალენტურია ენერგიის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების მოძებნისა.

აღვნიშნოთ, რომ ფიზიკას საქმე აქვს არა მხოლოდ ენერგიასთან, არამედ მთელ რიგ მნიშვნელოვან სიდიდეებთან, იმპულსთან, იმპულსის მომენტთან და ასე შემდეგ. ამიტომ ბუნებრივია ვიფიქროთ, რომ სხვა ფიზიკური სიდიდეების მნიშვნელობებიც, რომლებიც ცდაზე იზომებიან, აგრეთვე უნდა წარმოადგენდეს (28,2) განტოლების ანალოგიური ოპერატორული განტოლების საკუთარ მნიშვნე-

ლობებს. მაგრამ ოპერატორს საზოგადოდ ექნება არა (28,3) სახე, არამედ სხვა, შესაბამისად განხილული ფიზიკური სიდიდისა.

ამგვარად, ჩვენ შეგვიძლია დავუშვათ, რომ ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობანი ეს ის მნიშვნელობებია, რომლებსაც ამ ოპერატორის შესაბამისი ფიზიკური სიდიდე იღებს გაზომვის პროცესში.

რადგან ფიზიკური სიდიდის ცდით გაზომილი მნიშვნელობები აუცილებლად ნამდვილი რიცხვებია, ამიტომ ზემოთ დამტკიცებული თეორემის ძალით ამ ფიზიკური სიდიდის შესაბამისი ოპერატორი ერმიტული უნდა იყოს.

იმის გამო, რომ კვანტურ მექანიკაში სამართლიანია სუპერპოზიციის პრინციპი, ფიზიკური სიდიდის შესაბამისი ოპერატორი წრფივიც უნდა იყოს.

ამგვარად, ყოველ ფიზიკურ სიდიდეს უნდა შევუსაბამოთ წრფივი ერმიტული ოპერატორი. ბუნებრივად იბადება კითხვა, როგორ ვიპოვოთ მოცემული ფიზიკური სიდიდის შესაბამისი ოპერატორი. ამ საკითხის გარკვევაში დაგვეხმარება კლასიკური მექანიკა. რადგან კვანტური მექანიკა აიგება კლასიკური მექანიკის ანალოგიით, ამიტომ კვანტურ მექანიკაში დინამიური ცვლადები ისეთივე რჩება, რაც კლასიკურ მექანიკაში. ამ ცვლადების თავისებურება ის არის, რომ ისინი ახალ მათემატიკურ ბუნებას ავლენენ—გამოიხატებიან ოპერატორებით.

ზემოთ თქმული წარმოადგენს იმ ჰიპოთეზის შინაარსს, რომელიც ერთ-ერთი მნიშვნელოვანია კვანტური მექანიკის სხვა ჰიპოთეზებს შორის; ჩვენ მას კვანტური მექანიკის ძირითად ჰიპოთეზას ვუწოდებთ. კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზა ასე შეგვიძლია ჩამოვაყალიბოთ:

ფიზიკური სიდიდეები აიწერება წრფივი ერმიტული ოპერატორებით. ამ ოპერატორების საკუთარი მნიშვნელობები იძლევა ცდაზე გაზომილი ფიზიკური სიდიდის მნიშვნელობებს, ხოლო ოპერატორთა შორის ისეთივე დამოკიდებულებანი არსებობს, როგორც ამ ოპერატორების შესაბამის ფიზიკურ სიდიდეებს შორის კლასიკურ მექანიკაში.

ასე, მაგალითად, რადგან კლასიკურ მექანიკაში სრული ენერგია წარმოადგენს კინეტიკური და პოტენციალური ენერგიების ჯამს, ამიტომ კვანტურ მექანიკაში ენერგიის ოპერატორი უნდა წარმოადგენდეს კინეტიკური და პოტენციალური ენერგიების ოპერატორთა ჯამს. რადგან კლასიკურ მექანიკაში კინეტიკური ენერგია იმპულსთან დაკავშირებულია შემდეგი ფორმულით:

$$T=\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu}=\frac{1}{2\mu}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right), \tag{28,4}$$

ამიტომ კვანტურ მექანიკაში კინეტიკური ენერგიის ოპერატორი იქნება

$$\hat{T}=\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu}, \tag{28,5}$$

ამასთან, შემდგომში, რადგან m-ით მაგნიტური კვანტური რიცხვი გვექნება აღნიშნული, მასას μ-ით აღვნიშნავთ.

კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზის თანახმად მოძრაობის კვანტურ განტოლებას მივიღებთ, თუ კლასიკური მოძრაობის განტოლებაში

$$\frac{dA}{dt}=\frac{\partial A}{\partial t}+[H,\ A] \tag{28,6}$$

გადავალთ ოპერატორებზე, ე. ი. დავწერთ

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{A}], \tag{28,7}$$

სადაც $\hat{H}$ ჰამილტონის ოპერატორია. (28,7) გამოსახულება ჩვენ უკვე განვიხილეთ როგორც ოპერატორის დროითი წარმოებულის ფორმულა.

სრულიად ანალოგიურად დავწერთ კვანტური მექანიკის სხვა ფიზიკური სიდიდეების ოპერატორებსაც.

ამის შემდეგ მთავარია კონკრეტულად მოვძებნოთ ფიზიკური სიდიდეების შესაბამისი ოპერატორების გამოხატულებანი.

ფიზიკური სიდიდეების შესაბამისი ოპერატორების კონკრეტული სახის დასადგენად, როგორც ოპერატორთა და მატრიცათა თვისებების განხილვის დროს დავინახეთ, საჭიროა წარმოდგენის შერჩევა.

ჰამილტონის ოპერატორში შედის ორი წევრი, რომელთაგან პირველი შეიცავს ლაპლასიანს, მეორე კი წარმოადგენს პოტენციალურ ენერგიას. ლაპლასიანი შეიცავს კოორდინატების მიხედვით წარმოებულებს, პოტენციალური ენერგია კი ოპერატორი არ არის, ან, როგორც ამბობენ, „გამრავლების ოპერატორია“ $V\psi = \psi V$. ასეთი თვისება კი აქვს დამოუკიდებელ ცვლადს და ამ ცვლადის ფუნქციას. ამიტომ ჩვენ შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ $\hat{H}$ ოპერატორი დაწერილია კოორდინატულ წარმოდგენაში. მართლაც, იგი შეიცავს კოორდინატების ფუნქციას, კოორდინატების მიხედვით წარმოებულებს და მოქმედებს ψ-ზე, რომელიც აგრეთვე სივრცულ კოორდინატებზეა დამოკიდებული. მაშასადამე, როდესაც შრედინგერის განტოლება დავწერეთ ჩვენ „შემთხვევით“ ავვირჩევია „კოორდინატული წარმოდგენა“. ამ წარმოდგენაში დამოუკიდებელი ცვლადები, რომლებზედაც ψ ფუნქციაა დამოკიდებული, არის სივრცული კოორდინატები; კოორდინატები და მათი ფუნქციები გამრავლების ოპერატორებია, ხოლო ყველა სხვა ოპერატორი გამოხატული იქნება კოორდინატებზე ჩასატარებელი ოპერაციებით.

მატრიცათა ენაზე ყოველი ფიზიკური სიდიდის შესაბამისი მატრიცა, თავის საკუთარ წარმოდგენაში დიაგონალურია მაშინ, როცა სხვა სიდიდეების შესაბამისი მატრიცები დიაგონალური არ არიან.

რადგან კოორდინატულ წარმოდგენაში $\mathbf{r}$ გამრავლების ოპერატორია, ამიტომ კოორდინატების საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება ასე დაიწერება:

$$\mathbf{r}\psi(\mathbf{r}) = \mathbf{r}_0\psi(\mathbf{r}). \tag{28,8}$$

ამ განტოლების ამონახსნი იქნება დირაკის დელტა ფუნქცია

$$\psi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = A\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \tag{28,9}$$

სადაც A ნორმირების მუდმივაა. იგი შეგვიძლია განვსაზღვროთ უწყვეტი სპექტრის ნორმირების პირობიდან

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0')\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{r}_0' - \mathbf{r}_0), \tag{28,10}$$

რომელშიც (28,9) ფუნქციის შეტანით მივიღებთ $A = 1$. მაშასადამე,

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \tag{28,11}$$

მიღებული ტალღური ფუნქცია ყველგან ნულია, გარდა $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$ წერტილისა, სადაც იგი უსასრულობა ხდება.

ქვემოთ ჩვენ განვიხილავთ ფიზიკური სიდიდეების შესაბამის ოპერატორებს კოორდინატულ წარმოდგენაში. შემდეგ თავში ვაჩვენებთ, რომ სხვადასხვა წარმოდგენის ტალღურ ფუნქციებს და ოპერატორებს შორის არსებობს გარკვეული კავშირი.

§ 29. იმპულსის ოპერატორი

ვიპოვოთ იმპულსის ოპერატორი კოორდინატულ წარმოდგენაში. ეს ოპერატორი სხვადასხვა გზით შეგვიძლია მოვძებნოთ. კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზის თანახმად კვანტური მექანიკის ჰამილტონის ოპერატორი მიიღება კლასიკურ ჰამილტონიანში

$$H=\frac{1}{2\mu}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)+V(\mathbf{r},\ t) \tag{29,1}$$

ოპერატორებზე გადასვლით; შედეგად მივიღებთ (28,3) ოპერატორს, საიდანაც ჩანს, რომ იმპულსის ოპერატორს ექნება სახე

$$\hat{\mathbf{p}}=-i\hbar\nabla \tag{29,2}$$

ან მდგენელებში:

$$\hat{p}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\quad \hat{p}_y=-i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\quad \hat{p}_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}. \tag{29,3}$$

ჩვენ შეგვეძლო აგვერჩია საწინააღმდეგო ნიშანიც, მაგრამ შევთანხმდეთ და იმპულსის ოპერატორი სწორედ (29,3) ფორმულებით განსაზღვრული სახით ავირჩიოთ. რადგან კვანტურ მექანიკაში ოპერატორები განსაზღვრულია უნიტარული გარდაქმნის სიზუსტით, ამიტომ ასეთი შერჩევა ფიზიკურ შედეგებზე არ იმოქმედებს.

იმპულსის ოპერატორის გამოსახულება შეგვიძლია ვიპოვოთ პუასონის კვანტური ფრჩხილების დახმარებითაც. კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზის თანახმად პუასონის ფუნდამენტურ ფრჩხილებს კოორდინატულ წარმოდგენაში ექნება შემდეგი სახე:

$$[\hat{p}_i,\ x_k]=\delta_{ik}\quad (i,k=1,\ 2,\ 3), \tag{29,4}$$

ეს ფრჩხილები აიღება ოპერატორებიდან და მაშასადამე, ისინი თითონაც ოპერატორს წარმოადგენენ, რომელიც მოქმედებს ψ ფუნქციაზე. განვიხილოთ ერთგანზომილებიანი შემთხვევა; მაშინ $[\hat{p}_x,\ x]=1$ და პუასონის კვანტური ფრჩხილების (16,24) განმარტების ძალით გვექნება

$$\frac{i}{\hbar}\left(\hat{p}_x x-x\hat{p}_x\right)\psi=\psi \tag{29,5}$$

ამ ოპერატორულ განტოლებას კი აკმაყოფილებს $\hat{p}_x=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$. ასევე. ადვილად ვიპოვით დანარჩენი ორი მდგენელის ოპერატორებსაც.

ჩვენ ვხედავთ, რომ იმპულსის ოპერატორი ერმიტული ოპერატორია. კოორდინატულ წარმოდგენაში იგი დაკავშირებული აღმოჩნდა გრადიენტთან.

