Өзбекстан Республикасы Жоқары ҳәм орта арнаўлы билим министрлиги

Бердақ атындағы Қарақалпақ мәмлекетлик университети

Физика-математика факультети

Улыўма физика кафедрасы

Б.А.Абдикамалов

КВАНТЛЫҚ МЕХАНИКА

Физика факультетиниң студентлери ушын лекциялар конспекти

Нөкис 2012

Мазмуны

I бөлим. Квантлық механика ҳәм оның илимдеги тутқан орны.
I бап. Квантлық механиканың тийкарғы орны.
1-1. Қысқаша кирисиў.
1-2. Ҳал.
1-3. Суперпозиция принципи.
1-4. Пси-функцияның физикалық мәниси.
1-5. Шредингер теңлемеси.
1-6. Итималлық ағысының тығызлығы.
II бап. Квантлық механиканың математикалық аппараты.
1-7. Тийкарғы постулатлар.
1-8. Сызықлы операторлар.
1-9. Операторларды матрицалық формада көрсетиў.
1-10. Операторлар алгебрасы.
1-11. Анықсызлық қатнаслары.
1-12. Үзликсиз спектр.
III бап. Физикалық шамалардың меншикли мәнислери ҳәм меншикли функциялары.
1-13. Физикалық шамалардың операторлары.
1-14. Физикалық шамалардың операторларының коммутациясының қағыйдалары.
1-15. Координата ҳәм импульс операторларының меншикли функциялары.
II бөлим. Квантлық физиканың тийкарлары.
2-1-1. Жыллылық нурланыўы нызамлары.
2-1-2. Нурланыўдың квантлық теориясы.
2-1-3. Фотон газы ҳәм оның қәсийетлери.
2-1-4. Квантлық оптика.
2-1-5. Жақтылықтың корпускулалық-толқынлық дуализми.
2-2-1. Де Бройль гипотезасы.
2-2-2. Де Бройль гипотезасын экспериментте тастыйықлаў.
2-2-3. Анықсызлық қатнаслары.
2-2-4. Микробөлекшелерди затлардың структурасын изертлеў ушын қолланыў.
2-3-1. Толқын функциясы.
2-3-2. Шредингер теңлемеси.
2-3-3. Итималлықлар ағысының тығызлығы векторы.
2-3-4. Физикалық шамаларды операторлардың жәрдеминде бериў.
2-3-5. Операторлардың меншикли функциялары ҳәм меншикли мәнислери.
2-3-6. Квантлық механикадағы өлшеўлер проблемасы.
2-3-7. Ҳәр қыйлы физикалық шамаларды бир ўақытта өлшеў.
2-3-8. Квантлық механиканың матрицалық формасы.
2-4-1. Стационар ҳаллар ушын Шредингер теңлемеси.
2-4-2. Өткермейтуғын дийўалларға ийе потенциал шуқырдағы бөлекше.
2-4-3. Потенциал табалдырық ҳәм дийўал областындағы бөлекшениң қозғалысы.
2-4-4. Шекли тереңликке ийе потенциал шуқырдағы бөлекше.
2-4-5. Квантлық гармоникалық осциллятор.
2-5-1. Атомлардың квантлық қәсийетлери.
2-5-2. Водород атомының Бор теориясы.
2-5-3. Водород тәризли атомлардың квантлық механикандағы

тәрийиплениўи.
2-5-4. Квантлық санлар ҳәм олардың физикалық мәниси.
2-5-5. Штерн ҳәм Герлах тәжирийбеси. Электронның спини ҳаққындағы гипотеза.
2-6-1. Шредингер теңлемесин жуўық түрде шешиў усыллары.
III бөлим. Паули теориясы.
3-1. Электронның қозғалыс муғдарының моменти (импульс моменти).
3-2. Сфералық координаталардағы қозғалыс муғдарының толық муғдарының операторлары.
3-3. Спинге ийе шар функциялары.
3-4. Спинге ийе шар функцияларының базы бир қәсийетлери.
3-5. Паулидиң толқын теңлемеси.
IV бөлим. Квантлық механиканың көп электронлық мәселеси ҳәм атомның қурылысы.
4-1. Толқын функциясының симметриялық қәсийетлери.
4-2. Энергия операторы ҳәм оның симметриясы.
4-3. Келисилген майдан усылы.
V бөлим. Дирак теориясы.
5-1. Квантлық механика ҳәм салыстырмалық теориясы.
5-2. Классикалық қозғалыс теңлемеси.
5-3. Толқын теңлемесин келтирип шығарыў.
5-4. Дирак матрицалары.
5-5. Еркин электрон ушын Дирак теңлемеси.
5-6. Лоренц түрлендириўлери.
5-7. S матрицасының көшерлерди кеңисликлик бурыўға ҳәм Лоренц түрлендириўлери ушын түри.
5-8. Тоқ векторы.
5-9. Майдан бар жағдайдағы Дирак теңлемеси. Қозғалыс теңлемелери.
5-10. Дирак теориясындағы қозғалыс муғдары моменти ҳәм спин векторы.
5-11. Электронның кинетикалық энергиясы.
VI бөлим. Релятивистлик квантлық механика.
6-1. Скаляр релятивистлик Клейн-Гордон теңлемеси.
6-2. Дирак теңлемеси.
6-3. Дирак электронының орайлық күшлер майданындағы қозғалысы.
6-4. Дирак теңлемесиниң толық шешими.
Мәселелер ҳәм олардың шешимлери.

I бөлим

Квантлық механика ҳәм оның илимдеги тутқан орны

I бап. Квантлық механиканың тийкарғы орны

1-1. Қысқаша кирисиў

Микродүньяда табылған нызамлар макроскопиялық объектлер бағынатуғын нызамлардан, яғный классикалық физиканың нызамларынан түпкиликли түрде айрылады. Биз сезиў органларымыз жәрдеминде тек макроскопиялық объектлерди бақлай аламыз. Сонлықтан биз усындай денелердиң көргизбели образын өзимиздиң санамызда сәўлелендире аламыз. Бул образларды микрообъектлерге алып келиў (мысалы электронды микроскопиялық шарик түринде көз алдымызға келтириў) пүткиллей дурыс емес ҳәм ҳәтте зыянлы. Сонлықтан микродүньяның механикасын (квантлық механиканы) үйрениўге кирискенде үйренилетуғын объектлер менен процесслердиң көргизбели образларын дөретиўге тырысыўлардан дәрҳәл бас тартыў керек болады.

«Түсиниў» сөзи күнделикли турмыста өзиңде объекттиң ямаса процесстиң көргизбели образын дөретиў дегенди аңлатады. Бирақ квантлық механика тап сондай етип «түсиниўге» болмайды. Усы жағдайға байланыслы квантлық теорияның дөретиўшилердиң бири Дирак былай деп жазды: «... физика илиминиң бас мәселеси бизди көргизбели картиналар менен тәмийинлеў емес, ал қубылысларды басқаратуғын нызамларды ашыў ҳәм бул нызамларды жаңа нызамларды ашыў ушын қолланыў болып табылады... Атомлық қубылыслар жағдайында әдеттеги мәнисте көргизбели картина бар деп күтиўге болмайды. Бул жерде «көргизбели» деп айтқанда тийкарынан классикалық принциплерде ҳәрекет ететуғын модель түсиниледи. Бирақ «картина» сөзиниң мәнисин кеңейтиўге болады. Буның ушын бул сөзге өз-ара келисиўшилик айқын көринип туратуғындай етип тийкарғы нызамларды қараўдың қәлеген усылын киргизиў керек. Бундай кең мәнисте атомлық қубылыслардың картинасы квантлық теорияның нызамларын үйрениўдиң барысында кем-кемнен ашыла береди[1]».

Квантлық механикаға ҳәр қыйлы математикалық формаларды бериў мүмкин. Туўылыўдан бул илим бир биринен ғәрезсиз Шредингердиң толқын механикасы ҳәм Гейзенбергтиң матрицалық механикасы түринде пайда болды. Кейинирек Дирак квантлық механиканың «векторлық» формасын ислеп шықты. Квантлық механиканың барлық формалары бир бирине эквивалент, олар бирдей физикалық нәтийжелерге алып келеди ҳәм бир бирине түрлендирилиўи мүмкин.

Квантлық механиканың математикалық аппараты өзине тән ҳәм улыўма айтқанда әпиўайы емес. Бул жағдайлар, атап айтқанда көргизбели түрде көз алдыға келтириўдиң мүмкиншилигиниң жоқлығы ҳәм математикалық аппаратының қурамалы екенлиги квантлық механиканы қыйын илимлердиң қатарына қосады.

[1] П.А.М.Дирак. Принципы квантовой механики. Физматгиз. 1960. стр. 26.

1-2. Ҳал

Ҳал түсиниги квантлық механикандағы ең тийкарғы ҳәм басланғыш түсиниклердиң бири болып табылады. Сонлықтан «ҳал» түсинигине қатаң түрдеги дәл анықлама бериў қыйын. Дирак «ҳал» түсинигин былайынша киргизеди: «...Қәсийетлери бизлерге белгили болған бөлекшелерден ямаса денелерден туратуғын базы бир атомлық системаны қараймыз (масса, инерция моменти ҳәм тағы басқалар). Бул бөлекшелер арасындағы тәсир етисиў күшлери де белгили болсын. Бул күшлердиң тәсир етиў нызамларына сәйкес ҳәр қыйлы қозғалыслардың жүзеге келиўи мүмкин. Бундай қозғалыслардың ҳәр бири системаның ҳалы деп аталады».

Ҳал ушын Дирак берген анықламаны басланғыш анықлама сыпатында қабыл етемиз. «Ҳал» термининиң мазмуны квантлық механиканың мазмунын баянлаўдың барысында толығы менен ашылады.

Микросистеманың ҳалы ҳаққындағы информацияларды өлшеўлер өткериўдиң нәтийжесинде алады. Бундай жағдайда микросистемаға макроскопиялық система болған әсбап пенен тәсир етеди. Сонлықтан микросистемалар үстинде исленген өлшеў нәтийжелер мәжбүрий түрде макроскопиялық денелер ушын ислеп шығылған терминлерде аңлатылады (координата, импульс, импульс моменти, энергия ҳәм тағы басқалар). Бул характеристикалар динамикалық өзгериўшилер деп аталады.

Микробөлекшелердиң қәсийетлери макроскопиялық денелердиң қәсийетлеринен түп-тамырынан айрылады. Сонлықтан микробөлекшелер ушын макроденелер ушын жазылатуғын динамикалық өзгериўшилерди жазыўға болмайды. Бирақ әсбап пенен (ямаса тәбийий дене менен) тәсир етисиўдиң барысында микробөлекше жоқарыда айтылып өтилген динамикалық өзгериўшилердиң айырымлары менен характерленетуғындай қәсийет көрсетеди. Микробөлекшелердиң қәсийетлериниң өзлерине тән екенлигин сол жағдай көрсетеди, өлшеўлердиң барысында барлық өзгериўшилердиң ҳәммеси ушын анық мәнислер алынбайды. Мысал электронның сондай ҳаллары болады, бундай ҳалларда турған электрон макроденелер менен тәсирлесиўдиң барысында (өлшеўлердиң барысында) p_x импульсине ийе екенлигин көрсетеди. Соның менен бирге экспериментлер неше рет қайталанса да усындай ҳалда турған электрон ушын бирдей p_x шамалары алынады. Бирақ егер биз сол ҳалда турған электронның координаталарын анықлағымыз келсе, онда өлшенип атырған координата ушын бирдей итималлық пенен $-\infty$ тен $+\infty$ ке шекемги мәнислер алынады. Электронның бундай ҳалы ҳаққында айтқанда электронның анық p_x динамикалық өзгериўшиге ийе болатуғын ҳалы ҳаққында гәп етиледи.

Өлшеўлердиң барысында (яғный макроденелер менен тәсирлескенде) электрон x координатасының анық мәниске ийе болатуғын ҳаллардың бар болыўының мүмкин екенлиги табылады. Бундай ҳалларда p_x импульсиниң мәниси пүткиллей анық емес болып шығады. Бул жағдайда электрон ушын координатаның анық x мәниси болатуғын ҳал бар деп айтады.

Жоқарыда айтылғанлар менен бир қатарда координата x та, импульс p_x та бир ўақытта анық мәнислерге ийе болмайтуғын ҳаллар да бар екенлигин атап өтемиз. Бундай жағдайда электронның үстинен жүргизилген көп санлы өлшеўлердиң барысында x ушын базы бир Δx интервалының ишиндеги, ал импульс p_x ушын да базы бир Δp_x интервалының ишиндеги мәнислер алынады. Усы Δx ҳәм Δp_x шамалары бир бири менен Гейзенберг анықсызлық қатнаслары арқалы байланысқан:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2. \tag{1.2.1}$$

Анықсызлық қатнаслары классикалық механиканың түсиниклерин микробөлекшелер ушын қандай дәрежеде пайдаланыўға болатуғынлығын, мысал ретинде микробөлекшелердиң траекториялары ҳаққында қандай дәрежедеги дәлликте айтыўға болатуғынлығын көрсетеди. Траектория бойынша қозғалыс ҳәр бир ўақыт моментинде координаталар менен тезликтиң анық мәнислери менен характерленеди. (1.2.1)-аңлатпаны

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \hbar/2m$$

түринде көширип жазсақ бөлекшениң массасы қанша көп болса, оның координаталары менен тезликлериндеги анықсызлықтың соншама киши болатуғынлығын, бөлекшениң траекториясы түсинигиниң жоқары дәлликте қолланыўға болатуғынлығын көрсетеди. Ҳәтте егер өлшеми 1 мкм болған микробөлекшени алсақ, онда оның массасы атомның массасынан шама менен 10^{12} есе үлкен болады. Бундай бөлекше ушын x пенен v_x шамаларындағы анықсызлықтың мәниси бул шамаларды өлшеўдиң дәллиги шеклеринде болады. Сонлықтан оның қозғалысын траектория бойынша қозғалыстан айырыўға болмайды.

Солай етип бөлекшениң массасы қаншама үлкен болса, онда оның қозғалысы ушын классикалық механиканың нызамлары менен түсиниклерин соншама үлкен дәлликте қолланыўға болады екен. Бул тастыйықлаў сәйкеслик принципи деп аталатуғын улыўмалық тастыйықлаўдың дара жағдайы болып табылады. Бул принцип бойынша $\hbar \to 0$ шеклеринде квантлық механиканың нызамлары қатнаслары классикалық механиканың сәйкес нызамлары менен қатнасларына өтеди. Бул жағдай бойынша Планк турақлысына пропорционал болған эффектлердиң тутқан орны қаншама киши болса, қарап атырылған системаның қәсийетлериниң классикалық қәсийетлерге соншама жақын болатуғынлығын көрсетеди.

Квантлық ҳәм классикалық нызамлар арасындағы көпирдиң орнын ийелеў менен бир қатарда сәйкеслик принципи классикалық шамалардың квантлық механикалық аналогларын табыўға мүмкиншилик береди.

Биз қарап атырған микросистема жайласқан ҳалдың характеристикасы ушын бул ҳалда анық мәнислерге ийе болатуғын динамикалық өзгериўшилерди сайлап алыў тәбийий. Берилген ҳалда анық мәнислерге ийе болатуғын динамикалық өзгериўшилердиң жыйнағы толық жыйнақ (орыс тилинде «полный набор» деп айтылады) деп аталады. Ҳәр қыйлы ҳаллар ушын толық жыйнақлар ҳәр қыйлы болады. Дара жағдайда толық жыйнақ тек бир динамикалық өзгериўшиден тура алады. Бундай ҳалда толық жыйнақты пайда етиўши динамикалық өзгериўшилердиң биреўинен басқасының барлығы да анық емес болып шығады.

Динамикалық өзгериўшилер ҳаққында улыўма айтқанда (яғный конкрет түрде емес ҳәм x, p_x, E ҳәм басқалардың айқын түрде қайсысы екенлиги айтылмаған жағдайларда) биз оларды әдетте Q, айырым жағдайларда R, A, B ҳәм басқа да ҳәриплердиң жәрдеминде белгилеймиз.

Берилген динамикалық өзгериўши қабыл ете алатуғын санлық мәнислердиң жыйнағын оның спектри деп атаймыз. Егер динамикалық өзгериўшиниң мәниси үзликсиз избе-изликти пайда ететуғын болса, онда бул шама мәнислердиң үзликсиз (ямаса тутас) спектрине ийе деп айтады. Егер руқсат етилген санлы мәнислер дискрет избе-изликти пайда ететуғын болса, онда бундай шама мәнислердиң дискрет спектрине ийе болады деп есаплаймыз. Улыўма жағдайда динамикалық өзгериўшиниң мәнислериниң спектри өз ишине үзликсиз де, дискрет те участкаларды ала алады.

Q өзгериўшисиниң ҳәр қыйлы мәнислерин биз q символы арқалы белгилеймиз. Егер берилген мәнис дискрет спектрге тийисли болса, онда биз мәнистиң номерин аңлататуғын төменге индекс қоямыз, яғный q_n түринде жазамыз. Индекстиң жоқлығы q шамасының берилген мәнисиниң үзликсиз спектрге тийисли екенлигин аңғартады.

Микродүньяның нызамларының макроскопиялық денелерди изертлегенде бақланатуғын нызамлықлардан түп-тамырынан айрылатуғынлығы жоқарыда атап өтилди. Бул айырма мынадай жағдайда анық көринеди: квантлық механикада ҳаллар ҳәм динамикалық өзгериўшилерди тәрийиплеў ушын классикалық физикада пайдаланылатуғын математикалық шамалардан басқа тәбиятқа ийе математикалық шамалар қолланылады. Ҳәр бир динамикалық өзгериўши ушын базы бир сызықлы оператор жазылады. Системаның ҳалы улыўма айтқанда базы бир ψ комплексли өзгериўши менен тәрийипленеди. Бул комплексли өзгериўшини толқын функциясы ямаса пси-функция ямаса итималлықлар амплитудасы деп атайды. Биз көбинесе пси-функция термининен пайдаланамыз. Ҳалдың характеристикасы ушын Дирак айрықша түрдеги комплексли векторды усынды. Оны ҳал векторы деп атайды.

Ҳеш бир пси-функцияны сәйкеслендириўге болмайтуғын ҳаллардың да болатуғынлығын аңғарамыз. Бундай ҳалларды аралас ҳаллар, ал пси-функциялар менен тәрийипленетуғын ҳалларды таза ҳаллар деп атаймыз. Биз тек таза ҳалларды қараймыз. Сонлықтан «таза» сөзин биз айтпаймыз ҳәм ҳалдың ҳаллары ҳаққында гәп етемиз.

1-3. **Суперпозиция принципи**

Суперпозиция принципи квантлық механиканың тийкарғы принципи болып табылады. Бул принциптиң мәниси төмендегилерден ибарат: Мейли базы бир система базы бир Q шамасы q_1 мәнисине ийе болатуғын ψ_1 ҳалында ямаса сол Q шамасы q_2 мәниске ийе болатуғын ψ_2 ҳалында да тура алатуғын болсын. Бундай жағдайда $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ (c_1 менен c_2 арқалы ықтыярлы комплексли санлар белгиленген) ҳалы да бар болып, бул ҳалда Q шамасын өлшенгенде q_1 ямаса q_2 мәниси алынады.

Суперпозиция принципинен Q шамасы анық мәнислерге ийе болатуғын ψ_1 ҳәм ψ_2 ҳалларын қосқанда сол Q шамасы пүткиллей анық емес болып қалатуғын жаңа ψ ҳалының пайда болатуғынлығы келип шығады.

Тап усындай нәтийже еки ҳалдан көп ҳалларды қосқанда да орын алады. Егер Q шамасы анық мәнислерге ийе болатуғын $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ ҳаллары бар болатуғын болса, онда

$$\psi = \sum_{m=1}^{n} c_m\psi_m \qquad (1.3.1)$$

толқын функциясы (пси-функция, c_n арқалы ықтыярлы комплексли сан белгиленген) менен тәрийипленетуғын да ҳал болып, бул ҳалда Q шамасы $q_1, q_2, \dots, q_n$ мәнислериниң бирине тең болады.

Мынадай кери тастыйықлаў да дурыс: Квантлық системаны қәлеген ψ ҳалы жоқарыда айтылған $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ ҳалларының қосындысы (суперпозициясы) деп көрсетилиўи мүмкин. Бул тастыйықлаў да суперпозиция принципиниң формулировкасы болып хызмет ете алады.

(1.3.1)-теңлеме менен тәрийипленетуғын системаның қәсийетлери векторлардың қәсийетлерине уқсас. Ҳақыйқатында да бирдей тәбиятқа ийе $a_1, a_2, \dots,$

a_n векторларын ҳақыйқый c_1, c_2, … , c_n санларына көбейтсек ҳәм буннан кейин оларды қоссақ сондай тәбиятқа ийе $a = \sum c_m a_m$ жаңа векторын аламыз. Бундай аналогия тийкарында Дирак системаның ҳаллары ушын жазылатуғын шамаларды бир бири менен салыстырыў ушын айрықша кеңисликтеги векторлар түринде қараўды усынды.

Базы бир ψ_m ҳалын өзиниң үстине өзин қойсақ, яғный $\psi_1 = \psi_2 = \psi_m$ деп болжасақ, онда (1.3.1)-аңлатпаға сәйкес

$$\psi = c_1\psi_m + c_2\psi_m = (c_1 + c_2)\psi_m = c\psi_m$$

функциясы менен тәрийипленетуғын ҳалды аламыз. Бул ҳал да дәслепки ψ_m ҳалындай ҳал болады. Бундай ҳалда Q шамасын өлшегенимизде q_m нәтийжесин аламыз. Алынған ҳалдың дәслепки ҳалдан айырмасы жоқ деп болжаў тәбийий. Тек ғана $c = c_1 + c_2 = 0$ болған жағдай бул анықламаға кирмейди. Бул жағдайда q_m шамасын с ға көбейткен менен ҳеш қандай ҳал алынбайды ($\psi = 0$ ҳеш қандай ҳалдың жоқ екенлигин билдиреди).

Жоқарыда айтылғанларға сәйкес ψ ҳәм $c\psi$ (с арқалы ықтыярлы нолге тең емес комплексли сан белгиленген) функциялары менен тәрийипленетуғын ҳалларды бир бири менен бирдей деп қабыл етемиз. Егер ҳалларды векторлардың жәрдеминде тәрийиплейтуғын болсақ, онда соңғы тастыйықлаўдан ҳалдың вектордың бағыты менен ғана тәрийипленетуғынлығын, ал вектордың узынлығының ҳеш қандай әҳмийетиниң жоқ екенлигин көремиз.

Суперпозиция принципиниң классикалық физикада да бар екенлигин атап өтемиз. Тардың ықтыярлы тербелисин жийилиги тийкарғы жийиликтен пүтин сан есе өзгешеликке ийе гармоникалық тербелислердиң қосындысы (суперпозициясы) деп қараўға болады. Бул аналогия дәслепки ўақытлары квантлық механикаға толқын механикасы, ал квантмеханикалық системаның ҳалы ушын жазылатуғын ψ функциясына толқын функциясы деп атама бериў ушын себеп болды. Бирақ жоқарыда атап өтилген аналогияның алысқа бармайтуғынлығы атап өтиў керек. Квантлық механикадағы суперпозиция менен классикалық суперпозиция арасында оғада тереӊ айырма бар. Мысалы тербелиўши тардың ҳалларының суперпозициясы тербелистиң басқа амплитудаға ийе ҳалына алып келеди. Демек нәтийжеде жүзеге келген тербелис дәслепки тербелистен айырмаға ийе болады. Квантлық механикада болса ҳаллардың суперпозициясы жаңа ҳалдың пайда болыўына алып келмейди. Квантлық ҳалда классикалық тербелислердиң амплитудасына сәйкес келетуғын характеристика пүткиллей жоқ.