ვიპოვოთ ახლა იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები. ამისათვის საჭიროა დავწეროთ საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება

$$\hat{\mathbf{p}}\,\psi_{\mathbf{p}}(x, y, z) = p\psi_{\mathbf{p}}(x, y, z) \tag{29,6}$$

შევიტანოთ $\hat{\mathbf{p}}$-ს მნიშვნელობა და გავიხსენოთ, რომ $\nabla = \mathbf{i}\,\frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j}\,\frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k}\,\frac{\partial}{\partial z}$, სადაც $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$ ერთეულოვანი ვექტორებია x, y, და z-ღერძების გასწვრივ. (29,6) განტოლება მიიღებს სახეს:

$$\frac{\hbar}{i}\left(\mathbf{i}\,\frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j}\,\frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k}\frac{\partial}{\partial z}\right)\psi_{\mathbf{p}}(x, y, z) = (\mathbf{i}p_x + \mathbf{j}p_y + \mathbf{k}p_z)\psi_{\mathbf{p}}(x, y, z). \tag{29,7}$$

ამ განტოლების ამონახსნი ვეძებოთ შემდეგი სამი ფუნქციის ნამრავლის სახით:

$$\psi_{\mathbf{p}} = \psi_{p_x}(x)\,\psi_{p_y}(y)\,\psi_{p_z}(z), \tag{29,8}$$

თუ შევიტანთ (29,8)-ს (29,7)-ში, მივიღებთ განტოლებათა სისტემას:

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_{p_x}(x)}{dx} &= \frac{i}{\hbar}\,p_x\psi_{p_x}(x), \\ \frac{d\psi_{p_y}(y)}{dy} &= \frac{i}{\hbar}\,p_y\psi_{p_y}(y), \\ \frac{d\psi_{p_z}(z)}{dz} &= \frac{i}{\hbar}\,p_z\psi_{p_z}(z). \end{aligned} \tag{29,9}$$

ამ განტოლებების ამონახსნებს ექნება სახე:

$$\psi_{p_x}(x) = c_1 e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}, \quad \psi_{p_y}(y) = c_2 e^{\frac{i}{\hbar}p_y y}, \quad \psi_{p_z}(z) = c_3 e^{\frac{i}{\hbar}p_z z}. \tag{29,10}$$

ახლა საჭიროა განისაზღვროს საკუთარი მნიშვნელობები p_x, p_y, p_z. საკუთარი მნიშვნელობების განსაზღვრის საშუალებას მოგვცემს სასაზღვრო პირობები (სტანდარტული პირობები). (29,10) ფუნქციები უწყვეტია და აქვთ უწყვეტი წარმოებულები, ასევე ისინი ცალსახა ფუნქციებია. ეს ფუნქციები მხოლოდ და მხოლოდ მაშინ შეიძლება სასრული არ ყოფილიყო, p_x, p_y, p_z წარმოსახვითი რიცხვები რომ იყოს. მაგრამ $\hat{\mathbf{p}}$ ოპერატორი ერმიტულია, მაშასადამე, p_x, p_y, p_z ნამდვილი სიდიდეებია. (29,10) ფუნქციები ამიტომ სასრული იქნებიან ნებისმიერი p_x, p_y, p_z-სათვის $-\infty$ და $+\infty$ შუალედში, ე. ი. იმპულსის ოპერატორის სპექტრი ყოფილა უწყვეტი. (29,10) ფუნქციებში განსასაზღვრავი დაგვრჩა c_1, c_2, c_3 მუდმივები. რადგან იმპულსის ოპერატორის სპექტრი უწყვეტია, ამიტომ ნორმირება უნდა მოვახდინოთ დირაკის დელტა ფუნქციაზე. სახელდობრ, უნდა გვქონდეს

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*_{p'_x}(x)\psi_{p_x}(x)dx = \delta(p'_x - p_x).$$

თუ შევიტანთ ფუნქციების მნიშვნელობებს, მივიღებთ:

$$c_1^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p'_x - p_x)x}\,dx = \delta(p'_x - p_x).$$

გავიხსენოთ (11,11) ფორმულა, მაშინ გვექნება:

$$c_1^2 2\pi\delta\left(\frac{p_x'-p_x}{\hbar}\right)=\delta(p_x'-p_x).$$

მაგრამ $a>0$ დროს $\delta(ax)=\frac{1}{a}\delta(x)$, ამიტომ

$$2\pi\hbar c_1^2\delta(p_x'-p_x)=\delta(p_x'-p_x),$$

თუ ამ გამოსახულებიდან ავიღებთ ინტეგრალს, გვექნება

$$2\pi\hbar c_1^2=1. \tag{29,11}$$

ამგვარად, იმპულსის სკალაზე ნორმირებულ ფუნქციას ექნება სახე:

$$\psi_{p_x}(x)=(2\pi\hbar)^{-1/2}e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}. \tag{29,12}$$

სრულიად ანალოგიურად მივიღებთ იგივე მნიშვნელობას c_1 და c_2 კოეფიციენტებისათვის, ხოლო სრული საკუთარი ფუნქციისათვის (29,8) ფორმულის თანახმად გვექნება

$$\psi_{\mathbf{p}}(x,y,z)=(2\pi\hbar)^{-3/2}e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x+p_y y+p_z z)} \tag{29,13}$$

ანდა

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})=(2\pi\hbar)^{-3/2}e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr})}, \tag{29,14}$$

რომელიც წარმოადგენს ბრტყელ ტალღას. მაშასადამე, იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქცია ყოფილა ბრტყელი ტალღა.

სავარჯიშო მაგალითები

1. დავამტკიცოთ, რომ $[\hat{p}_l^n, x_l]=n\hat{p}_l^{n-1}$.

2. ვაჩვენოთ, რომ კომუტატორი $\hat{E}x-x\hat{E}$, სადაც $\hat{E}=\sqrt{a^2+\hat{p}_x^2}$, ტოლია შემდეგი გამოსახულებისა

$$\hat{E}x-x\hat{E}=-\frac{i\hat{p}_x\hbar}{\hat{E}}$$

მ ი თ ი თ ე ბ ა: $\hat{E}$ ოპერატორი უნდა გავიგოთ, როგორც $\sqrt{a^2+\hat{p}_x^2}$ ფესვის მწკრივად გაშლა.

3. დავამტკიცოთ, რომ $[\hat{p}_x, f(x)]=\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, f(x)\right]=\frac{\partial f}{\partial x}$.

§ 30. ნებისმიერი ფუნქციის გაშლა იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციების მიხედვით

რამდენადაც ჩვენ ვიპოვეთ იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები, შეგვიძლია გამოვიყენოთ (13,10) ფორმულა და ნებისმიერი $F(\mathbf{r})$ ფუნქცია გავშალოთ ამ საკუთარი ფუნქციების ფურიეინტეგრალად.
გვექნება

$$F(\mathbf{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}a(\mathbf{p})e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}}d\mathbf{p}, \tag{30,1}$$

სადაც ფურიეკომპონენტი $a(\mathbf{p})$ განისაზღვრება ფორმულით

$$a(\mathbf{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} F(\mathbf{r})e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}}d\mathbf{r}. \tag{30,2}$$

ამ ფორმულებში $d\mathbf{p}=dp_x dp_y dp_z$ იმპულსური სივრცის მოცულობის ელემენტია.

იმპულსის ოპერატორის საკუთარ ფუნქციებად გაშლის ფორმულები ადვილად შეიძლება გამოვიყვანოთ დირაკის აბსტრაქტული სივრცის მეთოდის გამოყენებით. ჩვენ ვიცით, რომ $F(\mathbf{r})=\langle\mathbf{r}|F\rangle$. მოვახდინოთ ერთეულოვანი

$$\int d\mathbf{p}\,|\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}|=1 \tag{30,3}$$

ოპერატორის ჩასმა; გვექნება

$$\langle\mathbf{r}|F\rangle=\int\langle\mathbf{r}\,|\,\mathbf{p}\rangle\langle\,\mathbf{p}|\,F\rangle d\mathbf{p}. \tag{30,4}$$

(15,29) ფორმულის თანახმად $\langle\mathbf{r}\,|\,\mathbf{p}\rangle$ ფუნქცია გამოხატავს (29,14) ბრტყელ ტალღას, ამიტომ (30,4)-დან მივიღებთ

$$F(\mathbf{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}}F(\mathbf{p})dp, \tag{30,5}$$

ოღონდ დირაკის მეთოდის გამოყენების დროს უნდა გვახსოვდეს, რომ ფუნქცია და მისი ფურიეკომპონენტი ერთი და იგივე ასოთია აღნიშნული და მათ შორის განსხვავებას მიუთითებს მხოლოდ არგუმენტი.

სრულიად ანალოგიურად (30,2) ფორმულას მივიღებთ შემდეგი ტოლობიდან

$$\langle\mathbf{p}|F\rangle=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\langle\mathbf{p}\,|\,\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}\,|\,F\rangle d\mathbf{r}. \tag{30,6}$$

მართლაც, რამდენადაც $\langle\mathbf{p}|\mathbf{r}\rangle=\langle\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle^*=\psi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$, მივიღებთ დასამტკიცებელ ტოლობას.

§ 31. იმპულსის მომენტის ოპერატორი

ახლა ვიპოვოთ იმპულსის მომენტის შესაბამისი ოპერატორი კოორდინატულ წარმოდგენაში. რამდენადაც იმპულსის ოპერატორი ნაპოვნი გვაქვს, მომენტის ოპერატორის სახის დადგენა სიძნელეს აღარ წარმოადგენს.

ნაწილაკის იმპულსის მომენტის ოპერატორის მოსაძებნად გავიხსენოთ, რომ კლასიკურ მექანიკაში ნაწილაკის იმპულსის მომენტი რაიმე ცენტრის მიმართ განისაზღვრება შემდეგი ფორმულით:

$$\mathbf{l}=[\mathbf{r}\times\mathbf{p}], \tag{31,1}$$

ან, მდგენელებში,

$$\begin{aligned} l_x&=yp_z-zp_y,\\ l_y&=zp_x-xp_z,\\ l_z&=xp_y-yp_x, \end{aligned} \tag{31,2}$$

სადაც $\mathbf{r}$ ნაწილაკის რადიუსვექტორია, $\mathbf{p}$ კი—მისი იმპულსი. კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზის თანახმად, იმპულსის მომენტი იგივე ფორმულებით განი-

საზღვრება, ოღონდ ჩვეულებრივი სიდიდეების ნაცვლად უნდა ვიგულისხმოთ სათანადო ოპერატორები; თუ გავიხსენებთ იმპულსის ოპერატორის გამოსახულებას, მივიღებთ, რომ იმპულსის მომენტის მდგენელების ოპერატორებს „x-წარმოდგენაში“ აქვთ შემდეგი სახე:

$$
\begin{aligned}
\hat{l}_x &= \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),\\
\hat{l}_y &= \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),\\
\hat{l}_z &= \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).
\end{aligned}
\tag{31,3}
$$

სანამ საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების მოძებნაზე გადავიდოდეთ, შევისწავლოთ მომენტის ოპერატორის ზოგადი თვისებები.