§ 4. Пси-функцияның физикалық мәниси

Координаталық көрсетиў деп аталатуғын көрсетиўде пси-функция бөлекшелер системасын пайда етиўши бөлекшелердиң координаталарының ҳәм ўақыттың функциясы болып табылады Бир бөлекшеден туратуғын системаны қараймыз. Бул жағдайда $\psi = \psi(x, y, z, t)$. Пси-функцияның модулиниң квадраты $|\psi|^2 = \psi^*\psi$ (ψ^* арқалы ψ ге комплексли түйинлес функция аңлатылған) кеңисликтиң ҳәр қыйлы ноқатларында бөлекшени табыўдың итималлығына тең. Егер $|\psi(x, y, z, t)|^2$ шамасын x, y, z ноқатында алынған көлем элементи $dV = dxdydz$ шамасына көбейтсек, онда бөлекшениң t ўақыт моментинде dV көлеминде табыўдың итималлығы dP шамасын аламыз:

$$dP = |\psi|^2 dV = \psi^*\psi dV. \qquad (1.4.1)$$

Тап сол сыяқлы еки бөлекшеден туратуғын система ушын жазылған

$$dP = |\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, t)|^2 dV_1 dV_2$$

шамасы система үстинде t ўақыт моментинде жүргизилген өлшеўлерде 1-бөлекшениң dV_1 көлеминде, 2-бөлекшениң dV_2 көлеминде табылыўының итималлығына тең болады. Бул формулада x_1, y_1, z_1 арқалы биринши бөлекшениң координаталар, ал x_2, y_2, z_2 арқалы 2-бөлекшениң координаталары белгиленген.

Бөлекшениң қандай да бир орында жайласқаны анық, яғный сондай орында жайласқанлығының итималлығы 1 ге тең болғанлықтан (1.4.1) итималлықларының барлық кеңислик бойынша қосындысы 1 ге тең болыўы керек. Солай етип бизлер пси-функциясының нормировка шәртине келемиз

$$\int |\psi|^2 dV = 1. \tag{1.4.2}$$

Алдыңғы параграфта биз пси-функцияны нолге тең емес ықтыярлы комплексли санға көбейтиўдиң мүмкин екенлигин айтқан едик. Демек интеграл шекли мәниске ийе болса (1.4.2) шәртиниң орынланыўы керек. Бул шәртти қанаатландыратуғын пси-функцияны нормировкаланған пси-функция деп атаймыз. Демек нормировкаланған пси-функция фазалық көбейтиўши деп аталатуғын $e^{i\alpha}$ көбейтиўшиси дәллигине шекем дәлликте анықланған екен (α арқалы ықтыярлы ҳақыйқый сан белгиленген).

Базы бир жағдайларда (1.4.2)-интеграл тарқалыўшы интеграл (яғный шексизликке айланады) болады ҳәм сонлықтан (1.4.2)-шәртке сәйкес пси-функцияны нормировкалаўдың мүмкиншилиги болмайды. Бундай жағдайда $|\psi|^2$ шамасын итималлықтың тығызлығы деп айта алмаймыз. Бирақ бул жағдайда да $|\psi|^2$ шамаларының мәнислериниң кеңисликтиң ҳәр қыйлы ноқатларындағы қатнаслары координаталардың сәйкес мәнислериниң салыстырмалы итималлығын анықлайды.

Бөлекшениң ҳәр қыйлы орынларда турыўының итималлықларын билиў арқалы оның координаталарының орташа мәнислерин есаплаўға болады. Мысалы, бөлекшениң радиус-векторы болған $\langle \boldsymbol{r} \rangle$ шамасының орташа мәниси

$$\langle \boldsymbol{r} \rangle = \int \boldsymbol{r}\, dP = \int \boldsymbol{r}\, |\psi|^2\, dV = \int \psi^* \boldsymbol{r}\, \psi\, dV$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады[2] (формулаға симметриялық түр бериў ушын биз r шамасын $\psi^*\, \psi$ көбеймесиниң ишине алып жаздық). Бул векторлық көбейме үш скаляр көбеймеге эквивалентли:

$$\langle x \rangle = \int \psi^* x\, \psi\, dV,\ \langle y \rangle = \int \psi^* y\, \psi\, dV,\ \langle z \rangle = \int \psi^* z\, \psi\, dV. \tag{1.4.3}$$

Тап сондай жоллар менен координаталардың қәлеген функциясының орташа мәнисин табыў мүмкин. Мысалы бөлекшениң потенциал энергиясының орташа мәниси

[2] Орташа мәнисти белгилеў ушын шаманың символының үстине «-» белгиси қойылады (мысалы $\bar{r}$) ямаса $\langle r \rangle$ түриндеги сынық қаўсырмаға алады. Соңғы усыл көбирек пайдаланылып атыр.

$$\langle \mathrm{U} \rangle = \int \psi^* U(x, y, z) \psi \, dV. \tag{1.4.4}$$

Соңғы аңлатпаның мәниси мынадай: Мейли бөлекшениң потенциал энергиясының шамасын өлшеў көп рет қайталанатуғын ҳәм усы өлшеўлердиң барлығында да бөлекше бир ψ ҳалында турған болсын. Бундай жағдайда өлшеўлердиң санының артыўының барысында алынған нәтийжелердиң орташа мәниси (1.4.4) шамасына умтылады.

Солай етип бөлекшениң пси-функциясын биле отырып өлшеўлердиң барысында координаталардың қәлеген функциясының ҳәр қыйлы мәнислериниң алыныў итималлығын ҳәм бул өлшеўлерде алынатуғын орташа мәнисти есаплаўды үйрендик. Бирақ бөлекшелердиң координаталарының функциялары болмаған физикалық шамалардың (мысалы импульсти, импульс моментин, энергияны) қалай анықлаўдың кереклиги ҳәзирше белгисиз болып қалмақта. Ҳәр қыйлы күш майданда жайласқан бөлекшениң пси-функциясы ҳаққындағы мәселе де еле анықланған жоқ. Усындай мәселелерди қараў менен шуғылланыўды енди баслаймыз.

1-5. **Шредингер теңлемеси**

$U = U(x, y, z, t)$ потенциалы менен тәрийипленетуғын күш майданында жайласқан бөлекшениң пси-функциясын Шредингер тәрепинен ашылған дара туўындылы дифференциал теңлемени шешиў менен табыўға болады

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + U\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

Бул теңлемени жыйнақлы түрде былайынша жазамыз

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}. \tag{1.5.1}$$

Бул теңлемеде $\nabla^2 = \Delta$ арқалы Лаплас операторы, m арқалы бөлекшениң массасы, ал ħ арқалы 2π шамасына бөлинген Планк турақлысы белгиленген.

Бул теңлемениң ашылыўына қандай көз-қараслардың алып келгенлиги ҳаққындағы мәселеге итибар бермей, (1.5.1)-теңлемени ең тийкарғы басланғыш аңлатпа, теңлемени шешиўдиң барысында алынған нәтийжелердиң экспериментлердиң нәтийжелери менен сәйкес келиўиниң себебинен теңлемениң дурыслығына гүмәнның ҳеш қандай жоқ екенлигин атап өтемиз[3].

Потенциал U өз ишине ўақыт t ны анық алмайтуғын жағдай айрықша қызықтырады. Бундай жағдайда U потенциал майдан мәнисине ийе. Бундай шәрт орын алғанда (1.5.1)-теңлемениң шешими әпиўайыласады. Себеби бул жағдайда пси-функция еки көбейтиўшиге ажыралады[4]. Олардың бири тек бөлекшелердиң координаталарынан ғәрезли, ал екиншиси тек ўақыттан ғәрезли болады. Бул тастыйықлаўды тексерип көриў ушын пси-функцияны

---

[3] Бундай көз-қараслар ҳаққында улыўма физика бойынша көп қолланбаларда оқыўға болады. Мысалы И.В.Савельев. Курс общей физики. Т. III. § 65. «Наука». 1973.

[4] Гәп дара шешимлер ҳаққында болып атыр. $\sum c_n\varphi_n(x, y, z) \cdot f_n(t)$ улыўма шешиминиң биреўи тек координаталардан, екиншиси тек ўақыттан ғәрезли болған еки көбейтиўши түринде берилиўи мүмкин емес.

$$\psi(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z) \cdot f(t)$$

түринде жазамыз ҳәм бул аңлатпаны (1.5.1)-теңлемеге қоямыз. ∇^2 операторының тек φ көбейтиўшисине тәсир ететуғынлығын, ал $\partial f/\partial t = df/dt$ екенлигин есапқа алып

$$-\frac{\hbar^2}{2m} f\nabla^2\varphi + U\varphi f = i\hbar\varphi\frac{df}{dt}$$

аңлатпасын аламыз. Бул теңлемениң еки тәрепин де φf ке бөлсек

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi + U\varphi}{\varphi} = \frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt}$$

аңлатпасына келемиз. Бул теңлемениң шеп тәрепи тек бөлекшениң координаталарына, ал оң тәрепи тек ўақытқа ийе. Ҳәр қыйлы болған ғәрезсиз өзгериўшилердиң еки функциясы усы функциялар тек турақлы мәниске ийе болған жағдайда ғана өз-ара тең болады. Бул турақлы шаманы E арқалы белгилеймиз. Бундай жағдайда биз еки дифференциал теңлемеге келемиз

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi + U\varphi = E\varphi, \tag{1.5.3}$$

$$\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt} = E. \tag{1.5.4}$$

Екинши теңлемени былайынша жаза аламыз:

$$\frac{df}{dt} + \frac{i}{\hbar}Ef = 0.$$

Биз турақлы коэффициентлерге ийе сызықлы бир текли теңлемеге келдик. Бул теңлемени $f = e^{\lambda t}$ аңлатпасын қойыў жолы менен шешсек

$$f = e^{-\left(\frac{i}{\hbar}\right)Et} \tag{1.5.5}$$

түриндеги функцияны аламыз (улыўмалық шешимде биз C көбейтиўшисин жазбадық, себеби пси-функция усындай көбейтиўши дәллигинде анықланған).

Енди (1.5.3)-теңлемеге итибар беремиз. Бул теңлемеден E арқалы белгиленген турақлы шаманың мәнисин анықлаў мүмкин. (1.5.3)-теңлемениң барлық ағзаларының бирдей бирликке ийе болыўы талабынан E шамасының да U шамасының бирлигиндей бирликке, яғный энергияның бирлигине ийе болатуғынлығы келип шығады. Потенциал күш майданындағы қозғалыста системаның тек толық энергиясы ғана турақлы болып қалады. Сонлықтан E шамасын бөлекшениң толық энергиясына теңлестиремиз.

Солай етип бөлекше потенциаллық күш майданында қозғалғанда пси-функция мына түрге ийе болады екен

$$\psi(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z) \cdot e^{-\left(\frac{i}{\hbar}\right)Et}. \tag{1.5.6}$$

Бул аңлатпада E арқалы бөлекшениң толық энергиясы белгиленген. Буннан кеңисликтиң ҳәр қыйлы ноқатларында бөлекшени табыўдың итималлығының тығызлығы $|\psi|^2 = |\varphi|^2$ шамасына тең ҳәм ўақыттан ғәрезсиз екен. Сонлықтан (1.5.6) түрдеги пси-функциялар менен тәрийипленетуғын ҳаллар стационар ҳаллар деп аталады.Стационар ҳаллар ушын пси-функцияларды табыў мәселеси φ(x,y,z) функциялары табыў мәселесине алып келинеди. Усы жағдайға байланыслы бул функцияны стационар ҳалдың пси-функциясы деп атайды ҳәм ψ ҳәрипиниң жәрдеминде белгилейди. (1.5.3)-теңлемедеги φ ҳәрипин ψ ҳәрипи менен алмастырып стационар ҳаллар ушын Шредингер теңлемеси деп аталатуғын теңлемеге келемиз:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U\psi = E\psi. \qquad (1.5.7)$$

Бул теңлемени

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 \qquad (1.5.8)$$

түринде жийи жазады. (1.5.8)-теңлемеде $U = 0$ деп есаплап еркин бөлекше ушын Шредингер теңлемесин аламыз:

$$\nabla^2\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0. \qquad (1.5.9)$$

Бул теңлемени

$$\psi = e^{\pm i\mathbf{kr}} \qquad (1.5.10)$$

функциясының қанаатландыратуғынлығын аңсат тексерип көриўге болады. Бул аңлатпада

$$\mathbf{k}^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\mathbf{p}^2}{\hbar^2} \qquad (1.5.11)$$

ҳәм **p** арқалы бөлекшениң классикалық импульси белгиленген.

(1.5.10)-аңлатпадағы **k** ны $p/\hbar$ пенен алмастырып ҳәм алынған аңлатпаны (1.5.6) ға қойсақ еркин бөлекшениң пси-функциясын аламыз

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\left(\frac{i}{\hbar}\right)(Et \pm \mathbf{pr})}. \qquad (1.5.12)$$

Тап усындай функция (дурысырағы оның ҳақыйқый бөлими) жийилиги ω = E/ħ ҳәм толқын векторы $k = p/\hbar$ болған тегис толқынды тәрийиплейди. Бул сәйкеслик микробөлекшелердиң корпускулалық-толқынлық тәбиятының сәўлеси болып табылады. Бундай корпускулалық-толқынлық тәбияттың дифракция бойынша экспериментлерде көринетуғынлығы белгили. Мысалы кристал арқалы өткен электронлар дәстеси фотопластинка менен тәсирлескенде рентген нурлары кристаллар арқалы өткенде пайда болатуғын дифракциялық сүўреттей дифракциялық сүўрет пайда болады.

(1.5.10)-аңлатпадағы жоқарғы плюс ҳәм (1.5.12)-аңлатпадағы минус k бағытындағы, ал төменги белги [(1.5.10) дағы плюс ҳәм (1.5.12 деги минус)] оған қарама-қарсы бағытта тарқалатуғын жуўырыўшы толқынға сәйкес келетуғынлығын атап өтемиз. Сонлықтан стационар ҳалларды қарағанымызда e^{ikx} түриндеги пси-функцияны x көшери бағытында оң тәрепке қарай жуўыратуғын толқын, ал e^{-ikx} түриндеги толқын функциясын x көшери бағытында шеп тәрепке қарай жуўыратуғын толқын түринде трактовкалаймыз.

Анық мәниске ийе болған импульске ийе еркин бөлекше ушын Шредингер теңлемесиниң улыўма шешими (1.5.10) түриндеги еки толқынның суперпозициясы түринде жазылады

$$\psi = C_1 e^{i\mathbf{kr}} + C_2 e^{-i\mathbf{kr}}. \tag{1.5.13}$$

$C_1 = C_2$ ямаса $C_1 = -C_2$ теңликлери орынланатуғын жағдайларда (1.5.13)-функция сәйкес

$$\psi = A\cos kr \text{ ямаса } \psi = B\sin kr \tag{1.5.14}$$

түринде жазылады. Бул функциялардың турғын толқынды тәрийиплейтуғыны өз-өзинен түсиникли.

Δx интервалының ишинде жайласқан (локализацияланған) еркин бөлекшениң қозғалысын қараймыз (әпиўайылық ушын биз бир өлшемли мәселени қараймыз). Анықсызлық принципи бойынша бөлекшениң импульси $\hbar/\Delta x$ шамасындағы анықсызлыққа ийе болады.

Суперпозиция принципине сәйкес бөлекшениң пси-функциясы импульсиниң мәнислери $p_0 - \Delta p$ шамасынан $p_0 + \Delta p$ шамасына шекемги (1.5.12)-түрдеги ҳаллардың қосындысы сыпатында көрсетилиўи мүмкин:

$$\psi(x,t) = \int_{p_0-\Delta p}^{p_0+\Delta p} b(p) e^{-\left(\frac{i}{\hbar}\right)(Et-px)} dp.$$

E шамасын (энергиясын) $\omega = E/\hbar$ шамасы менен, ал p импульсин $k = p/\hbar$ толқынлық сан менен алмастырып

$$\psi(x,t) = \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} c(k) e^{i(kx-\omega t)} dk \tag{1.5.15}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Биз толқын пакетин ямаса толқынлар группасын тәрийиплейтуғын аңлатпаға келдик.

ω жийилиги толқынлық сан k ның базы бир функциясы болып табылады: $\omega = \omega(k)$. Бул функцияны k_0 ноқатының әтирапында қатарға жаямыз. Қатардың биринши еки ағзасы менен шекленсек

$$\omega(k) = \omega_0 + (d\omega/dk)_0(k - k_0) \tag{1.5.16}$$

аңлатпасын аламыз.

(1.5.15)-аңлатпадағы $c(k)$ коэффициенти әстелик пенен өзгеретуғын функция деп есаплап оны интегралдың алдына шағарамыз (Δk шамасы киши деп есапланады). Усының менен бирге экспонентаның көрсеткишиндеги ω шамасын оның (1.5.16)-мәниси менен алмастырамыз ҳәм жаңа $\xi = k - k_0$ өзгериўшисин киргиземиз. Нәтийжеде

$$\psi(x,t) = c(k_0)e^{i(k_0x-\omega_0 t)}\int_{-\Delta k}^{+\Delta k} e^{i[-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t]\xi}d\xi$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпа аңсат интегралланады ҳәм соның нәтийжесинде биз

$$\psi(x,t) = 2c(k_0)\frac{\sin\left\{\left[x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t\right]\right\}}{x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t}e^{i(k_0x-\omega_0t)} = A(x,t)e^{i(k_0x-\omega_0t)} \qquad (1.5.17)$$

аңлатпасына ийе боламыз.

Δk шамасының киши екенлигине байланыслы (1.5.17)-функциясын ўақытқа ҳәм кеңисликке байланыслы әсте-ақырынлық пенен өзгеретуғын, амплитудасы $A(x,t)$ шамасына тең дерлик монохромат толқынды тәрийиплейди деп есаплаўға болады. (1.5.17)-аңлатпаның бөлими нолге тең болған ноқатта амплитуданың максимумы жайласады. Солай етип толқын пакетиниң орайы (яғный амплитуда максималлық мәниске ийе ноқат)

$$x_{pak} = (d\omega/dk)_0 t \qquad (1.5.18)$$

ноқатында жайласқан болады.

(1.5.18)-аңлатпадан толқын пакетиниң орайының

$$v_{gr} = (d\omega/dk)_0 \qquad (1.5.19)$$

тезлиги менен қозғалатуғынлығын көриўге болады. Бул аңлатпада v_{gr} арқалы группалық тезлик белгиленген.

Еркин бөлекшениң энергиясы ушын релятивистлик емес аңлатпа $E = p^2/2m$ түрине ийе болады. E ни $\hbar\omega$ менен, ал p ны $\hbar k$ менен алмастырып ω ҳәм k арасындағы байланысты табамыз:

$$\omega = \frac{k^2\hbar}{2m}. \qquad (1.5.20)$$

(1.5.20)-аңлатпаны k бойынша дифференциаллап еркин бөлекшениң қозғалысын тәрийиплейтуғын толқын пакетиниң тезлиги ушын $k\hbar/m = p/m = v$ аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпада v арқалы бөлекшениң тезлиги белгиленген. Солай етип толқын пакети де бөлекшениң тезлигиндей тезлик пенен қозғалады екен.

Толқын пакетиниң кеңлиги ҳаққында айтқанда амплитуда нолге айланатуғын пакеттиң орайына ең жақын жайласқан ноқатлар арасындағы қашықлықты түсинемиз. Бул ноқатларға (1.5.17)-аңлатпадағы синустың аргументи $\pm\pi$ шамасына тең болған жағдайдағы x тың мәнислери сәйкес келеди (аргументтиң ноллик мәниси пакеттиң орайына сәйкес келеди). Демек пакеттиң шегараларының координаталары $\left[x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t\right]\Delta k = \pm\pi$ шәртин қанаатландырады. Буннан

$$x = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t \pm \frac{\pi}{\Delta k}. \qquad (1.5.21)$$

(1.5.21)-аңлатпадан толқын пакетиниң кеңлиги ушын турақлы $\frac{2\pi}{\Delta k}$ шамасы алынады. Егер (1.5.20)-аңлатпадағы қатарға жайыўдың кейинги ағзаларын да есапқа алатуғын болсақ, онда толқын пакетиниң кеңлиги ушын ўақытқа байланыслы өзгеретуғын шама алынады. Толқын пакетиниң кеңлиги үлкейетуғын болып шығады. Бул кеңисликтеги бөлекшениң локализациясының дәллигиниң қозғалыстың барысында кемейетуғынлығын аңғартады.

§ 6. Итималлық ағысының тығызлығы

Кеңисликтиң ҳәр қыйлы ноқатларында бөлекшени табыўдың итималлығының тығызлығы түсиниги менен бир қатарда итималлық ағысының тығызлығы түсинигин де киргизиў мүмкин. Бул түсиникке келиў ушын шексиз үлкен көлем бойынша емес, ал базы бир шекли V көлеми бойынша алынған $\int|\psi|^2dV$ интегралын қараймыз. Бул интеграл бөлекшени берилген көлемде табыўдың итималлығын береди. Бул итималлықтан ўақыт бойынша туўынды аламыз:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V |\psi|^2\,dV = \frac{\partial}{\partial t}\int_V \psi^*\psi\,dV = \int_V \left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)dV. \tag{1.6.1}$$

(1.5.1)-теңлемеге сәйкес

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi}\nabla^2\psi + \frac{1}{i\hbar}U\psi,\; \frac{\partial\psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar}{2mi}\nabla^2\psi^* - \frac{1}{i\hbar}U\psi^*.$$

Екинши теңлеме биринши теңлемениң комплексли түйинлеси болып табылады. Ол биринши теңлемеден ψ функциясын ψ* функциясы менен, i ди –i менен алмастырыў арқалы алынады. Бул қатнаслардың жәрдеминде (1.6.1)-формуланың оң тәрепин

$$-\int_V \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*)dV + \frac{1}{i\hbar}\int_V (\psi^*U\psi - \psi U\psi^*)dV$$

түринде жаза аламыз. Бул интеграллардың екиншисиниң нолге тең екенлиги анық. Биринши интегралды болса былайынша жазыў мүмкин:

$$-\int_V \frac{\hbar}{2mi}\nabla(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)dV. \tag{1.6.2}$$

Бул

$$\nabla(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) = \nabla\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla^2\psi^* - \nabla\psi\nabla\psi^* - \psi\nabla^2\psi^* = \\ = \psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*$$

түриндеги элементар есаплаўлардан келип шығады.

Солай етип (1.6.1)-формуланың оң тәрепин (1.6.2)-аңлатпа менен алмастырыўға болады екен. Нәтийжеде

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V |\psi|^2\, dV = \int\limits_V \nabla\left\{\frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)\right\}dV \tag{1.6.3}$$

формуласына ийе боламыз.

Остроградский-Гаусс теоремасының жәрдеминде бул қатнастың оң тәрепин V көлемин шегаралап турған бет S бойынша интеграл менен алмастырыў мүмкин. Бул

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V |\psi|^2\, dV = \int\limits_S \left\{\frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)\right\}dS \tag{1.6.4}$$

формуласына алып келеди (биз "-" белгисин формуланың шеп тәрепине өткиздик).

(1.6.4)-аңлатпадан мынадай жуўмақ шығарыўға болады: оң тәрепте турған бет бойынша алынған интеграл бөлекшениң V көлеминде жайласыў итималлығының киширейиў тезлигин береди. Демек ол интеграл S бети арқалы өтетуғын итималлықтың ағысын береди деген сөз. Усы жағдайға байланыслы

$$j = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \tag{1.6.5}$$

шамасын итималлықтың ағысының тығызлығы деп деп қабыл етемиз.

(1.6.5) белгилеўин пайдаланып (1.6.3)-формуланы былайынша көширип жазамыз:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V |\psi|^2\, dV = \int\limits_V \left\{\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2\right\}dV = -\int\limits_V \nabla\boldsymbol{j}\, dV.$$

V көлемин сайлап алыўдың ықтыярлы екенлигине байланыслы кеңисликтиң ҳәр бир ноқатында

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 + \nabla\boldsymbol{j} = 0 \tag{1.6.6}$$

шәртиниң орынланыўы керек. Биз белгили болған үзликсизлик теңлемесин алдық. Электродинамикадағы тап сол сыяқлы теңлеме $\frac{\partial\rho}{\partial t} + \Delta\boldsymbol{j} = 0$ түринде жазылады. Бул аңлатпада ρ арқалы зарядтың тығызлығы, j арқалы тоқтың тығызлығы белгиленген [1-томдағы (51.1)-формулаға қараңыз].

(1.6.6)-аңлатпаға j ушын жазылған (1.6.5)-аңлатпаны қойсақ пси-функцияның қанаатландырыўы зәрүр болған шәртти аламыз:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) + \frac{\hbar}{2mi}\nabla(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) = 0. \tag{1.6.7}$$

$|\psi|^2$ шамасының бөлекшени кеңисликтиң ҳәр қыйлы ноқатларында табыўдың итималлығы екенлигин еске түсиремиз. Буннан пси-функцияның төмендегидей шәртлерди қанаатландырыўының кереклиги келип шығады: 1) бир мәнисли, 2) үзликсиз, 3) шекли (айырым жағдайларда айрықша ноқатларда бул шәрттиң орынланыўы талап етилмейди). Усылар менен бир қатарда (1.6.7)-шәрттен пси функциясының үзликсиз ҳәм шекли мәниске ийе (шекли) биринши туўындыға ийе болатуғынлығы келип шығады (бул жағдайда да айрықша ноқатларда бул шәрттиң орынланбаўы мүмкин).