ვიპოვოთ მომენტის პროექციების კომუტაციის თვისებები კოორდინატებთან, იმპულსებთან და ა. შ. თუ გავიხსენებთ პუასონის ფრჩხილების (16,16) თვისებას და, რომ $[\hat{\mathbf{p}}_i, \hat{\mathbf{p}}_k]=[x_i, x_k]=0$ ასევე $[\hat{\mathbf{p}}_i, \hat{x}_k]=\delta_{ik}$, მივიღებთ:

$$
\begin{aligned}
[\hat{l}_x, x] &= [y\hat{\mathbf{p}}_z, x] - [z\hat{\mathbf{p}}_y, x]=0,\\
[\hat{l}_y, y] &= [z\hat{\mathbf{p}}_x, y] - [x\hat{\mathbf{p}}_z, y]=0,\\
[\hat{l}_z, z] &= [x\hat{\mathbf{p}}_y, z] - [y\hat{\mathbf{p}}_z, z]=0
\end{aligned}
\tag{31,4}
$$

ასევე

$$
\begin{aligned}
[\hat{l}_x, y] &= [y\hat{\mathbf{p}}_z, y] - [z\hat{\mathbf{p}}_y, y] = -z[\hat{\mathbf{p}}_y, y] = -z\\
[\hat{l}_y, z] &= [z\hat{\mathbf{p}}_x, z] - [x\hat{\mathbf{p}}_z, z] = -x[\hat{\mathbf{p}}_z, z] = -x
\end{aligned}
\tag{31,5}
$$

და ა. შ. ადვილად დავინახავთ, რომ საზოგადოდ $\mathcal{E}_{imn}$ ტენზორის დახმარებით შეიძლება დავწეროთ[1]

$$
[\hat{l}_i, x_m] = -\mathcal{E}_{imn}x_n; \tag{31,6}
$$

ასე, მაგალითად,

$$
[\hat{l}_y, x] = -\mathcal{E}_{213}x_3 = z, \qquad [\hat{l}_x, z] = -\mathcal{E}_{132}x_2 = y \qquad \text{და ა. შ.}
$$

ახლა ვიპოვოთ მომენტისა და იმპულსის ოპერატორის კომუტაციის ფორმულები. თუ გავიხსენებთ, რომ $\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, f(x)\right] = \frac{\partial f}{\partial x}$, ვვექნება:

$$
\begin{aligned}
[\hat{l}_x, \hat{\mathbf{p}}_x] &= -\frac{\partial}{\partial x}\hat{\mathbf{l}}_x = -\frac{\partial}{\partial x}(y\hat{\mathbf{p}}_z - z\hat{\mathbf{p}}_y) = 0,\\
[\hat{l}_y, \hat{\mathbf{p}}_y] &= -\frac{\partial}{\partial y}(z\mathbf{p}_x - x\hat{\mathbf{p}}_z) = 0,\\
[\hat{l}_z, \hat{\mathbf{p}}_z] &= -\frac{\partial}{\partial z}(x\hat{\mathbf{p}}_y - y\hat{\mathbf{p}}_x) = 0.
\end{aligned}
\tag{31,7}
$$

---

[1] $\mathcal{E}_{imn}$-ტენზორის თვისებების შესახებ იხილეთ: ვ. მამასახლისოვი, გ. ჭილაშვილი, თეორიული ფიზიკა, I მექანიკა, 1967.

ასევე

$$[\hat{l}_x, \ \hat{p}_y] = -\frac{\partial}{\partial y}\hat{l}_x = -\frac{\partial}{\partial y}(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) = -p_z.$$

ან ზოგადად,

$$[\hat{l}_i, \hat{p}_m] = -\mathscr{E}_{imn}\hat{p}_n. \tag{31,8}$$

ვიპოვოთ ბოლოს $[\hat{l}_i, \hat{l}_m]$ ფრჩხილების გამოსახულება. აშკარაა, $[\hat{l}_x, \ \hat{l}_x] = [\hat{l}_y, \ \hat{l}_y] = [\hat{l}_z, \ \hat{l}_z] = 0$. შემდეგ, (31,8) ფორმულების გათვალისწინებით ადვილად მივიღებთ

$$[\hat{l}_x, \ \hat{l}_y] = [\hat{l}_x, \ z\hat{p}_x - x\hat{p}_z] = [\hat{l}_x, \ z\hat{p}_x] - [\hat{l}_x, \ x\hat{p}_z] =$$

$$= [\hat{l}_x, \ z]\hat{p}_x - x[\hat{l}_x, \hat{p}_z] = -\mathscr{E}_{132}\, y\hat{p}_x + x\mathscr{E}_{132}p_y = y\hat{p}_x - x\hat{p}_y = -\hat{l}_z \tag{31,8'}$$

სრულიად ანალოგიურად მიიღება ფორმულები $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$-ის სხვა კომბინაციებისათვის; ასე, რომ, საზოგადოდ, შეგვიძლია დავწეროთ:

$$[\hat{l}_i, \hat{l}_m] = -\mathscr{E}_{imn}\hat{l}_n. \tag{31,9}$$

მიღებული ფორმულა გვიჩვენებს, რომ მომენტის მდგენელების ოპერატორები ერთმანეთთან კომუტატური არ არის, ე. ი. მათ არ შეიძლება ჰქონდეთ საერთო საკუთარი ფუნქციები.

ახლა ვაჩვენოთ, რომ მომენტის კვადრატის ოპერატორი კომუტატურია მომენტის მდგენელების ოპერატორებთან. მართლაც, რადგან

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2, \tag{31,10}$$

თანახმად (16,16) ფორმულისა გვექნება

$$[\hat{\mathbf{l}}^2, \ \hat{l}_z] = [\hat{l}_x^2, \ \hat{l}_z] + [\hat{l}_y^2, \ \hat{l}_z] + [\hat{l}_x^2, \ \hat{l}_z] =$$

$$= \hat{l}_x[\hat{l}_x, \ \hat{l}_z] + [\hat{l}_x, \ \hat{l}_z]\hat{l}_x + \hat{l}_y[\hat{l}_y, \ \hat{l}_z] + [\hat{l}_y, \ \hat{l}_z]\hat{l}_y. \tag{31,11}$$

თუ გამოვიყენებთ (31,9) ფორმულას, მივიღებთ

$$[\hat{\mathbf{l}}^2, \ \hat{l}_z] = -\mathscr{E}_{132}(\hat{l}_x\hat{l}_y + \hat{l}_y\hat{l}_x) - \mathscr{E}_{231}(\hat{l}_y\hat{l}_x + \hat{l}_x\hat{l}_y) =$$

$$= \hat{l}_x\hat{l}_y + \hat{l}_y\hat{l}_x - (\hat{l}_x\hat{l}_y + \hat{l}_y\hat{l}_x) = 0. \tag{31,12}$$

სავსებით ანალოგიურად ვაჩვენებთ, რომ $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$ მდგენელებიც კომუტატურებია $\hat{\mathbf{l}}^2$-თან; ამგვარად, გვაქვს

$$[\hat{\mathbf{l}}^2, \ \hat{l}_x] = [\hat{\mathbf{l}}^2, \ \hat{l}_y] = [\hat{\mathbf{l}}^2, \ \hat{l}_z] = 0. \tag{31,13}$$

რადგან $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$ ოპერატორები ერთმანეთთან კომუტატური არ არის, ამიტომ საერთო საკუთარი ფუნქცია შეიძლება ჰქონდეს მხოლოდ $\hat{\mathbf{l}}^2$ და მომენტის რომელიმე ერთ მდგენელს.

ჩვენ ვხედავთ, რომ პუასონის კვანტური ფრჩხილების გამოსახულებანი ფიზიკური სიდიდეებიდან სავსებით ისეთივეა, როგორც კლასიკურ მექანიკაში, ოღონდ კვანტურ მექანიკაში ნაცვლად ამ სიდიდეებისა, განიხილება მათი ოპერატორები.

§ 32. მომენტის ოპერატორი სფერულ კოორდინატებში

მომენტის ოპერატორისათვის ხშირად ხელსაყრელია სფერულ კოორდინატებზე გადასვლა. ამ მიზნით შემოვიღოთ სფერული კოორდინატები:

$$
\begin{aligned}
x &= r\sin\theta\cos\varphi, & 0\leqslant r\leqslant\infty \\
y &= r\sin\theta\sin\varphi, & 0\leqslant\theta\leqslant\pi \\
z &= r\cos\theta, & 0\leqslant\varphi\leqslant 2\pi
\end{aligned}
\tag{32,1}
$$

ან, რაც იგივეა,

$$
\begin{aligned}
x\pm iy &= r\sin\theta\, e^{\pm i\varphi} \\
z &= r\cos\theta\cdot
\end{aligned}
\tag{32,1'}
$$

განვიხილოთ ოპერაცია $\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$, გვექნება

$$\frac{\partial}{\partial\varphi}=\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\varphi}+\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\varphi}+\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\varphi}, \tag{32,2}$$

რადგან $\dfrac{\partial x}{\partial\varphi}=-r\sin\theta\sin\varphi=-y$, $\dfrac{\partial y}{\partial\varphi}=r\sin\theta\cos\varphi=x$ და $\dfrac{\partial z}{\partial\varphi}=0$, ამიტომ უკანასკნელი ფორმულა მიიღებს სახეს:

$$\frac{\partial}{\partial\varphi}=x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}. \tag{32,3}$$

მაშასადამე, თუ გავიხსენებთ (31,3) ფორმულას, შეიძლება დავწეროთ

$$\hat{l}_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}; \tag{32,4}$$

ამგვარად, მომენტის z მდგენელის ოპერატორი გამოვხატეთ სფერულ კოორდინატებში. დანარჩენი ორი მდგენელის გამოსახატავად სფერულ კოორდინატებში ხელსაყრელია ჯერ $\hat{l}_x\pm i\hat{l}_y$ კომბინაციების გამოხატვა ამ კოორდინატებში. თუ გავითვალისწინებთ (32,1) ფორმულებს, ადვილად მივიღებთ

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\theta}&=\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\theta}+\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\theta}+\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\theta}= \\
&=\operatorname{ctg}\theta\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}\right)-z\frac{\partial}{\partial z}\operatorname{tg}\theta.
\end{aligned}
\tag{32,5}
$$

(31,3) ფორმულებიდან შევადგინოთ $(\hat{l}_x+i\hat{l}_y)$ კომბინაცია. მარტივი დაჯგუფების შემდეგ მივიღებთ

$$(\hat{l}_x+i\hat{l}_y)\psi=\hbar\left\{iz\frac{\partial\psi}{\partial y}+z\frac{\partial\psi}{\partial x}-(x+iy)\frac{\partial\psi}{\partial z}\right\}. \tag{32,6}$$

(32,1′) ფორმულების დახმარებით გვექნება

$$
\begin{aligned}
(\hat{l}_x+i\hat{l}_y)\,\psi&=\hbar\, e^{i\varphi}\left\{ire^{-i\varphi}\cos\theta\frac{\partial\psi}{\partial y}+\right. \\
&\left.+re^{-i\varphi}\cos\theta\frac{\partial\psi}{\partial x}-r\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial z}\right\}=\hbar\, e^{i\varphi}\left\{i(x-iy)\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial\psi}{\partial y}+\right.
\end{aligned}
$$

$$+(x-iy)\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial\psi}{\partial x}-r\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial z}\Big\} = \hbar\, e^{i\varphi}\left\{\operatorname{ctg}\theta\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x}+y\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)+\right.$$

$$\left.+\,i\operatorname{ctg}\theta\left(x\frac{\partial\psi}{\partial y}-y\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)-z\operatorname{tg}\theta\frac{\partial\psi}{\partial z}\right\}. \qquad (32,7)$$

თუ გავითვალისწინებთ (32,5) ფორმულას, შეიძლება დავწეროთ

$$(\hat{l}_x + i\hat{l}_y) = \hbar e^{i\varphi}\left\{\frac{\partial}{\partial\theta} + i\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\}. \qquad (32,8)$$

(31,3) ფორმულიდან ჩანს, რომ $\hat{l}_x$ და $\hat{l}_y$ წმინდა ვითარსი სიდიდეებია, ამიტომ $(\hat{l}_x + i\hat{l}_y)^* = (-\hat{l}_x + i\hat{l}_y) = -(\hat{l}_x - i\hat{l}_y)$ და, მაშასადამე, (32,8) ფორმულის თანახმად $(\hat{l}_x - i\hat{l}_y)$ ოპერატორისათვის სფერულ კოორდინატებში მივიღებთ

$$(\hat{l}_x - i\hat{l}_y) = -\hbar\, e^{-i\varphi}\left\{\frac{\partial}{\partial\theta} - i\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\}; \qquad (32,9)$$

(32,8) და (32,9) ფორმულებიდან შეიძლება განვსაზღვროთ $\hat{l}_x$ და $\hat{l}_y$-ის სახე სფერულ კოორდინატებში; რადგან შემდგომში ამ ოპერატორების გამოსახულებებს სფერულ კოორდინატებში არ გამოვიყენებთ, ამიტომ ამ განსაზღვრაზე აღარ შევჩერდებით.