Пси-функцияға қойылатуғын жоқарыда атап өтилген шәртлердиң жыйнағы стандарт шәртлер деп аталады.

II бап

КВАНТЛЫҚ МЕХАНИКАНЫҢ МАТЕМАТИКАЛЫҚ АППАРАТЫ

§ 7. Тийкарғы постулатлар

Квантлық механиканың тийкарында бир неше постулатлар турады. Олардың ишине системаның ҳалына пси-функциясының, сондай-ақ Шредингер теңлемесиниң сәйкес келетуғынлығы да киреди. Бул параграфта биз жәнe үш постулатты қарап шығамыз[5].

Биринши постулат ҳәр бир физикалық шама ушын анық бир сызықлы оператор жазылады деп тастыйықлайды.

Оператор дегенимизде бир φ функциясына екинши бир *f* функцияны теңлестириў қағыйдасын түсинемиз. Символлық түрде ол былайынша жазылады:

$$f = \hat{Q}\varphi. \tag{1.7.1}$$

Операторларды жазғанда жоқарысына «қалпақ» («шапка») белгисин қоямыз. ($\hat{Q}, \hat{A}, \hat{x}, \hat{\boldsymbol{p}}$ ҳәм тағы басқалар түринде). Операторлардың базы бир түрлерине мысаллар келтиремиз: *a*, *U(x,y,z)*, *d/dx*, $\sqrt{}$. Бул аңлатпаларда *a* = const. Демек (1.7.1)-аңлатпаға сәйкес *a*φ = ψ, *U(x,y,z)*ψ = φ, *a*, *U(x,y,z)* операторлары көбейтиў операторлары болып табылады. $\sqrt{}$ операторы $\psi(x)$ функциясына тәсир етип $\sqrt{\psi(x)} = \varphi(x)$ функциясын береди. d/dx операторы $\psi(x)$ функциясына тәсир етип $\frac{d\psi(x)}{dx} = \varphi(x)$ функциясын береди.

Интеграллық оператор: Мейли $\int K(x,\xi)\psi(\xi)d\xi = \varphi(x)$ болсын. Бул аңлатпада $\int K(x,\xi)d\xi$ интеграллық оператор, ал $K(x,\xi)$ функциясы интеграллық оператордың ядросы деп аталады.

Матрицалық оператор. Мейли $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$ шамасы матрица-бағана түринде жазылған n – өлшемли вектор болсын. n – өлшемли кеңисликтеги $\varphi_i = \sum_{k=1}^{n} a_{ik}\psi_k$ сызықлы түрлендириўин қараймыз. Оны $A\psi = \varphi$ түринде жазыўымыз мүмкин. Бул аңлатпада A арқалы

$$A = \{a_{ik}\} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

формуласындағы a_{ik} коэффициентлеринен қуралған матрица болып табылады. Сонлықтан A матрицасын матрицалық оператор деп атаймыз. Бундай жағдайда

[5]Квантлық механиканың постулатлар системасын сайлап алыў толық бир мәнисли емес. Бәрше тәрепинен қабыл етилген улыўмалық постулатлар системасы жоқ.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n-1} & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n-1} & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn-1} & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} a_{1i}\psi_i \\ \sum_{i=1}^{n} a_{2i}\psi_i \\ \cdots \\ \sum_{i=1}^{n} a_{ni}\psi_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{bmatrix}$$

қатнасы орын алады.

Егер

$$\hat{Q}(\varphi_1 + \varphi_2 + \cdots + \varphi_n) = \hat{Q}\varphi_1 + \hat{Q}\varphi_2 + \cdots + \hat{Q}\varphi_n$$
$$\hat{Q}(c\varphi) = c\hat{Q}\varphi$$

шәртлери орынланатуғын болса операторларды сызықлы операторлар деп атаймыз. Бул аңлатпадағы c аркалы ықтыярлы константа белгиленген. Бул еки шәртти бириктирип, былайынша компактлы түрде жазыў мүмкин:

$$\hat{Q}\left(\sum_{m=1}^{n} c_m\varphi_m\right) = \sum_{m=1}^{n} c_m\hat{Q}\varphi_m. \tag{1.7.2}$$

(1.3.12)- ҳәм (1.7.2)-формулаларды бир бири менен салыстырып көргенде сызықлы оператордың суперпозиция принципи менен сәйкес келетуғынлығын көриўге болады.

Сызықлы операторларға мысал ретинде x қа көбейтиўди ($\hat{Q} = x$) ҳәм x бойынша дифференциаллаўды ($\hat{Q} = \partial/\partial x$) көрсетиўге болады. Ҳақыйқатында да

$$x\sum \varphi_m = \sum x\varphi_m\,, x(c\varphi) = cx\varphi.$$

Тап сол сыяқлы

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\sum \varphi_m\right) = \sum \frac{\partial\varphi_m}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial x}(c\varphi) = c\frac{\partial\varphi}{\partial x}.$$

Математикада ҳәр бир оператор ушын сәйкес теңлеме жазылады:

$$\hat{Q}\varphi = q\varphi. \tag{1.7.3}$$

Бул теңлемеде φ (ψ арқалы да белгилеўимиз мүмкин) арқалы базы бир функция, q арқалы параметр белгиленген. Буннан кейин (1.7.3)-теңлемени теңликке айландыратуғын, усының менен бир қатарда базы бир қосымша шәртлерди (мысалы стандарт шәртлерди) қанаатландыратуғын барлық функцияларды излеў мәселеси қойылады. Көплеген операторлар ушын жоқарыда қойылған шәртлерди қанаатландыратуғын шешимлер q параметриниң қәлеген мәнислеринде емес, ал айырым мәнислеринде алынатуғынлығы мәлим. Параметрдиң усындай айрықша мәнислери $\hat{Q}$ операторының меншикли мәнислери, ал (1.7.3)-теңлемеден алынатуғын φ функциялары оператордың сол меншикли мәнислерге тийисли болған меншикли функциялары деп аталады. Бир қатар жағдайларда бир меншикли мәниске бир неше меншикли функциялардың сәйкес келиўи де мүмкин. Бундай жағдайда берилген меншикли мәнисти айныған (рус тилиндеги «вырождение» сөзи) деп атайды. Берилген меншикли мәниске сәйкес келиўши ҳәр қыйлы функциялардың жыйнағын айныўдың еселиги (рус тилинде «кратность вырождения» деп атайды) деп атаймыз.

Квантлық механиканың екинши постулаты бойынша $\hat{Q}$ операторына сәйкес келиўши Q физикалық шамасын өлшегенде усы оператордың q_m меншикли мәнислериниң биреўи алынады.

Солай етип (1.7.3) түриндеги теңлеме квантлық механикада оғада әҳмийетли орынды ийелейди екен. Екинши постулат бойынша q параметриниң бирлигиниң Q шамасының бирлигиндей екенлиги көринип тур. Тап усындай бирликке $\hat{Q}$ операторы да ийе болады

$\hat{Q}$ операторының меншикли мәнислериниң жыйнағы оператордың спектри ямаса Q шамасының спектри деп аталады. Спектр q_1, q_2, ...дискрет мәнисленинен турыўы мүмкин. Бундай жағдайда спектрди дискрет спектр деп атаймыз. Егер меншикли мәнислердиң жыйнағы үзликсиз избе-изликти пайда ететуғын болса спектрди үзликсиз ямаса тутас спектр деп атайды. Улыўма жағдайда спектр өз ишине дискрет областты да, үзликсиз областты да алыўы мүмкин.

Дискрет спектр жағдайында $\hat{Q}$ операторының меншикли мәнислери менен меншикли функцияларын номерлеў мүмкин:

$$q_1,\ q_2, \dots, q_m, \dots$$
$$\psi_1,\ \psi_2, \dots, \psi_m, \dots$$

Квантлық механикада қәлеген физикалық шаманың меншикли функцияларының жыйнағы толық системаны пайда етеди деп есаплайды. Бул қәлеген ψ үзликсиз функциясын меншикли функциялар бойынша төмендегидей түрде қатарға жайыўға болатуғынлығын аңғартады

$$\psi = \sum c_m \psi_m. \tag{1.7.4}$$

Бул аңлатпада c_m арқалы турақлы, улыўма жағдайда комплексли коэффициентлер белгиленген.

(1.7.4)-аңлатпаны системаның базы бир ҳалының пси функциясы деп көз алдымызға елеслетейик.Квантлық механиканың үшинши постулаты төмендегилерди тастыйықлайды: Система ψ ҳалында турған болсын. Q функциясы бойынша (1.7.4)-қатар жайылған. Бундай жағдайда q_m шамасының алыныў итималлығы (функцияларды тәртиби бойынша нормировкалағанда) c_m коэффициентиниң модулиниң квадратына тең болады.

c_m коэффициентлериниң мәнисине сәйкес төмендеги шәрттиң орынланыўы керек:

$$\sum |c_m|^2 = 1. \tag{1.7.5}$$

Төменде биз ψ_m функцияларын сәйкес түрде нормировкалағанда бул шәрттиң ҳақыйқатында да орынланатуғынлығын көремиз.

Қатардың тек бир коэффициентинен басқа коэффициентлериниң барлығыда нолге тең болса (1.7.4)-формула $\psi = \psi_m$ қатнасына өтеди (пси-функцияның $e^{i\alpha}$ фазалық көбейтиўшисине шекемги дәлликте анықланатуғынлығын еске салып өтемиз). Бул жағдайда барлық өлшеўлерде q_m нәтийжеси алынады. Демек ψ_m меншикли функциясы Q шамасының q_m шамасына тең болатуғын ҳалдың пси-функциясы болып табылады екен.

(1.7.4)-қатардың ағзаларының екиден кем емес ағзалары нолге тең болмаса, онда Q шамасы ψ ҳалында анық мәниске ийе болмайды. Өлшеўлерде оның ушын q_1, q_2, ... мәнислери алынады. Анаў ямаса мынаў мәнистиң алыныў итималлығы сәйкес ψ_m функциясының (1.7.4)-қатардағы салмағы, яғный c_m коэффициентиниң шамасы арқалы анықланады деп есаплаў тәбийий. c_m шамасының өзи комплексли болғанлықтан бундай итималлыққа тең бола алмайды. Сонлықтан dV көлеминде бөлекшени табыўдың итималлығы ψ функциясы тәрепинен емес, ал оның модулиниң квадратының шамасы менен анықланатуғынлығын еске түсиремиз ҳәм тап сол сыяқлы итималлық сыпатында c_m шамасының модулиниң квадратын алыў керек деген жуўмақ шығарамыз. Бундай таллаўды үшинши постулаттың дәлили сыпатында қараўға болмайды. Усы жағдай тек қандай постулатқа келиўдиң кереклигин ғана көрсетеди. Постулаттың өзин квантлық механиканың тийкарына қойылған тийкарғы болжаў деп қараў керек.

Келеси параграфта биз дискрет спектрге ийе физикалық шаманың қәлеген оператордың меншикли функцияларының ортонормировкаланған система деп аталатуғын системаны пайда ететуғынлығын көрсетемиз. Бул жағдай

$$\int \psi_m^* \psi_m dV = \delta_{mn} \qquad (1.7.6)$$

аңлатпасының орын алатуғынлығын билдиреди. Интеграллаў ψ_k функциялары анықланған областтағы өзгериўшилердиң өзгериў интерваллары бойынша жүргизиледи.

Математикада φ ҳәм ψ функцияларының скаляр көбеймеси түсиниги бар. Бундай көбейме $<\varphi|\psi>$ түринде жазылады ҳәм төмендигидей болып анықланады:

$$<\varphi|\psi> = \int \varphi^* \psi \, dV. \qquad (1.7.7)$$

$dV = dxdydz$. Егер скаляр көбейме нолге тең болса функцияларды ортогоналлық функциялар деп атаймыз. Тап сол сыяқлы өз-ара перпендикуляр, яғный ортогоналлық векторлардың скаляр көбеймеси нолге тең. (1.7.7)-анықламадан

$$<\varphi|\psi>^* = <\varphi|\psi>$$

екенлиги келип шығады. Функцияның скаляр квадраты, яғный функцияның өзин өзине скаляр көбейткенде алынатуғын

$$<\varphi|\varphi> = \int \varphi^* \varphi \, dV = \int |\varphi|^2 dV$$

шамасы ҳақыйқый ҳәм оң мәнислерге ийе болады.