ჩვენთვის დიდი მნიშვნელობა ექნება მომენტის კვადრატის ოპერატორის სახის დადგენას სფერულ კოორდინატებში. ამას ადვილად მოვახერხებთ (32,8) და (32,9) ფორმულების დახმარებით; მართლაც, ადვილად შევამოწმებთ, რომ ადგილი აქვს შემდეგ იგივეობას.

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 = (\hat{l}_x + i\hat{l}_y)(\hat{l}_x - i\hat{l}_y) - i(\hat{l}_y\hat{l}_x - \hat{l}_x\hat{l}_y) + \hat{l}_z^2 \qquad (32,10)$$

ან, (31,8′) ფორმულის თანახმად,

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = (\hat{l}_x + i\hat{l}_y)(\hat{l}_x - i\hat{l}_y) - \hbar\hat{l}_z + \hat{l}_z^2. \qquad (32,11)$$

ვიპოვოთ ჯერ $(\hat{l}_x + i\hat{l}_y)(\hat{l}_x - i\hat{l}_y)$ გამოსახულება. თანახმად (32,8) და (32,9) ფორმულებისა შეგვიძლია დავწეროთ:

$$(\hat{l}_x + i\hat{l}_y)(\hat{l}_x - i\hat{l}_y)\psi =$$

$$= -\hbar^2 e^{i\varphi}\left\{\frac{\partial}{\partial\theta} + i\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\}\left\{e^{-i\varphi}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} - i\left(e^{-i\varphi}\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right)\right\}. \qquad (32,12)$$

გაწარმოების ოპერაციის ჩატარების შემდეგ მივიღებთ

$$(\hat{l}_x + i\hat{l}_y)(\hat{l}_x - i\hat{l}_y) = -\hbar^2\left\{\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\}; \qquad (32,13)$$

თუ შევიტანთ (32,13) და $\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$ გამოსახულებას (32,11)-ში, გვექნება

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right\} \tag{32,14}$$

ან

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta,\varphi} \tag{32,15}$$

სადაც

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{32,16}$$

არის ლაპლასის ოპერატორის კუთხური ნაწილი. მას ხშირად ლეჟანდრის ოპერატორსაც უწოდებენ. ამგვარად, მომენტის კვადრატის ოპერატორი ლეჟანდრის ოპერატორთან დაკავშირებული ყოფილა (32,15) ფორმულით.

§ 33. მომენტის მდგენელისა და კვადრატის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები

რადგან მომენტის კვადრატის ოპერატორი კომუტატურია მომენტის მდგენელის ოპერატორთან, ამიტომ ამ ორ ოპერატორს ექნება საერთო საკუთარი ფუნქცია. ვიპოვოთ ჯერ მომენტის z მდგენელის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები. ამისათვის დავწეროთ საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება

$$\hat{l}_z \Phi = l_z \Phi. \tag{33,1}$$

თუ შევიტანთ $\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi}$, მივიღებთ:

$$\frac{\partial\Phi}{\partial\varphi} = \frac{il_z}{\hbar} \Phi. \tag{33,1'}$$

l_z არის მომენტის z მდგენელის ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობა. ამ განტოლების ამოხსნას ექნება შემდეგი სახე:

$$\Phi = c f(r,\theta) \exp\left(\frac{il_z\varphi}{\hbar}\right), \tag{33,2}$$

სადაც $c = \text{const}$, $f(r, \theta)$ კი r და θ ნებისმიერი ფუნქციაა. მოითხოვება, რომ Φ ფუნქცია იყოს უწყვეტი, სასრული და ცალსახა. ამ ფუნქციის უწყვეტობა და სასრულობა აშკარაა. რადგან φ იცვლება 0 და 2π შუალედში, ამიტომ როდესაც 2π კუთხის შემოწერის შემდეგ φ დაუბრუნდება თავის საწყის მნიშვნელობას, $\Phi(\varphi)$ ფუნქციის ცალსახობისათვის საჭიროა, რომ მისი მნიშვნელობაც $(\varphi+2\pi)$-ზე თავის თავს დაუბრუნდეს. ამგვარად, $\Phi(\varphi)$ ფუნქციის ცალსახობისათვის საჭიროა Φ ფუნქცია იყოს პერიოდული 2π პერიოდით, ანუ

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi). \tag{33,2'}$$

ამ პირობის გამოყენება (33,2)-ზე მოგვცემს

$$\exp\left[\frac{il_z(\varphi + 2\pi)}{\hbar}\right] = \exp\left(\frac{il_z\varphi}{\hbar}\right).$$

ეს ტოლობა კი მხოლოდ მაშინ იქნება დაცული, როცა $\exp\left(\frac{il_z}{\hbar}2\pi\right) = 1$. ამისათვის კი საჭიროა, რომ

$$l_z = m\hbar, \tag{33,3}$$

სადაც m მთელი დადებითი ან უარყოფითი რიცხვია ნულის ჩათვლით, ე. ი.

$$m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \pm 3 \pm \ldots$$

ამგვარად, მოძრაობის რაოდენობის მომენტის მდგენელის (ჩვენს შემთხვევაში z მდგენელის) საკუთარი მნიშვნელობა იკვანტება. მას შეუძლია მიიღოს პლანკის მუდმივის მხოლოდ მთელი ჯერადი მნიშვნელობანი. ამასთან, მისი მნიშვნელობები დამოკიდებულია m მთელ რიცხვზე. ამ რიცხვს მაგნიტურ კვანტურ რიცხვს უწოდებენ. მაშასადამე, მომენტის z მდგენელის ოპერატორის საკუთიარ ფუნქციებს ექნებათ შემდეგი სახე:

$$\Phi(\varphi) = c f(r, \theta) e^{im\varphi}. \tag{33,4}$$

შემდგომი მიზნებისათვის მნიშვნელოვანია ამ ფუნქციის მხოლოდ φ-ზე დამოკიდებული ნაწილის შესწავლა. აღვნიშნოთ

$$\Phi_m(\varphi) = c\ e^{im\varphi}. \tag{33,4'}$$

c მუდმივი შეგვიძლია განვსაზღვროთ ნორმირების პირობიდან; რადგან მომენტის მდგენელისათვის მივიღეთ დისკრეტული სპექტრი, ამიტომ ნორმირების პირობას ექნება შემდეგი სახე:

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^* \Phi_m d\Phi = 1. \tag{33,4''}$$

თუ შევიტანთ Φ_m-ის მნიშვნელობას (33,4′)-დან, მივიღებთ $c = (2\pi)^{-1/2}$. ამგვარად, მომენტის z მდგენელის ნორმირებული ფუნქციისათვის გვექნება

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}. \tag{33,5}$$

(11,3) ფორმულის თანახმად ნათელია, რომ $\Phi_m(\varphi)$ ფუნქციები ორთოგონალურიც არიან.

ახლა ვიპოვოთ მომენტის კვადრატის საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები. $\hat{\mathbf{l}}^2$-ის საკუთარი მნიშვნელობა აღვნიშნოთ $\mathbf{l}^2$, მაშინ საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლებას ექნება შემდეგი სახე:

$$\hat{\mathbf{l}}^2 Y(\theta, \varphi) = \mathbf{l}^2 Y(\theta, \varphi). \tag{33,6}$$

თუ შევიტანთ $\hat{\mathbf{l}}^2$ ოპერატორის გამოსახულებას (32,15) და (32,16) ფორმულებიდან, გვექნება

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} + \frac{\mathbf{l}^2}{\hbar^2} Y = 0. \tag{33,7}$$

ეს კი წარმოადგენს სფერული ფუნქციების განტოლებას. საჭიროა ვიპოვოთ ამ განტოლების ისეთი ამოხსნა, რომელიც აკმაყოფილებს სტანდარტულ პირობებს (უწყვეტობა, სასრულობა, ცალსახობა). მათემატიკიდან ცნობილია, რომ ამ სასაზღვრო პირობებში (33,7) განტოლებას ამოხსნა აქვს მხოლოდ მაშინ, როცა შესრულებულია პირობა

$$\frac{\mathbf{l}^2}{\hbar^2} = l(l+1). \tag{33,7'}$$

სადაც l არის მთელი დადებითი რიცხვი ნულის ჩათვლით. მაშასადამე, მომენტის კვადრატის საკუთარი მნიშვნელობებისათვის მივიღებთ

$$\mathbf{l}^2 = \hbar^2 l(l+1), \tag{33,8}$$

ე. ი. მომენტის კვადრატი იკვანტება. l-ს უწოდებენ აზიმუტალურ კვანტურ რიცხვს. ცნობილია, რომ ყოველი მოცემული l-ისათვის არსებობს (33,7) განტოლების წრფივად დამოუკიდებელი $2l+1$ ამონახსნი. ეს ამონახსნები სფერულ ფუნქციებს წარმოადგენენ; ისინი დამოკიდებული არიან ორ მთელ რიცხვზე l-ზე და m-ზე. ამ ფუნქციებს $Y_{lm}(\theta,\varphi)$-თი აღნიშნავენ და განმარტავენ შემდეგნაირად:

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{lm}(\cos\theta) e^{im\varphi} \, . \tag{33,9}$$

აქ $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm, \ldots \pm l$, ე. ი. m იღებს სულ $2l+1$ მნიშვნელობას. ეს ფუნქციები ორთო-ნორმირებულია პირობით

$$\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} Y^*_{l'm'}(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \tag{33,10}$$

სადაც

$$d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi \tag{33,11}$$

სხეულოვანი კუთხეა.