$<a\varphi|b\psi>$ түриндеги көбеймени алып қарайық. Бул көбеймедеги a, b шамалары комплексли санлар болсын. (1.7.7)-анықламаны итибарға алып

$$<a\varphi|b\psi> = a^* b <\varphi|\psi> \qquad (1.7.9)$$

аңлатпасын жаза аламыз. Солай етип скаляр көбеймениң белгиси алдына турақлы коэффициентлерди шығарғанда биринши көбейтиўшиниң орнына оның комплексли түйинлеси келеди, ал екинши көбейтиўши өзгериссиз қалады екен.

(1.7.7)-белгилеўди қолланып меншикли функциялардың ортонормировкаланыў шәрти болған (1.7.6)-аңлатпаны

$$<\psi_m|\psi_n> = \delta_{mn} \qquad (1.7.10)$$

түринде жазыўға болады.

Тап сондай шәртти туўры мүйешли координата көшерлериниң ортлары да қанаатландырады:

$$e_m e_n = \delta_{mn}.$$

(1.7.10)-шәрттиң жәрдеминде (1.7.4)-қатарға жайыўдағы c_m коэффициентлериниң мәнисин табыў мүмкин. Буның ушын (1.7.4)-қатнасты ψ_n ге скаляр көбейтемиз ҳәм (1.7.10)-аңлатпаны итибарға аламыз

$$<\psi_n|\psi> = \sum c_m<\psi_n|\psi_m> = \sum c_m\delta_{mn} = c_n.$$

Сумманың m бойынша алынатуғынлығын аңғарамыз. Солай етип биз

$$c_n = <\psi_n|\psi> = \int \psi_n^*\psi dV \qquad (1.7.11)$$

формуласына келемиз.

c_n коэффициентиниң мәнисин билиў физикалық шама анық мәниске ийе болатуғын ҳалдағы усы физикалық шаманың орташа мәнисин табыўға мүмкиншилик береди. Q шамасын өлшегенде q_m мәнисиниң алыныў итималлығы $|c_m|^2$ шамасына тең. Демек усы шаманың орташа мәниси

$$<q> = \sum|c_m|^2 q_m = \sum c_m^* c_m q_m \qquad (1.7.12)$$

формуласының жәрдеминде анықланады екен. Бул формулада да сумма m индекси бойынша алынады. (1.7.11) ге сәйкес $c_m^* = <\psi|\psi_m>$. Бул аңлатпаны (1.7.12)-формулаға қойсақ

$$<q> = \sum<\psi|\psi_m>c_m q_m = \sum<\psi|q_m\psi_m>c_m.$$

(1.7.3)-аңлатпаға сәйкес $q_m\psi_m$ шамасын $\hat{Q}\psi_m$ арқалы алмастырып c_m шамасын скаляр көбейме белгисинен шығарамыз ҳәм оператордың сызықлы екенлигинен пайдаланамыз:

$$\langle q\rangle = \sum_m \langle\psi|\hat{Q}\psi_m\rangle c_m = \sum_m \langle\psi|\hat{Q}c_m\psi_m\rangle = \langle\psi|\hat{Q}\sum_m c_m\psi_m\rangle.$$

Ең ақырында (1.7.4)-аңлатпаны итибарға алып

$$\langle q\rangle = \langle\psi|\hat{Q}\psi\rangle \qquad (1.7.13)$$

ямаса

$$\langle q\rangle = \int \psi^* \hat{Q} \psi \, dV \qquad (1.7.14)$$

аңлатпасына ийе боламыз.

Биз квантлық механиканың әҳмийетли формулаларының бирин алдық. Бул формула пси-функциясын билген ҳалда қәлеген физикалық шаманы өлшеўдиң нәтийжелериниң орташа мәнисин есаплаўға мүмкиншилик береди. Буның ушын усы шамаға сәйкес келиўши оператордың түрин де билиў керек болады.

1-8. **Сызықлы операторлар**

Физикалық шамалар ҳақыйқый шамалар болып табылады. Сонлықтан олар меншикли мәнислери хақыйқый шамалар болып табылатуғын операторлар менен сәўлеленеди. Квантлық механикада тап усындай операторлардың дыққат орайына алынатуғынлығы тәбийий. Бирақ бир қатар есаплаўларды жүргизгенде комплексли меншикли мәнислери бар жәрдемши операторлардан да пайдаланады. Усы жағдайларға байланыслы биз бундай операторлардың қәсийетлери менен танысыўымыз керек.

Тийкарғы анықламалардан баслаймыз.

$$\langle \varphi | \hat{Q}_1 \varphi \rangle = \langle \psi^* | \hat{Q}_2 \varphi^* \rangle \qquad (1.8.1)$$

қәсийетине ийе еки $\hat{Q}_1$ҳәм $\hat{Q}_2$ операторлары бир бири менен транспонирленген деп аталады. Бул аңлатпада φ менен ψ арқалы ықтыярлы еки функция белгиленген. $\hat{Q}$ операторына транспонирленген операторды $\tilde{\hat{Q}}$ арқалы белгилеймиз. Демек (1.8.1)-аңлатпадағы $\hat{Q}_1$ операторын әпиўайы түрде $\hat{Q}$ арқалы белгилесек, онда $\hat{Q}_2$ операторын $\tilde{\hat{Q}}$ арқалы белгилеў керек болады:

$$\langle \varphi | \hat{Q} \psi \rangle = \langle \psi^* | \tilde{\hat{Q}} \psi^* \rangle. \qquad (1.8.2)$$

Солай етип (1.8.2)-шәртти қанаатландыратуғын $\hat{Q}$ ҳәм $\tilde{\hat{Q}}$ операторлары бир бири менен транспонирленген деп аталады. (1.7.7) анықламасын итибарға алып (1.8.2) шәртин былайынша жазыўға болады:

$$\int \psi^* \, \hat{Q} \, \psi \, dV = \int \psi \, \tilde{\hat{Q}} \, \psi^* \, dV. \qquad (1.8.3)$$

Ықтыярлы түрде алынған функциялардың қәлеген φ ҳәм ψ жубы ушын

$$\langle \varphi | \hat{Q} \psi \rangle = \langle \hat{Q}^+ \varphi | \psi \rangle \qquad (1.8.4)$$

шәртин қанаатландыратуғын $\hat{Q}$ операторы ушын $\hat{Q}^+$ операторын жазамыз. Бул жағдайда $\hat{Q}^+$ операторын $\hat{Q}$ операторының түйинлес эрмит операторы (ямаса әпиўайы түрде түйинлеси) деп атайды. $\hat{Q}$ операторы өзинен оң тәрепте турған функцияға тәсир ететуғын болса $\hat{Q}^+$ операторы өзиниң алдында (шеп тәрепинде турған функцияға) тәсир етеди. Солай етип $\hat{Q}$ операторы символына «+» белгисин қойыў оператордың оң тәрепинде турған функцияға тәсир етиўди оң тәрепинде турған функцияға тәсир етиўге өзгертеди. $\widehat{Q}^{+}$ операторы тәсир ететуғын функцияның оң тәрепинде жазылады деген қағыйданы қабыл етсек, онда түйинлес операторды анықлайтуғын (1.8.4) қатнасы

$$\langle \varphi|\widehat{Q}\psi\rangle = \langle \varphi\widehat{Q}^{+}|\psi\rangle \tag{1.8.5}$$

түрине енеди. Демек (1.8.5) түриндеги аңлатпаларда оператордың символына (белгисине) түйинлес белгисин қойыў менен бирге оператордың шеп тәрепинде турған «дийўалды» оң тәрепине өткериў керек болады.

Енди

$$\left(\widehat{Q}\varphi\right)^{*} = \widehat{Q}^{*}\varphi \tag{1.8.6}$$

шәртин қанаатландыратуғын $\widehat{Q}^{*}$ операторын анықлаймыз. Бундай операторды $\widehat{Q}$ операторының комплексли түйинлеси деп атайды.

$$\langle \psi^{*}|\tilde{\hat{Q}}\varphi^{*}\rangle = \langle \tilde{\hat{Q}}\varphi^{*}|\psi^{*}\rangle^{*} = \langle \left(\tilde{\hat{Q}}\varphi^{*}\right)^{*}|\psi\rangle = \langle \tilde{\hat{Q}}^{*}\varphi|\psi\rangle$$

скаляр көбеймесиниң (1.7.8)-қәсийетин итибарға алып (1.8.2)-аңлатпаның оң тәрепин түрлендиремиз. (1.8.6)-анықлама бойынша $\left(\tilde{\hat{Q}}\varphi^{*}\right)^{*} = \tilde{\hat{Q}}^{*}\varphi$ екенлигин биз пайдаландық. Усының нәтийжесинде (1.8.2)-формула

$$\langle \varphi|\widehat{Q}\psi\rangle = \langle \tilde{\hat{Q}}^{*}\varphi|\psi\rangle$$

түрине енеди. (1.8.4)-аңлатпа менен салыстырыўдан

$$\widehat{Q}^{+} = \tilde{\hat{Q}}^{*} \tag{1.8.7}$$

теңлиги келип шығады. Бул аңлатпада $\tilde{\hat{Q}}^{*}$ арқалы транспонирленген $\tilde{\hat{Q}}$ операторына комплексли түйинлес болған оператор белгиленген. (1.8.7)-аңлатпа $\widehat{Q}^{+}$ эрмитлик операторының улыўма айтқанда комплексли түйинлес оператор $\widehat{Q}^{*}$ менен сәйкес келмейтуғынлығын көрсетеди.

Мейли оператор комплексли санға көбейтиўди аңғартатуғын болсын: $\hat{C} = c$. Бул оператордың эрмитлик түйинлес операторын табамыз. (1.8.5)-аңлатпаға сәйкес

$$\langle \varphi|\hat{C}\psi\rangle = \langle \varphi|\hat{C}^{*}\psi\rangle.$$

Демек $\hat{C}^{*}$ операторының да базы бир сан болыўы керек. Сонлықтан (1.7.9)-қәсийеттен пайдаланып

$$\hat{C}\langle \varphi|\psi\rangle = \left(\hat{C}^{+}\right)^{*}\langle \varphi|\psi\rangle$$

аңлатпасын жазыўға болады. Буннан $\hat{C} = \left(\hat{C}^{+}\right)^{*}$, яғный $\hat{C}^{+} = \hat{C}^{*}$ екенлиги келип шығады. Демек

$$\text{егер } \hat{C} = c \text{ болса } \hat{C}^{+} = c^{*} \tag{1.8.8}$$

шәрти орынланады екен ҳәм $\hat{C}^{+} = \hat{C}^{*}$.

Биз $\widehat{Q}$ операторы менен салыстырыў ушын ($\widehat{Q}$ операторы менен сәйкеслендириў ушын) операторлардың үш түрин анықладық: транспонирленген оператор $\tilde{\hat{Q}}$, эрмитлик түйинлес оператор $\widehat{Q}^{+}$ ҳәм комплексли түйинлес оператор $\widehat{Q}^{*}$. Енди меншикли мәнислериниң ҳақыйқый мәнислер болыўы ушын оператордың қандай шәртлерди қанаатландырыўының шәрт екенлигин анықлаймыз. $\hat{Q}\psi_n = q_n\psi_n$ теңлемесин ψ_n функциясына скаляр көбейтемиз:

$$\langle\psi_n|\hat{Q}\psi_n\rangle = q_n\langle\psi_n|\psi_n\rangle.$$

ψ_n функциясының квадраты ҳақыйқый мәниске ийе (нормировкаланған функциялар ушын квадраты мәниси 1 ге тең). Сонлықтан q_n шамасының ҳақыйқый болыўы ушын теңликтиң шеп тәрепинен ҳақыйқый болыўы керек. Бундай жағдайда

$$\langle\psi_n|\hat{Q}\psi_n\rangle = \langle\psi_n|\hat{Q}\psi_n\rangle^*$$

ямаса (1.7.8)-аңлатпаны есапқа алғанда

$$\langle\psi_n|\hat{Q}\psi_n\rangle = \langle\hat{Q}\psi_n|\psi_n\rangle$$

теңлиги орынланады. (1.8.4)-аңлатпа менен салыстырыў бул шәрттиң $\hat{Q}$ операторы өзине түйинлес болған $\hat{Q}^{+}$ операторы менен сәйкес болатуғын жағдайда орынланатуғынлығы көрсетеди.

$$\hat{Q} = \hat{Q}^{+} \qquad (1.8.9)$$

теңлиги орынланатуғын операторды өзи өзине түйинлес ямаса эрмит операторы деп атайды. (1.8.9)-аңлатпаны есапқа алсақ эрмитлик болыў шәртин

$$\hat{Q} = \tilde{\hat{Q}}^{*} \qquad (1.8.10)$$

түринде жазыў мүмкин.