(33,9) განმარტებაში შემავალ $P_{lm}(\cos\theta)$-ს ლეჟანდრის მიკავშირებულ პოლინომს უწოდებენ. იგი ლეჟანდრის $P_l(\cos\theta)$ პოლინომთან

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2!\, l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (\xi^2 - 1)^l, \quad (\xi = \cos\theta) \tag{33,12}$$

შემდეგნაირადაა დაკავშირებული

$$P_{lm}(\xi) = (1-\xi^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{d\xi^m} P_l(\xi), \tag{33,13}$$

სადაც $0 \leqslant m \leqslant l$. როცა $|m| > l$, მაშინ, ცხადია, $P_{lm}(\xi) = 0$. ნათელია, რომ ლეჟანდრის მიკავშირებული პოლინომი ასეც შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ:

$$P_{lm}(\xi) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} (1-\xi^2)^{-\frac{m}{2}} \frac{d^{l-m}}{d\xi^{l-m}} (1-\xi^2)^l \, . \tag{33,14}$$

ეს გამოსახულება განმარტებულია m-ის ორივე ნიშნისათვის და $-l \leqslant m \leqslant +l$. ადვილი დასანახია, რომ $P_{l0}(\xi) = P_l(\xi)$ და შესრულებულია ტოლობა

$$P_{lm}(-\xi) = (-1)^{l+m} P_{lm}(\xi) \tag{33,15}$$

როგორც ლეჟანდრის, ისე ლეჟანდრის მიკავშირებული პოლინომები ორთო-ნორმირებული არიან; სახელდობრ,

$$\int_{-1}^{+1} P_{l'}(\xi) P_l(\xi) d\xi = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \tag{33,16}$$

და

$$\int_{-1}^{+1} P_{l'm}(\xi) P_{lm}(\xi) d\xi = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'} \, . \tag{33,17}$$

აშკარაა, რომ სფერული ფუნქციებისათვის გვექნება შემდეგი დამოკიდებულება:

$$Y_{lm}^{*}(\theta, \varphi)=(-1)^m Y_{l-m}(\theta,\varphi) \tag{33,18}$$

ამ ტოლობის სამართლიანობა ადვილად შემოწმდება სფერული ფუნქციის განმარტებიდან და ლეჟანდრის მიკავშირებული პოლინომის შემდეგი თვისებიდან:

$$P_{l-m}(\xi)=(-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_{lm}(\xi). \tag{33,19}$$

ასევე ადვილად ვაჩვენებთ, რომ

$$Y_{lm}(\pi-\theta,\ \pi+\varphi)=(-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{33,20}$$

მტკიცდება, რომ ადგილი აქვს მეტად მნიშვნელოვან დამოკიდებულებას, რომელსაც შეკრების ფორმულას უწოდებენ. ამ ფორმულას აქვს შემდეგი სახე:

$$P_l(\cos\theta)=\frac{4\pi}{2l+1}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}^{*}(\theta_1, \varphi_1) Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2), \tag{33,21}$$

სადაც θ არის კუთხე (θ_1, φ_1) და (θ_2, φ_2) კუთხეებით განსაზღვრულ ორ მიმართულებას შორის.

მოვიტანოთ სფერული ფუნქციების გამოსახულება l-ის რამდენიმე მნიშვნელობისათვის. ავიღოთ $l=0$ $(m=0)$, $l=1$ $(m=0, \pm 1)$ და $l=2$ $(m=0, \pm 1, \pm 2)$, გვექნება:

$$Y_{00}(\theta, \varphi)=(4\pi)^{-\frac{1}{2}}, \tag{33,22}$$

$$Y_{10}(\theta,\ \varphi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \tag{33,23}$$

$$Y_{1\pm1}(\theta,\ \varphi)=\pm\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\ \sin\theta e^{\pm i\varphi}, \tag{33,24}$$

$$Y_{20}(\theta,\ \varphi)=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\ (3\cos^2\theta-1), \tag{33,25}$$

$$Y_{2\pm1}(\theta)=\pm\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\ e^{\pm i\varphi}, \tag{33,26}$$

$$Y_{2\pm2}(\theta, \varphi)=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\ e^{\pm 2i\varphi} \tag{33,27}$$

ცხადია, კერძო შემთხვევაში, როცა $m=0$, გვექნება კავშირი

$$P_l(\cos\theta)=\left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}} Y_{l0}(\theta). \tag{33,28}$$

დაბოლოს აღვნიშნოთ, რომ სამართლიანია შემდეგი რეკურენტული ფორმულები:

$$\cos\theta\, Y_{lm}(\theta, \varphi)=\left\{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}\right\}^{\frac{1}{2}} Y_{l+1,m}(\theta, \varphi)+$$

$$+\left\{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}\right\}^{\frac{1}{2}} Y_{l-1,m}(\theta, \varphi) \tag{33,29}$$

$$\sin\theta\, Y_{lm}(\theta,\varphi)=\left\{\left[\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)}\right]^{\frac{1}{2}} Y_{l+1,\, m+1}(\theta,\varphi)-\right.$$

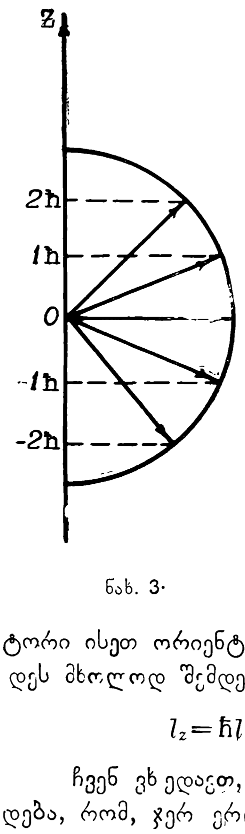
$$\left.-\left[\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l-1)(2l+1)}\right]^{\frac{1}{2}} Y_{l-1,\, m+1}(\theta,\varphi)\right\} e^{-i\varphi}, \qquad (33{,}30)$$

$$\sin\theta\, Y_{lm}(\theta,\varphi)=-\left\{\left[\frac{(l-m+1)(l-m+2)}{(2l+1)(2l+3)}\right]^{\frac{1}{2}} Y_{l+1,m-1}(\theta,\varphi)+\right.$$

$$\left.+\left[\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l-1)(2l+1)}\right]^{\frac{1}{2}} Y_{l-1,m-1}(\theta,\varphi)\right\} e^{i\varphi}. \qquad (33{,}31)$$

როგორც ვხედავთ, მომენტის კვადრატის საკუთარი მნიშვნელობები დამოკიდებულია მხოლოდ ერთ l კვანტურ რიცხვზე, მაშინ როცა საკუთარი ფუნქციები $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ ორ l და m კვანტურ რიცხვებზეა დამოკიდებული. ამიტომ ერთ საკუთარ მნიშვნელობას შეესაბამება $2l+1$ საკუთარი ფუნქცია, რაც ნიშნავს, რომ ადგილი აქვს $2l+1$ ჯერად გადაგვარებას. კერძო შემთხვევაში, როცა $l=0$, მაშინ $m=0$ და გადაგვარება არა გვაქვს.

ამ პარაგრაფის დასაწყისში აღვნიშნეთ, რომ $\hat{\mathbf{l}}^2$ და $\hat{l}_z$ ოპერატორებს საერთო საკუთარი ფუნქცია უნდა ჰქონდეთ. ადვილად დავინახავთ, რომ (33,9) ფუნქცია, რომელიც $\hat{\mathbf{l}}^2$-ის საკუთარ ფუნქციას წარმოადგენს, აკმაყოფილებს აგრეთვე (33,1′) განტოლებას. მართლაც, თუ შევიტანთ $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ ფუნქციას (33,1′)-ში, მივიღებთ $m=l_z/\hbar$, რაც ემთხვევა (33,3). ამგვარად $Y_{lm}(\theta,\varphi)$-ს m ინდექსი ყოფილა l_z-ის საკუთარი მნიშვნელობების დამახასიათებელი, მაგნიტური კვანტური რიცხვი.



ნახ. 3.

მოვიტანოთ ზემოთ მიღებული შედეგების გეომეტრიული ინტერპრეტაცია. (33,8) ფორმულიდან გვაქვს

$$|\mathbf{l}|=\hbar\sqrt{l(l+1)}, \qquad (33{,}32)$$

საიდანაც გამომდინარეობს, რომ მომენტი არ შეიძლება ნებისმიერი იყოს, ხოლო (23,3) ფორმულის თანახმად მომენტის ვექტორს სივრცეში ისეთი მიმართულება უნდა ჰქონდეს, რომ მისი მდგენელი z-ღერძზე მხოლოდ და მხოლოდ $m\hbar$ მნიშვნელობებს იღებდეს. ავიღოთ z-ღერძი და მის რომელიმე წერტილში მოვდოთ მომენტის ვექტორი. შემოვხაზოთ ამ წერტილის ირგვლივ ისეთი ნახევარი წრე, რომლის რადიუსია $|\mathbf{l}|=\hbar\sqrt{l(l+1)}$, მაშინ მომენტის ვექტორი ისეთ ორიენტაციას უნდა იკავებდეს სივრცეში, რომ მას z-ღერძზე ჰქონდეს მხოლოდ შემდეგი მდგენელები:

$$l_z=\hbar l,\ \hbar(l-1),\ldots\ \hbar,\ 0,-\hbar,\ldots\ -\hbar(l-1),\ -\hbar l. \qquad (33{,}33)$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ კვანტურ მექანიკაში მომენტის ვექტორი იმით ხასიათდება, რომ, ჯერ ერთი, მას შეუძლია სივრცეში მიიღოს მხოლოდ მკაცრად განსაზღვრული ორიენტაცია და, მეორე, მომენტის ვექტორის სიგრძე არ ემთხვევა

მის მაქსიმალურ პროექციას $|\mathbf{l}| \neq l\hbar$. ასეთ ვექტორებს კვანტურ ვექტორებს უწოდებენ.

იმ კერძო შემთხვევაში, როცა $l \gg 1$ (33,8) ფორმულის თანახმად შეგვიძლია დავწეროთ $l \simeq l\hbar$, რაც ბორის დაკვანტვის პირობას ემთხვევა. მაშინ მომენტის ვექტორის მაქსიმალური პროექცია მომენტის ვექტორის სიგრძეს უტოლდება.

მე-3 ნახაზზე მოტანილია კერძო შემთხვევა, როცა $l=2$. ამ შემთხვევაში მომენტის სიდიდე $|\mathbf{l}|=\sqrt{2 \cdot 3}\,\hbar=\sqrt{6}\,\hbar$ და მას ექნება მხოლოდ პროექციები: $l_z=2\hbar,\ 1\hbar, 0,\ -1\hbar,\ -2\hbar$, ე. ი. მომენტის ვექტორმა შეიძლება მიიღოს მხოლოდ 5 ორიენტაცია. ამ მოვლენას სივრცითი დაკვანტვა ეწოდება და, როგორც აღვნიშნეთ, იგი ცნობილი იყო ჯერ კიდევ ელემენტარულ კვანტურ თეორიაში.

პრაქტიკულ შემთხვევაში გამოყოფილ z მიმართულებას წარმოადგენს მაგნიტური ველის დაძაბულობის მიმართულება. ამ შემთხვევაში m განსაზღვრავს მომენტის პროექციის მნიშვნელობას მაგნიტური ველის დაძაბულობის გასწვრივ. აქედან წარმოდგება, სწორედ, მისი სახელწოდება—მაგნიტური კვანტური რიცხვი.

მომენტებს ხშირად ზომავენ $\hbar$ ერთეულებში. მაშინ (33,8) და (33,3) ფორმულები მომენტის კვადრატისა და z მდგენელის საკუთარი მნიშვნელობებისათვის მოგვცემენ:

$$\mathbf{l}^2=l(l+1), \quad l_z=m. \tag{33,34}$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ l აზიმუტალური კვანტური რიცხვის ფიზიკური შინაარსი ისაა, რომ იგი წარმოადგენს მომენტის პროექციის მაქსიმალურ მნიშვნელობას.

შ ე ნ ი შ ვ ნ ა. აშკარაა, რომ საზოგადოდ, როგორც $\hat{\mathbf{l}}_z$ ისე $\hat{\mathbf{l}}^2$ ოპერატორების განტოლებებს დააკმაყოფილებს (33,9) გამრავლებული რადიუსის ნებისმიერ ფუნქციაზე, ე. ი. ფუნქცია

$$R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi), \tag{33,35}$$

მაგრამ $R(r)$ ნებისმიერი ფუნქციის განსაზღვრა მხოლოდ მომენტის ოპერატორებიდან შეუძლებელია. ეს იმას ნიშნავს, რომ მოძრაობის სრული დახასიათებისათვის კიდევ უნდა არსებობდეს ისეთი მესამე ოპერატორი, რომელც კომუტატურია $\hat{l}_z$ და $\hat{\mathbf{l}}^2$-თან, მაშასადამე, ექნება საერთო საკუთარი ფუნქცია ამ ოპერატორებთან. შემდეგში ვაჩვენებთ, რომ ასეთ ოპერატორს ცენტრალური სიმეტრიის ველში წარმოადგენს ენერგიის ოპერატორის რადიალური ნაწილი. ეს უკანასკნელი კი მოგვცემს შრედინგერის რადიალური ფუნქციების განტოლებას, რომლის ამოხსნითაც დავადგენთ $R(r)$-ის სახეს. ამგვარად, ნაწილაკის მოძრაობის სრული ხასიათის დასადგენად საჭიროა შრედინგერის განტოლების ამოხსნა. $\hat{\mathbf{l}}^2$ და $\hat{l}_z$-ის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების მოძებნით ჩვენ ვიცით ნაწილაკის მოძრაობის მხოლოდ კინემატიკური მხარე. დინამიკური თვისებების დასადგენად კი საჭიროა შრედინგერის რადიალური განტოლების ამოხსნა, ამიტომ ხშირად l და m კვანტურ რიცხვებს კინემატიკურ კვანტურ რიცხვებსაც უწოდებენ.

აღვნიშნოთ, რომ კვანტურ მექანიკაში იმპულსის მომენტს ორბიტალურ მომენტსაც უწოდებენ, ხოლო მის შესაბამის კვანტურ l რიცხვს—ორბიტალურ კვანტურ რიცხვს. როცა l მოცემულია, მაშინ განსაზღვრულია ორბიტალური მომენტის სიგრძე $\hbar\sqrt{l(l+1)}$, ამიტომ, ხშირად, როდესაც ამბობენ მოცემულია ორბიტალური მომენტის მნიშვნელობა, გულისხმობენ, რომ განსაზღვრულია l კვანტური რიცხვი. მაგალითად, როცა ამბობენ, ორბიტალური მომენტი უდრის 2-ს, ეს იმას ნიშნავს, რომ $l=2$, მომენტის სიგრძე კი $\hbar\sqrt{6}$-ის ტოლია.

§ 34. სრული ენერგიის ოპერატორი. ჰამილტონიანი

ენერგიის ოპერატორი ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი ოპერატორია კვანტურ მექანიკაში თუნდაც იმიტომ, რომ შრედინგერის განტოლება—კვანტური მექანიკის მოძრაობის განტოლება—წარმოადგენს ამ ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლებას.

როგორც კლასიკური მექანიკიდან არის ცნობილი, ჰამილტონიანი ფუნქ- ციაა კოორდინატებისა და იმპულსების. მას ველში მოძრავი ერთი ნაწილაკისათვის, დეკარტის კოორდინატებში, აქვს შემდეგი სახე:

$$H=\frac{1}{2\mu}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)+V(\mathbf{r},\ t). \tag{34,1}$$

კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზის თანახმად, კოორდინატულ წარმოდგე- ნაში, ჰამილტონის ოპერატორს ექნება გამოსახულება

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(\mathbf{r},\ t). \tag{34,2}$$

სტაციონარულ შემთხვევაში, როცა პოტენციალური ენერგია დროზე ცხადად არ არის დამოკიდებული, კლასიკური ჰამილტონის ფუნქცია სრულ ენერგიას ემთხ- ვევა. შესაბამისი ჰამილტონის ოპერატორი გამოხატავს სრული ენერგიის ოპერა- ტორს, რომელსაც კვლავ $\hat{H}$-ით აღვნიშნავთ, ე. ი.

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(\mathbf{r}). \tag{34,3}$$

როგორც აღვნიშნეთ, ამ ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშ- ვნელობების განტოლება

$$\hat{H}\psi=E\psi \tag{34,4}$$

შრედინგერის განტოლებას ემთხვევა; შრედინგერის დროით განტოლებაში

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi, \tag{34,5}$$

კი მონაწილეობს (34,2) დროზე დამოკიდებული ჰამილტონის ოპერატორი.

აღსანიშნავია, რომ (34,4) განტოლების საკუთარი მნიშვნელობები სრულ ენერგიას წარმოადგენენ. კვანტურ მექანიკაში სრული ენერგია არ არის ჯამი კინე- ტიკური და პოტენციალური ენერგიებისა. ეს რომ ასე ყოფილიყო, მაშინ, განუზ- ღვრელობის პრინციპის თანახმად, ერთდროულად და ზუსტად ვერ გავზომავდით კინეტიკურ ენერგიას (როგორც იმპულსების ფუნქციას!) და პოტენციალურ ენერ- გიას (როგორც კოორდინატების ფუნქციას!); მაშასადამე, ვერ განვსაზღვრავდით მათ ჯამსაც. მართალია კვანტურ მექანიკაში სრული ენერგიის ოპერატორი წარმოადგენს კინეტიკური და პოტენციალური ენერგიების ოპერატორების ჯამს, მაგრამ აქ არა- ვითარი წინააღმდეგობა არა გვაქვს, რამდენადაც ოპერატორი მათემატიკური სიმ- ბოლოა და არაა დაკავშირებული გაზომვის პროცესთან; რაც შეეხება სრული ენერგიის ოპერატორის საკუთარ მნიშვნელობას, იგი იზომება როგორც ერთი მთლი- ანი სიდიდე.

ისევე, როგორც კლასიკურ მექანიკაში, კვანტურშიაც ამოცანის ხასიათს გან- საზღვრავს პოტენციალური ენერგია. ჰამილტონიანში შემავალი კინეტიკური ენერ- გიის ოპერატორი

$$\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta \tag{34,6}$$

ნებისმიერი ამოცანისათვის ერთნაირია; რაც შეეხება პოტენციალურ ენერგიას, მას სხვადასხვა ამოცანისათვის სხვადასხვა სახე აქვს. ამასთან, პოტენციალური ენერგიის კონკრეტული გამოსახულების შესაბამისად, შრედინგერის განტოლების ამოხსნა შესაძლოა ხელსაყრელი აღმოჩდეს სხვადასხვა კოორდინატთა სისტემაში. ამ მიზნით მეტად დიდი მნიშვნელობა აქვს ჰამილტონიანის ჩაწერას ყველა შესაძლო კოორდინატებში. ამისათვის კი საკმარისია მხოლოდ და მხოლოდ ლაპლასიანის გამოხატულების დაწერა აღნიშნულ კოორდინატებში.

ლაპლასიანს ნებისმიერ ორთოგონალურ კოორდინატებში აქვს შემდეგი სახე:[1]

$$\Delta = \frac{1}{h_{11}h_{22}h_{33}}\left\{\frac{\partial}{\partial u_1}\left(\frac{h_{22}h_{33}}{h_{11}}\frac{\partial}{\partial u_1}\right) + \frac{\partial}{\partial u_2}\left(\frac{h_{11}h_{33}}{h_{22}}\frac{\partial}{\partial u_2}\right) + \frac{\partial}{\partial u_3}\left(\frac{h_{11}h_{22}}{h_{33}}\frac{\partial}{\partial u_3}\right)\right\}, \tag{34,7}$$

სადაც h_{11}, h_{22}, h_{33} ე. წ. ლამეს პარამეტრებია:

$$h_{ii}^2 = \left(\frac{\partial x}{\partial u_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial u_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial u_i}\right)^2, \tag{34,8}$$

ხოლო u_1, u_2, u_3 ის კოორდინატებია, რომლებზედაც გვსურს გადასვლა x, y, z დეკარტის კოორდინატებიდან. სფერულ კოორდინატებში $u_1 = r$, $u_2 = \theta$, $u_3 = \varphi$, ხოლო $h_{11} = 1$, $h_{22} = r$, $h_{33} = r\sin\theta$.

შედეგად სფერულ კოორდინატებში ლაპლასის ოპერატორებისათვის მივიღებთ გამოხატულებას

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\Delta_{\theta,\varphi}}{r^2}, \tag{34,9}$$

სადაც

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{34,10}$$

წარმოადგენს ჩვენთვის უკვე კარგად ცნობილ ლეჟანდრის ოპერატორს.

ჰამილტონიანში სფერულ კოორდინატებზე გადასვლა ხელსაყრელია, როცა პოტენციალურ ენერგიას ცენტრალური სიმეტრია ახასიათებს. რადგან იმპულსის მომენტის ოპერატორის კვადრატი განსაზღვრულია $\hat{\mathbf{l}}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}$ ფორმულით, ამიტომ ჰამილტონის ოპერატორი ცენტრალური სიმეტრიის ველში მოძრავი ნაწილაკისათვის ასეც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2\mu r^2} + V(r). \tag{34,11}$$

ჰამილტონიანის ეს გამოსახულება შეიძლება სავსებით დავამსგავსოთ ცენტრალური სიმეტრიის ველის შესაბამის კლასიკურ ჰამილტონიანს, თუ შემოვიღებთ შემდეგ ოპერატორს:

---

[1] იხილეთ, მაგალითად, „ტენზორული აღრიცხვის ელემენტები“ გ. ჭილაშვილი, თსუ გამომცემლობა, 1978 წ.

$$\hat{p}_r = -i\hbar\,\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial r}\,r = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right). \tag{34,12}$$

მართლაც, რადგან

$$\hat{p}_r^2\psi = -\,\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\left(\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{1}{r}\,\psi\right) = -\,\frac{\hbar^2}{r^2}\,\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\,\frac{\partial\psi}{\partial r}\right). \tag{34,13}$$

გვექნება

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{r^2}\right) + V(r), \tag{34,14}$$

როგორც ვხედავთ, $\hat{p}_r$ ყოფილა რადიალური იმპულსის ოპერატორი.

სრულიად ანალოგიურად ვიპოვით ჰამილტონიანის გამოხატულებას სხვა ნებისმიერ ორთოგონალურ კოორდინატებშიაც.