Солай етип биз әҳмийетли жуўмаққа келдик: физикалық шамаларға өзи өзине түйинлес $\hat{Q}$ (эрмитлик) операторлар сәйкес келеди. Бундай операторлар ушын

$$\langle\psi|\hat{Q}\psi\rangle = \langle\hat{Q}\varphi|\psi\rangle \qquad (1.8.11)$$

аңлатпасы дурыс болады. [(1.8.4)- ҳәм (1.8.9)-аңлатпаларға қараңыз]. Оң тәрептеги $\hat{Q}$ операторын $\widehat{Q}^{+}$ операторы сыпатында қарап бул аңлатпаны былайынша да жаза аламыз:

$$\langle\psi|\hat{Q}\psi\rangle = \langle\varphi\hat{Q}|\psi\rangle \qquad (1.8.12)$$

(өзи өзине түйинлес операторлар ушын «дийўалды» оператордың қәлеген тәрепине қойып жазыўға болады).

(1.8.11)-аңлатпадан эрмит операторы ушын

$$\int \varphi^*\hat{Q}\psi\, dV = \int \psi\widehat{Q}^*\varphi^*\, dV \qquad (1.8.13)$$

аңлатпасының орын алатуғынлығын көриўге болады. Бул аңлатпаны өзи өзине түйинлес оператордың анықламасы түринде қараўға болады.

Эрмит операторларының меншикли функцияларының өз-ара ортогоналлық екенлигин көремиз. (1.7.3)-теңлемени Q шамасының m- ҳәм n-меншикли мәнислери ушын жазамыз:

$$\hat{Q}\psi_m = q_m\psi_m, \text{ ҳәм } \hat{Q}\psi_n = q_n\psi_n.$$

Биринши теңлемени скаляр түрде оң тәрептен ψ_n шамасына, ал екиншисин шеп тәрептен ψ_m шамасына көбейтемиз. Нәтийжеде

$$\langle\hat{Q}\psi_m|\psi_n\rangle = q_m\langle\psi_m|\psi_n\rangle,$$
$$\langle\psi_m|\hat{Q}\psi_n\rangle = q_n\langle\psi_m|\psi_n\rangle$$

аңлатпаларын аламыз. Оператордың эрмитлик екенлигине байланыслы бул теңлемелердиң шеп тәреплери өз-ара тең [(1.8.11)-аңлатпаны қараңыз]. Сонлықтан жоқарыдағы теңлемеден төменги теңлемени алсақ

$$(q_m - q_n)\langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0$$

теңлемесине ийе боламыз. Буннан $q_m \neq q_n$ шәрти орынланғанда (яғный $m \neq n$ болған жағдайда[6]) ψ_m ҳәм ψ_n функцияларының скаляр көбеймелери нолге тең болатуғынлығы келип шығады: $\langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0$. Бул жағдай ψ_m ҳәм ψ_n функцияларының ортогоналлық екенлигин аңғартады.

1-3 параграфта пси-функцияның ықтыярлы комплексли көбейтиўши дәллигинде анықланатуғынлығы атап өтилген еди. Дискрет спектр жағдайында барлық ўақытта да бул көбейтиўшини ψ_k функцияларының ҳәр бириниң квадратының 1 ге тең етип сайлап алыў мүмкин. Бундай аўҳалда меншикли функциялар системасы ортонормировкаланған система болып табылады. Солай етип биз (1.7.10)-формуланы дәлилледик. Буннан былай биз дискрет спектрдиң меншикли функцияларын 1 ге нормировкаланған деп есаплаймыз.

Ең ақырында (1.7.5)-аңлатпаны дәлиллеў ушын меншикли функциялардың ортонормировкаланыў қәсийетинен пайдаланамыз. (1.7.10)-аңлатпаны итибарға алып (1.7.4)-аңлатпаны пси-функцияның нормировка шәртине қоямыз [(1.4.2)-аңлатпаға қараңыз]:

$$1 = \int \psi^*\psi\, dV = \int \left(\sum_m c_m^*\psi_m^*\right)\left(\sum_n c_n\psi_n\right)dV =$$
$$= \sum_{m,n} c_m^* c_n\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_m |c_m|^2.$$

Бул жағдайды дәлиллеў талап етилген еди.

§ 9. Операторларды матрицалық формада көрсетиў

Биз дәслеп матрицалар, матрицалар үстиндеги алгебралық әмеллер ҳаққында қысқаша тоқтап өтемиз.

Матрицаның анықламасы. К есаплаў системасынан К' есаплаў системасына

[6] Биз ҳәр бир q_m шамасына бир меншикли функция сәйкес келеди деп болжаймыз (демек биз қарап атырған жағдайда айныў орын алмайды деген сөз).

өткенде вектордың қураўшылары

$$a'_i = \sum_k \alpha_{ik} a_k, \qquad (i = 1,2,3), \qquad \text{(M.1)}$$

$$a_i = \sum_k \alpha_{ki} a'_k, \qquad (i = 1,2,3), \qquad \text{(M.2)}$$

формулаларының жәрдеминде түрлендирилетуғынлығы мәлим.

Өтиў коэффициентлерин квадрат кесте түринде жазыў мүмкин:

$$A = \begin{Vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{Vmatrix}. \qquad \text{(M.3)}$$

Бул кестени түрлендириў матрицасы деп атаймыз. α_{ik} шамалары матрицаның элементлери деп аталады. Биринши индекс қатардың номерин, ал екинши индекс бағананың номерин анықлайды.

Белгилеўлерди анықлап аламыз. Матрицаның элементлерин еки индекси бар киши ҳәриплердиң жәрдеминде белгилеймиз. Ал матрицаның өзитн белгилеў ушын үлкен ҳәрипти пайдаланамыз (мысалы матрицаның элементи α_{ik}, матрицаның өзи А арқалы белгиленеди). Вектордың қураўшыларын бир индекске ийе киши ҳәриплердиң жәрдеминде, ал векторды болса тап сондай, бирақ жуўан ҳәрип пенен белгилеймиз (мысалы a_i вектордың қураўшылары болса, **a** вектордың өзи болады).

Вектордың қураўшыларын түрлендириў операциясы болған (М.1) операциясын символлық түрде векторды матрицаға көбейтиў түринде жаза аламыз:

$$a' = aA. \qquad \text{(M.4)}$$

Кери түрлендириў болған (М.2) түрлендириўдиң коэффицинетлери

$$A^{-1} = \begin{Vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{21} & \alpha_{31} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & \alpha_{32} \\ \alpha_{13} & \alpha_{23} & \alpha_{33} \end{Vmatrix} \qquad \text{(M.5)}$$

матрицасын пайда етеди. Бул матрицаны кери матрица деп атайды. Кери матрицаның элементлери α'_{ik} арқалы белгилеп

$$\alpha_{ik} = \alpha_{ki} \qquad \text{(M.6)}$$

аңлатпасын жаза аламыз.

А матрицасынан қатарларын бағаналар менен алмастырыў жолы менен алынған матрицаны транспонирленген матрица деп атайды ҳәм $\tilde{A}$ арқалы белгилейди. Егер транспонирленген матрицаның элементлерин $\tilde{\alpha}_{ik}$ арқалы белгилесек

$$\tilde{\alpha}_{ik} = \alpha_{ki} \qquad \text{(M.7)}$$

теңлигин аламыз.

(М.6)- ҳәм (М.7)-формулалардан (М.5) кери түрлендириў матрицасының транспонирленген туўры түрлендириў матрицасына сәйкес келетуғынлығы көринип тур:

$$\mathrm{A}^{-1} = \widetilde{\mathrm{A}}. \qquad \text{(M.8)}$$

(М.8) қатнасы барлық матрицалар ушын орынланбайды[7]. (М.8) шәртин қанаатландыратуғын матрицалар ортогоналлық матрицалар деп аталады.

(М.2) кери түрлендириўи символлық түрде былайынша жазылады

$$\mathrm{a} = \mathrm{A}^{-1}\mathrm{a}'. \qquad \text{(M.9)}$$

Мәселениң формаль түрдеги математикалық тәрепин қозғамай (М.4) ҳәм (М.9) қатнасларын [басқа сөзлер менен айтқанда (М.1) ҳәм (М.2) қатнасларын] бир есаплаў системасынан екинши есаплаў системасына өткендеги түрлендириўлер деп қараўға болмайды, ал бир векторды екинши векторға түрлендириў деп қараў керек. Бул векторлардың екеўи де бир есаплаў системасына тийисли болады. Тап усындай трактовканы нәзерде тутып түрлендириў формулаларын былайынша жазамыз:

$$\mathrm{b} = \mathrm{Aa}, \qquad \text{(M.10)}$$
$$\mathrm{a} = \mathrm{A}^{-1}\mathrm{b}. \qquad \text{(M.11)}$$

Солай етип A матрицасын a векторына тәсир етип оны b векторына айландыратуғын сызықлы оператор деп қараўымыз керек екен.

(М.10) ҳәм (М.11) түрлендириўлерин анық түрде жазамыз. Улыўмалырақ түрде мәселени шешиў ушын **a** ҳәм b векторларын үш өлшемли кеңисликте емес, n өлшемге ийе кеңисликте анықланған деп есаплаймыз. (М.1) ҳәм (М.2) аңлатпаларына сәйкес мыналарды аламыз:

$$b_i = \sum_{k=1}^{n} \alpha_{ik} a_k \quad (i = 1,2,\dots,n), \qquad \text{(M.12)}$$

$$a_i = \sum_{k=1}^{n} \alpha'_{ik} b_k \quad (i = 1,2,\dots,n). \qquad \text{(M.13)}$$

Бул аңлатпаларда α'_{ik} арқалы кери түрлендириў матрицасының элементлери белгиленген (A^{-1} матрицасының элементлери белгиленген). Ортогоналлық матрица ушын $\alpha'_{ik} = \alpha_{ki}$.

A ҳәм A^{-1} матрицалары енди n қатарға ҳәм n бағанаға ийе болады. Мысалы

$$\mathrm{A} = \begin{Vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \cdots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \cdots & \alpha_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \dots & \alpha_{nn} \end{Vmatrix}. \qquad \text{(M.14)}$$

(М.14) матрицасы квадрат матрица болып табылады. Бул матрицадағы қатарлар саны бағаналар санына тең. Квадратлық матрицалар менен бир қатарда туўры мүйешли матрицалар да пайдаланылады. Оның қатарларының саны m бағаналар саны n ге тең емес:

---

[1] Улыўма айтқанда матрицалардың барлығы кери матрицаға ийе бола бермейди. Бундай матрицаларды айрықша ямаса айныған матрицалар деп атайды. Бирақ матрица ҳәтте айнымаған болса да оның кери матрицасы менен транспонирленген матрицасы бир бири менен сәйкес келмеўи мүмкин.

$$A = A_{(m,n)} = \begin{Vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \cdots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \cdots & \alpha_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \cdots & \alpha_{mn} \end{Vmatrix} \quad (М.15)$$

Матриցаның символындағы биринши индекс қатарлар санын, ал екиншиси бағаналар санын анықлайды. Егер усындай жағдайларда гүмән пайда етпейтуғын болса биз индекслерди жазбаймыз.

Солай етип улыўма жағдайда матрица деп туўры мүйешли кесте түринде жазылған $m \cdot n$ элементлериниң жыйнағына айтады екенбиз. Функциялар ямаса басқа да шамалар матрицаның элементлери бола алады. Сонлықтан сол шамалар үстинде алгебралық операциялар жүргизиў керек болады. m қатарға ҳәм n бағанаға ийе матрицаны ($m\times n$)-матрица ямаса $m\times n$-тәртипли матрица ямаса $m\times n$ өлшемге ийе матрица деп атайды. $m\times 1$ тәртипли матрицаны, яғный бир бағанаға ийе матрицаны гейде бағана деп те атайды. Ал $1\times n$-тәртипли матрица бир қатардан турады ҳәм сонлықтан оны гейде тек қатар деп те атайды.