სავარჯიშო მაგალითები

გამოიყენეთ ლაპლასის ოპერატორის (34,7) გამოსახულება და დაამტკიცეთ, რომ

1. ცილინდრულ კოორდინატებში (ϱ, φ, z) მას აქვს შემდეგი სახე;

$$\Delta = \frac{1}{\rho}\,\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\,\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$(h_{11}=1,\ h_{22}=\rho,\ h_{33}=1)$

2. პოლარკოორდინატებში სიბრტყეზე (ϱ, φ) გვექნება

$$\Delta = \frac{1}{\rho}\,\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\,\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\,\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}.$$

3. პარაბოლურ კოორდინატებში (ξ, η, φ) გვექნება

$$\left(h_{11}^2 = \frac{\xi+\eta}{4\xi},\quad h_{22}^2 = \frac{\xi+\eta}{4\eta},\quad h_{33}^2 = \xi\eta\right)$$

$$\Delta = \frac{4}{\xi+\eta}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\,\frac{\partial}{\partial\xi}\right) + \frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\,\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\right] + \frac{1}{\xi\eta}\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

§ 35. შრედინგერის განტოლება ფარდობითი მოძრაობისათვის

აქამდე ჩვენ ვიხილავდით ერთ ნაწილაკს ველში. ახლა შევისწავლოთ ორი ნაწილაკის ფარდობითი მოძრაობა. ვთქვათ, გვაქვს ორი ნაწილაკის სისტემა m_1 და m_2 მასებით. ამ ნაწილაკების ურთიერთქმედების ენერგია აღვნიშნოთ V-თი. ცხადია, რომ პოტენციალური ენერგია დამოკიდებული იქნება მხოლოდ ნაწილაკთა შორის მანძილზე $\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2$ და შესაძლოა დროზე. ასე რომ, $V=V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2,\ t)$. ამ ორი ნაწილაკის სისტემის შესაბამისი კლასიკური ჰამილტონის ფუნქცია ასე დაიწერება:

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2,\ t), \tag{35,1}$$

სადაც $\mathbf{p}_1$ და $\mathbf{p}_2$ შესაბამისად პირველი და მეორე ნაწილაკის იმპულსებია. ძირითადი ჰიპოთეზის თანახმად განხილული ამოცანის შესატყვისი კვანტურ-მექანიკური ჰამილტონიანი მიიღებს სახეს

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2,\, t); \qquad (35,2)$$

Δ_1 და Δ_2 ლაპლასიანებია აღებული პირველი და მეორე ნაწილაკის კოორდინატების მიხედვით. ამის შემდეგ შრედინგერის განტოლების დაწერა ძნელი აღარ არის. სახელდობრ, გვექნება

$$i\hbar\,\frac{\partial\Psi(\mathbf{r}_1,\,\mathbf{r}_2;\,t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi\,(\mathbf{r}_1,\,\mathbf{r}_2,\,t). \qquad (35,3)$$

იმის გამო, რომ პოტენციალური ენერგია დამოკიდებულია მხოლოდ ნაწილაკთა შორის მანძილზე და არა ცალკეული ნაწილაკის მდებარეობაზე, ამიტომ შესაძლებელია აღნიშნული ორი ნაწილაკის ამოცანის დაყვანა ერთი ნაწილაკის მოძრაობაზე, ისევე, როგორც ამას ადგილი აქვს კლასიკურ მექანიკაში.

შემოვიღოთ იაკობის კოორდინატები:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}. \qquad (35,3')$$

ლაპლასის Δ_1 და Δ_2 ოპერატორები გამოვსახოთ ამ ახალ ცვლადებში; ამისათვის წინასწარ ვიპოვოთ $\nabla_1 = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1}$ და $\Delta_2 = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2}$ ოპერატორები; გვექნება

$$\Delta_1 = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_1} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_1}; \quad \Delta_2 = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_2} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_2}, \qquad (35,4)$$

საიდანაც მარტივად მივიღებთ:

$$\nabla_1 = \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{m}{m_1 + m_2}\nabla_{\mathbf{R}},$$

$$\nabla_2 = -\nabla_{\mathbf{r}} + \frac{m_2}{m_1 + m_2}\nabla_{\mathbf{R}}. \qquad (35,5)$$

∇_1 და ∇_2 ოპერატორების კვადრატში აყვანით ვიპოვით ლაპლასიანებს $\Delta_1 = \nabla_1^2$, $\Delta_2 = \nabla_2^2$. ასე რომ, (35,2) ჰამილტონიანს ექნება სახე:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}} + V(\mathbf{r},t), \qquad (35,6)$$

სადაც $\Delta_{\mathbf{r}}$ აღნიშნავს ლაპლასის ოპერატორს ფარდობით $\mathbf{r}(x,\ y,\ z)$ ვექტორის კოორდინატებით, ხოლო $\Delta_{\mathbf{R}}$—სიმძიმის ცენტრს $\mathbf{R}\ (X,\ Y,\ Z)$ ვექტორის კოორდინატებით. (35,6) გამოსახულებაში μ დაყვანილი მასაა, M კი სრულ მასას წარმოადგენს:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad M = m_1 + m_2. \qquad (35,7)$$

პოტენციალური ენერგია სიმძიმის ცენტრის კოორდინატებს არ შეიცავს, ამიტომ მისი მოძრაობა შეგვიძლია ან ცალკე გამოვყოთ, ანდა საერთოდ ამოვაგდოთ ათვლის სისტემის ინერციის ცენტრში მოთავსებით.

შრედინგერის განტოლებას იაკობის კოორდინატებში ექნება სახე

$$i\hbar\,\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},\,\mathbf{R},\,t)}{\partial t} = \left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r},\,t) - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}}\right\}\Psi(\mathbf{r},\,\mathbf{R},\,t). \qquad (35,8)$$

გამოვიყენოთ ცვლადთა განცალების ფურიეს მეთოდი და ამონახსნი ვეძებოთ შემდეგი ნამრავლის სახით:

$$\Psi(\mathbf{r},\ \mathbf{R},\ t)=\psi_0(\mathbf{r},\ t)\,\Phi(\mathbf{R})\cdot \tag{35,9}$$

ეს ფუნქცია შევიტანოთ (35,8) განტოლებაში და შედეგი გავყოთ ამავე ფუნქციაზე; მივიღებთ

$$\frac{1}{\psi_0(\mathbf{r},\ t)}\left\{i\hbar\,\frac{\partial\psi_0(\mathbf{r},\ t)}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}}\,\psi_0(\mathbf{r},\ t)-V(\mathbf{r},\ t)\right\}+$$

$$+\frac{\hbar^2}{2M\Phi(\mathbf{R})}\Delta_{\mathbf{R}}\,\Phi(\mathbf{R})=0, \tag{35,10}$$

საიდანაც დავასკვნით, რომ

$$i\hbar\,\frac{\partial\psi_0(\mathbf{r},\ t)}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\,\Delta_{\mathbf{r}}\psi_0(\mathbf{r},\ t)-V(\mathbf{r},\ t)\psi_0(\mathbf{r},\ t)=W\psi_0(\mathbf{r},t), \tag{35,11}$$

$$\frac{\hbar^2}{2M}\,\Delta_{\mathbf{R}}\,\Phi(\mathbf{R})=-\,W\,\Phi(\mathbf{R}), \tag{35,12}$$

W ენერგიის განზომილების მქონე მუდმივია.

(35,12) განტოლება ადვილად ამოიხსნება. იგი გამოხატავს სისტემის სიმძიმის ცენტრის თავისუფალ მოძრაობას. მას აკმაყოფილებს ბრტყელი ტალღა

$$\Phi(\mathbf{R})=(2\pi\,\hbar)^{-3/2}\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{P}\mathbf{R}}\,, \tag{35,13}$$

სადაც

$$W=\frac{\mathbf{P}^2}{2M} \tag{35,14}$$

წარმოადგენს ინერციის ცენტრის გადატანითი მოძრაობის ენერგიას, ხოლო ნორმირება მოხდენილია პირობით:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Phi_{P'}(\mathbf{R})\ \Phi_{\mathbf{P}}(\mathbf{R})d\mathbf{R}=\delta(\mathbf{P}'-\mathbf{P}). \tag{35,15}$$

ამგვარად, ამოხსნას ექვემდებარება მხოლოდ (35,11) შრედინგერის განტოლება, რომელიც აღწერს სისტემის ფარდობით მოძრაობას. შემდგომში ლაპლასიანს $\mathbf{r}$ ინდექსს ჩამოვაშორებთ და ვიგულისხმებთ, რომ იგი აიღება ფარდობითი კოორდინატების მიხედვით. მაშასადამე, ფარდობითი მოძრაობის შესასწავლად უნდა ვისარგებლოთ განტოლებით

$$\left(i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}-W\right)\psi_0(\mathbf{r},\ t)\ =\ \hat{H}\psi_0(\mathbf{r},\ t), \tag{35,16}$$

სადაც

$$\hat{H}=-\,\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(\mathbf{r},t) \tag{35,17}$$

ფარდობითი მოძრაობის ჰამილტონიანია. ხელსაყრელია (35,16) განტოლებიდან გამოვრიცხოთ გადატანითი მოძრაობის ენერგია. ამისათვის შემოვიღოთ ახალი ტალღური ფუნქცია

$$\Psi_0(\mathbf{r},t)=\psi(\mathbf{r},\ t)\,e^{-\frac{iWt}{\hbar}}, \tag{35,18}$$

მაშინ შრედინგერის ფარდობითი მოძრაობის შესაბამისი განტოლება მიიღებს სახეს

$$i\hbar \frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t). \tag{35,19}$$

(35,9) ფორმულის თანახმად, სრული ტალღური ფუნქცია გამოხატული იქნება შემდეგნაირად:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{PR} - Wt)}. \tag{35,20}$$

სადაც $\psi(\mathbf{r}, t)$ წარმოადგენს ფარდობითი მოძრაობის შესაბამისი შრედინგერის (35,19) განტოლების ამონახსნს.

როცა ფარდობითი მოძრაობის ჰამილტონიანი დროზე ცხადად არ არის დამოკიდებული, მაშინ

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{35,21}$$

და (35, 19) განტოლება გადაიქცევა $\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$ განტოლებად, რომელსაც გაშლილად ექნება შემდეგი სახე:

$$\Delta\psi(\mathbf{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = 0, \tag{35,22}$$

ამ განტოლებაში E ფარდობითი მოძრაობის ენერგიაა. (35,22) ადრე განხილული შრედინგერის განტოლებისაგან ფორმალურად იმით განსხვავდება, რომ ნაწილაკის მასა შეცვლილია ორი ნაწილაკის დაყვანილი მასით.

ამგვარად, ორი ნაწილაკის სისტემის კვანტურ-მექანიკური მოძრაობა ორ ნაწილად გაიყო. ერთია ნაწილაკთა ურთიერთფარდობითი მოძრაობა, რომელიც აიწერება (35,19) ან, სტაციონარულ შემთხვევაში, (35,22) განტოლებით; ამ განტოლების ამოხსნა დამოკიდებულია ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგიის სახეზე და, მეორე, ინერციის ცენტრის თავისუფალი მოძრაობა, რომელსაც ყველა ამოცანაში ერთი და იგივე (35,13) ბრტყელი ტალღა შეესაბამება.

თუ გადავალთ ინერციის ცენტრის სისტემაზე, რომელშიაც სისტემის იმპულსი $\mathbf{P} = 0$, მაშინ ინერციის ცენტრის თავისუფალი მოძრაობა ამოვარდება და შესასწავლი დაგვრჩება მხოლოდ ნაწილაკთა ურთიერთფარდობითი მოძრაობა. ამგვარად, ორი ნაწილაკისაგან შედგენილი სისტემის მოძრაობის შესწავლა დაიყვანება ერთი ფიქტიური ნაწილაკის მოძრაობაზე, რომლის მასა დაყვანილი მასის ტოლია.

§ 36. შრედინგერის განტოლება ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრავი ნაწილაკისათვის

ვთქვათ, ნაწილაკს გააჩნია e მუხტი და იგი მოძრაობს ელექტრომაგნიტურ ველში, რომლის ვექტორპოტენციალია $\mathbf{A}$, სკალარპოტენციალი კი φ. ელექტრომაგნიტური ველის $\vec{\mathscr{E}}$ ელექტრული და $\vec{\mathscr{H}}$ მაგნიტური დაძაბულობები, როგორც ცნობილია, გამოისახება ფორმულებით:

$$\vec{\mathscr{E}} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \qquad \vec{\mathscr{H}} = \mathrm{rot}\mathbf{A}. \tag{36,1}$$

$\mathbf{A}$ და φ პოტენციალებს ფიზიკური შინაარსი არ გააჩნიათ, რამდენადაც ისინი ცალსახად არ არიან განსაზღვრული. ფიზიკური შინაარსი აქვთ ველის დაძაბულობებს $\vec{\mathscr{E}}$ და $\vec{\mathscr{H}}$, რომლებიც ცდაზე იზომებიან. (36,1) ფორმულების მიხედვით $\vec{\mathscr{E}}$ და $\vec{\mathscr{H}}$ ის ერთი და იგივე სიდიდეები შეგვიძლია მივიღოთ $\mathbf{A}$ და φ-ს სხვადასხვა მნიშვნელობებით.

ადვილად დავინახავთ, რომ (36,1) ფორმულებში, თუ ნაცვლად $\mathbf{A}$ და φ პოტენციალებისა განვიხილავთ გამოსახულებებს;

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f(\mathbf{r}, t), \tag{36,2}$$

$$\varphi' = \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t},$$

სადაც $f(\mathbf{r}, t)$ კოორდინატებისა და დროის ფუნქციაა, მაშინ $\vec{\mathscr{E}}$ და $\vec{\mathscr{H}}$-ის მნიშვნელობები უცვლელი დარჩება. (36,2) ფორმულებს გრადიენტულ გარდაქმნებს უწოდებენ. მაშასადამე, ველის თეორიაში ვექტორ და სკალარპოტენციალები განსაზღვრულია გრადიენტის სიზუსტით. თუ მოვითხოვთ, რომ ნებისმიერი $f(\mathbf{r}, t)$ ფუნქცია აკმაყოფილებს დალამბერის განტოლებას, მაშინ პოტენციალებს შეგვიძლია მოვთხოვოთ ე. წ. ლორენცის ყალიბრობის პირობა

$$\operatorname{div}\mathbf{A} + \frac{1}{c}\frac{\partial\varphi}{\partial t} = 0. \tag{36,3}$$

შემდგომში განსაკუთრებით მნიშვნელოვანი იქნება იმ შემთხვევის განხილვა, როცა მუხტი მოძრაობს სინათლის ელექტრომაგნიტურ ველში. ამ დროს ზოგადობის დაურღვევლად შეგვიძლია დავუშვათ, რომ $\varphi = 0$ და, მაშასადამე, (36,3) პირობის თანახმად, $\operatorname{div}\mathbf{A} = 0$. ვექტორპოტენციალი სინათლისათვის განისაზღვრება დალამბერის განტოლებიდან

$$\Delta\mathbf{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{A}}{\partial t^2} = 0. \tag{36,4}$$

ამ განტოლების ტიპიური ამონახსნი შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ ბრტყელი ტალღის სახით $\mathbf{k}$ ტალღური ვექტორით და ω სიხშირით:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_0\mathbf{v}\cos(\mathbf{kr} - \omega t) = \frac{1}{2}A_0\mathbf{v}e^{i(\mathbf{kr}-\omega t)} + \frac{1}{2}A_0\mathbf{v}e^{-i(\mathbf{kr}-\omega t)}, \tag{36,5}$$

სადაც $\mathbf{v}$ არის ელექტრული ველის დაძაბულობის ვექტორის ორტი, ე. ი. პოლარიზაციის მიმართულება; ამასთან, $k = \omega/c$.

ველის დაძაბულობებს ექნებათ სახე:

$$\vec{\mathscr{E}} = A_0\mathbf{v}\,k\sin(\mathbf{kr} - \omega t), \tag{36,6}$$

$$\vec{\mathscr{H}} = -[\mathbf{k}\times\mathbf{v}]A_0\sin(\mathbf{kr} - \omega t). \tag{36,7}$$

როგორც ცნობილია, ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრავი დადებითად დამუხტული ნაწილაკის იმპულსი და პოტენციალური ენერგია ველის კლასიკურ თეორიაში ასე იცვლება:

$$\mathbf{p} \to \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A},$$
$$V \to V + e\varphi. \tag{36,7}$$

მაშასადამე, კვანტურ მექანიკაში საჭიროა მოვახდინოთ შემდეგი შეცვლა:

$$\mathbf{p} \to \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} = -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}$$
$$V \to V + c\varphi. \tag{36,8}$$

რადგან პოტენციალები კოორდინატების ფუნქციებია, ამიტომ ისინი გამრავლების ოპერატორები იქნება. ამგვარად, კვანტურ მექანიკაში ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრავი დაუებითი მუხტის ჰამილტონიანს ექნება გამოხატულება

$$\hat{\mathbf{H}} = \frac{1}{2\mu}(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}, t) + e\varphi. \tag{36,9}$$

მოვძებნოთ ამ ოპერატორის ცხადი სახე. ამისათვის ვიპოვოთ შემდეგი ოპერატორი:

$$(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 = \sum_{\alpha=1}^{3} (\hat{\mathbf{p}}_\alpha - \frac{e}{c} A_\alpha)(\hat{\mathbf{p}}_\alpha - \frac{e}{c} A_\alpha) \tag{36,10}$$

ან, თუ გავხსნით ფრჩხილებს, მაშინ

$$(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 = \sum_{\alpha=1}^{3} [\hat{\mathbf{p}}_\alpha^2 + \frac{e^2}{c^2}A_\alpha^2 - \frac{e}{c}(\hat{\mathbf{p}}_\alpha A_\alpha + A_\alpha \hat{\mathbf{p}}_\alpha)] \tag{36,11}$$

ვიპოვოთ $\hat{\mathbf{p}}_\alpha A_\alpha + A_\alpha \hat{\mathbf{p}}_\alpha$ გამოსახულება. ამისათვის შევნიშნოთ, რომ (16,28) ფორმულის თანახმად გვექნება

$$\hat{\mathbf{p}}_\alpha A_\alpha - A_\alpha \hat{p}_\alpha = -i\hbar \frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\alpha} \tag{36,12}$$

თუ ორივე მხარეს დავუმატებთ $2A_\alpha \hat{p}_\alpha$ სიდიდეს, მივიღებთ

$$\hat{p}_\alpha A_\alpha + A_\alpha \hat{p}_\alpha = 2A_\alpha \hat{p}_\alpha - i\hbar \frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\alpha}. \tag{36,13}$$

და, მაშასადამე,

$$(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 = \sum_{\alpha=1}^{3} \hat{p}_\alpha^2 - \frac{2e}{c}\sum_{\alpha=1}^{3} A_\alpha \hat{p}_\alpha +$$
$$+ \frac{i\hbar e}{c}\sum_{\alpha=1}^{3} \frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\alpha} + \frac{e^2}{c^2}\sum_{\alpha=1}^{3} A_\alpha^2. \tag{36,14}$$

შევიტანოთ ეს გამოსახულება (36,9)-ში და გავითვალისწინოთ, რომ $\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2\nabla^2$ და $\sum_{\alpha=1}^{3} \frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\alpha} = \mathrm{div}\,\mathbf{A}$. მივიღებთ

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{e}{\mu c}(\mathbf{A}\,\hat{\mathbf{p}}) + \frac{ie\hbar}{2\mu c}\,\mathrm{div}\,\mathbf{A} + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2 + e\varphi + V(\mathbf{r}, t), \tag{36,15}$$

თუ ჰამილტონიანს ელექტრომაგნიტური ველის გარეშე ($A = \varphi = 0$) აღვნიშნავთ $\hat{H}_0$-ით, მაშინ ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრავი დამუხტული ნაწილაკის ჰამილტონიანი ასე დაიწერება:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e}{\mu c}(\mathbf{A}\,\hat{\mathbf{p}}) + \frac{ie\hbar}{2\mu c}\mathrm{div}\mathbf{A} + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2 + e\varphi. \tag{36,16}$$

შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობის განტოლებას $\hat{H}\psi = E\psi$ ელექტრომაგნიტური ველის შემთხვევაში ექნება სახე

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi + V(\mathbf{r})\psi - \frac{e}{\mu c}(\mathbf{A}\mathbf{p})\psi + \frac{i\hbar e}{2\mu c}(\operatorname{div}\mathbf{A})\psi + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2\psi + e\varphi\psi = E\psi. \qquad (36,17)$$

როცა პოტენციალები ისე შეგვიძლია შევარჩიოთ, რომ $\varphi = \operatorname{div}\mathbf{A} = 0$, მაშინ (36,16) გამოსახულება საგრძნობლად გამარტივდება. კერძოდ,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e}{\mu c}(\mathbf{A}\hat{p}) + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2. \qquad (36,18)$$

თუ გარდა ამისა ველი სუსტია, მაშინ $\mathbf{A}^2$-ის შემცველი წევრი, როგორც მეორე რიგის მცირე წევრი, შეგვიძლია უგულებელვყოთ, მაშინ ჰამილტონიანი მიიღებს გამოხატულებას

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e}{\mu c}(\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}). \qquad (36,19)$$

შესაბამისი შრედინგერის განტოლება ასე შეიძლება დავწეროთ:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi + \frac{ie\hbar}{\mu c}(\mathbf{A}\nabla)\psi + V(\mathbf{r})\psi = E\psi. \qquad (36,20)$$

კერძო შემთხვევაში, ელექტრონისათვის, რომელსაც აქვს უარყოფითი მუხტი, ზევით მიღებულ ფორმულებში საჭიროა მოვახდინოთ $e \to -e$ შეცვლა

შევნიშნოთ, რომ $\operatorname{div}\mathbf{A} = 0$-ის დროს (მაგალითად, ერთგვაროვანი მაგნიტური ველისათვის), (36,12) ტოლობის ძალით, $\mathbf{A}$ და $\mathbf{p}$ ერთმანეთთან კომუტატურია.

შ ე ნ ი შ ვ ნ ა: როცა გვაქვს შრედინგერის განტოლება ელექტრომაგნიტური ველის გარეშე $E\psi = \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V\right)\psi$, მაშინ ψ^* ფუნქციაც იგივე განტოლებას აკმაყოფილებს. მართლაც, რადგან E და $\hat{\mathbf{p}}^2$ ნამდვილი სიდიდეებია, $E\psi^* = \left(\frac{1}{2\mu}\hat{\mathbf{p}}^2 + V\right)\psi^*$. ელექტრომაგნიტურ ველში კი $+e$ მუხტის მქონე ნაწილაკი აკმაყოფილებს განტოლებას

$$E\psi = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi + V\psi + e\varphi\psi. \qquad (35,21)$$

თუ გადავალთ კომპლექსურად შეუღლებაზე, მაშინ ψ^* ფუნქცია დააკმაყოფილებს განტოლებას

$$E\psi^* = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi^* + V\psi^* + e\varphi\psi^*, \qquad (36,22)$$

ე. ი. იმ მდგომარეობაში, რომელიც ხასიათდება ψ^* ფუნქციით, ნაწილაკის იმპულსი ველში უდრის არა $\hat{\mathbf{p}}' = \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$, არამედ $\hat{\mathbf{p}}' = \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}$, სადაც $\hat{\mathbf{p}}$ ნაწილაკის იმპულსია თავისუფალ მდგომარეობაში·

მაშასადამე, მუხტის ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრაობისას საჭიროა მოვახდინოთ შემდეგი შეცვლა:

$$\hat{\mathbf{p}}\psi^* \rightarrow (\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A})\psi^*; \quad \hat{\mathbf{p}}\psi \rightarrow (\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})\psi. \tag{36,23}$$

ამ ფორმულების გამოყენებით ადვილად გამოვიყვანთ ალბათობის დენის ვექტორის ფორმულას. (5,8)-დან მარტივად მივიღებთ

$$J = \frac{i\hbar}{2\mu}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\Delta\psi) - \frac{e}{\mu c}\mathbf{A}\psi^*\psi. \tag{36,24}$$

მაშასადამე, ელექტრომაგნიტურ ველში დამატებით ჩნდება

$$-\frac{e}{\mu c}\mathbf{A}\psi^*\psi \tag{36,25}$$

სიდიდე. ცხადია, რომ ველში მოძრავი ნაწილაკის ალბათობის სიმკვრივე კვლავ $\psi^*\psi$ გამოსახულებით განისაზღვრება.