Егер A ҳәм B еки матрицаның сәйкес элементлери бир бирине тең болса яғный $\alpha_{ik} = \beta_{ik}$ шәрти орынланса), онда матрицаларды бир бирине тең матрицалар (A = B) деп атайды.

Егер A ҳәм B матрицалардың сәйкес элементлери $\alpha_{ik} = -\beta_{ik}$ қатнасы арқалы байланысқан болса, онда бундай матрицалар бир биринен тек белгиси бойынша айырмаға ийе деп есаплайды (A = —B).

(М.14) квадрат матрицасы (яғный $m\times n$-тәртипли матрица) (М.15) түриндеги матрицаның дара жағдайы болып табылады. n өлшемли кеңисликте векторды басқа векторды түрлендиретуғын матрицаның квадрат матрица болыўының керек екенлиги айқын

Егер матрицаның элементлери

$$\alpha_{ik} = \alpha_{ki} \quad (М.16)$$

шәртин қанаатландыратуғын болса, онда матрицаны симметриялы матрица деп атаймыз. Симметриялық матрицаның өзиниң транспонирленген матрицасы менен сәйкес келетуғынлығы түсиникли:

$$A_{симм} = \widetilde{A}_{симм}. \quad (М.17)$$

Элементлери

$$\alpha_{ik} = -\alpha_{ki} \quad (М.18)$$

шәртин қанаатландыратуғын матрицаны антисимметриялық ямаса қыя симметриялы матрица деп атайды. Антисимметриялық матрица өзиниң транспонирленген матрицасынан белгиси бойынша ғана айрылады:

$$A_{антисимм} = -\widetilde{A}_{антисимм}. \quad (М.19)$$

Тек диагоналлық элементлери нолге тең емес (яғный α_{ik} элементлериндеги i ҳәм k индекслериниң мәнислери өз-ара тең) квадрат матрицаны диагоналлық матрица деп атаймыз. Диагоналлық матрица

$$\Lambda = \begin{Vmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{Vmatrix} \qquad (М.20)$$

түринде жазылады. Бул матрицаның элементлерин былайынша көрсетиўге болады:

$$\lambda_{ik} = \lambda_k \delta_{ik}. \qquad (М.21)$$

Бул аңлатпада δ_{ik} арқалы Кронекер символы белгиленген [(VI. 12)-аңлатпаға қараңыз].

Егер координаталар системасын өзгертетуғын болсақ (яғный e_1, e_2, ... , e_n базислерин өзгертетуғын болсақ), онда a ҳәм b векторларының қураўшылары да өзгереди [(М.10)-формулаға қараңыз]. Матрица-оператордың элементлери де өзгереди. Базы бир жағдайларда (егер А матрицасы симметриялық болса) А матрицасын диагоналлық матрицаға айланатуғындай етип базисти сайлап алыў да мүмкин.

Бир координаталар системасынан екинши координаталар системасына өткенде матрицаның элементлери өзгереди. Бирақ матрицаның изи деп аталатуғын диагоналлық элементлердиң суммасы өзгериссиз қалады (Sp A арқалы аңлатылады, немисше Spur сөзи из деген мәнисти береди). Солай етип матрицаның изи барлық координаталар системасында бирдей мәниске ийе, яғный инвариант болып табылады:

$$\mathrm{Sp}\ A = \sum_i \alpha_{ii} = \mathrm{inv}. \qquad (М.22)$$

Матрицаның анықлаўшысы да (определители де) өзгериссиз қалады:

$$\det \|\alpha_{ik}\| = \mathrm{inv}. \qquad (М.23)$$

Егер Е матрицасы менен a векторы көбейтилгенде

$$a = Ea$$

теңлиги орын алатуғын болса бул Е матрицасын бирлик матрица деп атаймыз.

Бирлик матрицаның элементлериниң δ_{ik} ға тең екенлигине аңсат көз жеткизиўге болады [(М.12)-аңлатпада $\alpha_{ik} = \delta_{ik}$ деп есапланғанда $b_i = a_i$ теңлигине алып келеди]. Солай етип

$$E = \|\delta_{ik}\| = \begin{Vmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}. \qquad (М.24)$$

Бул матрицаның диагоналлық екенлигин атап өтемиз.

Матрицалар алгебрасы. Матрицалар өзиниң мәниси бойынша алгебралық объектлер болып, олардың үстинен қосыў, алыў ҳәм көбейтиў операцияларын орынлаў мүмкин (матрицаларды бөлиў операциясы деген операция болмайды).

А ҳәм В матрицаларының суммасы (қосындысы) деп Г = А + В матрицасына айтамыз[8]. Бул матрицаның элементлери

---

[8] Былайынша айтылады: «гамма» тең матрица «альфа» плюс матрица «бета» («В» арқалы грек алфавитиндеги үлкен «бета» ҳәрипи белгиленген, ал «Г» грек алфавитиндеги «гамма» ҳәрипин

$$\gamma_{ik} = \alpha_{ik} + \beta_{ik}. \qquad (M.25)$$

Матрицалардың айырмасы Г = А — В деп элементлери

$$\gamma_{ik} = \alpha_{ik} - \beta_{ik} \qquad (M.26)$$

формуласы менен анықланатуғын Г матрицасына айтамыз.

Солай етип операторлардың қосындысы да оператор болып табылады екен.

Тек ғана бирдей тәртипке ийе матрицаларды (яғный бирдей сандағы қатарларға ҳәм бирдей сандағы бағанаға ийе матрицаларды) бир бири менен қосыўға ямаса алыўға болатуғынлығы анық.

А матрицасының η скалярына көбеймеси деп элементлери

$$\beta_{ik} = \eta\alpha_{ik} \qquad (M.27)$$

болған В = ηА матрицасына айтамыз.

Енди матрицаларды көбейтиўди қараўға өтемиз. А матрицасының a векторына тәсир етиўиниң нәтийжесинде b векторы алынады деп есаплайық. Ал В матрицасы b векторына тәсир еткенде оны c векторына айландыратуғын болсын. А ҳәм В матрицаларының көбеймеси деп a векторын c векторына айландыратуғын Г матрицасын түсиниў тәбиййй. Солай етип

$$b = Aa, \text{ яғный } b_m = \sum_k \alpha_{mk}\, ak,$$
$$c = Bb = BAa, \text{ яғный } c_i = \sum_m \beta_{lm} b_m = \sum_m \beta_{lm} \sum_k \alpha_{mk} a_k = \sum_k a_k \sum_m \beta_{lm}\alpha_{mk}.$$

Екинши тәрептен

$$c = Гa, \text{ яғный } c_i = \sum_k \gamma_{ik} a_k.$$

c ҳәм c_i ушын жазылған еки формуланы салыстырыў матрицаларды көбейтиўдиң қағыйдасын береди:

$$Г = BA \text{ көбеймеси } \gamma_{ik} = \sum_m \beta_{im}\alpha_{mk}. \qquad (M.28)$$

Бул қағыйдаға сәйкес төмендеги операцияларды орынлаўымыз керек: Г матрицасының i-қатары менен k-бағанасы кесилискен орында турған элементти алыў ушын В матрицасының i-қатарының ҳәр бир элементин А матрицасының k-бағанасының ҳәр бир элементи менен көбейтип, алынған көбеймелерди қосып шығыўымыз керек.

Улыўма айтқанда матрицаларды көбейтиў коммутативлик емес, яғный

$$BA \neq AB.$$

Ал

$$BA = AB \qquad (M.30)$$

шәрти орынланатуғын матрицаларды коммутацияланыўшы матрицалар деп атаймыз.

билдиреди).

Матрицалардың көбеймесиниң ассоциативлик екенлигин аңсат көрсетиўге болады:

$$(\Gamma B)\,A = \Gamma(BA). \tag{M.31}$$

Демек B матрицасын дәслеп Г матрицасына көбейтип болып, көбеймени A ға көбейтсек алынған нәтийже A ҳәм B матрицаларын көбейтип болганнан кейин алынған көбеймени Г матрицасына көбейткенде алынатуғын нәтийжеге тең болады екен. Ҳақыйқатында да матрицаларды бир бирине көбейтиў қағыйдасы бойынша:

$$\{(\Gamma B)A\}_{ik} = \sum_m (\Gamma B)_{im}\alpha_{mk} = \sum_m \left(\sum_l \gamma_{il}\beta_{lm}\right)\alpha_{mk} =$$

$$= \sum_l \gamma_{il}\left(\sum_m \beta_{lm}\alpha_{mk}\right) = \sum_l \gamma_{il}(BA)_{lk} = \{\Gamma(BA)\}_{ik}$$

(түрлендириўлердиң барысында биз m ҳәм l индекслери бойынша суммалаў тәртибин өзгерттик). Солай етип (M.33) қәсийетиниң дурыслығы дәлилленди.

Бир бирине квадратлық емес матрицаларды (туўры мүйешли матрицаларды) да көбейтиў мүмкин. Бул жағдайда (M.29)-схемадан екинши матрицаның бағаналар саны менен биринши матрицаның қатарлар саны тең болыўының керек екенлиги келип шығады. Екинши матрицаның бағаналар саны қанша болса көбейме матрицаның қатарларының саны да соншама болады. Бул жағдайды келеси мысалда түсиндиремиз:

$$\begin{Vmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \cdots & \beta_{1n} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \cdots & \beta_{2n} \end{Vmatrix} \begin{Vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \alpha_{n3} \end{Vmatrix} =$$

$$= \begin{Vmatrix} \sum \beta_{1n}\alpha_{n1} & \sum \beta_{1n}\alpha_{n2} & \sum \beta_{1n}\alpha_{n3} \\ \sum \beta_{2n}\alpha_{n1} & \sum \beta_{2n}\alpha_{n2} & \sum \beta_{2n}\alpha_{n3} \end{Vmatrix}.$$

Егер екинши матрица квадрат матрица болса, яғный $n \times m$ тәртибине ийе, ал биринши матрица n элементине ийе тек бир бағанаға болса, онда матрица-көбейме n элементке ийе бир бағанадан турады:

$$\begin{Vmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \cdots & \beta_{1n} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \cdots & \beta_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \beta_{n1} & \beta_{n2} & \cdots & \beta_{nn} \end{Vmatrix} \begin{Vmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \cdots \\ \alpha_n \end{Vmatrix} = \begin{Vmatrix} \sum \beta_{1k}\alpha_k \\ \sum \beta_{2k}\alpha_k \\ \cdots \\ \sum \beta_{nk}\alpha_k \end{Vmatrix}. \tag{M.32}$$

Бир бағанаға ийе матрицаны бир қатарға ийе матрицаға көбейткенде тек бир сан алынады (егер матрицаның элементлери функциялар болатуғын болса функция алынады):

$$\|\beta_1 \quad \beta_2 \quad \cdots \quad \beta_n\| \begin{Vmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \cdots \\ \alpha_n \end{Vmatrix} = \sum_k \beta_k\alpha_k. \tag{M.33}$$

Мысалы дара жағдайда $\|\beta\|$ матрицасының орнына транспонирленген $\|\alpha\|$ матрицасын алсақ, онда (М.33)-аңлатпа

$$\|\alpha_1 \quad \alpha_2 \quad \cdots \quad \alpha_n\| \begin{Vmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \cdots \\ \alpha_n \end{Vmatrix} = \sum_k \alpha_k^2$$

түрине енеди. Демек тек бир бағанаға ийе $A_{(n,1)}$ матрицасы ушын

$$\tilde{A}_{(n,1)} A_{(n,1)} = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k^2 \qquad \text{(M.34)}$$

аңлатпасы орынлы болады.

Егер бир бағанаға ийе матрицаның элементи сыпатында вектордың қураўшыларын, ал квадрат матрица сыпатында А матрица-операторын алатуғын болсақ, онда (М.32)-аңлатпа

$$\begin{Vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \alpha_{n3} \end{Vmatrix} \begin{Vmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \cdots \\ \alpha_n \end{Vmatrix} = \begin{Vmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdots \\ b_n \end{Vmatrix} \qquad \text{(M.35)}$$

түрине енеди. Бул аңлатпада $b_i = \sum_i \alpha_{ik} a_k$ [(М.12)-аңлатпа менен салыстырыңыз]. (М.35) аңлатпасының (М.10)-аңлатпа менен эквивалент екенлигин аңсат аңғарыўға болады. Демек векторды бир бағанаға ийе матрица түринде көрсетиўге болады екен.

Е бирлик матрицасының ықтыярлы А матрицасына көбеймесин қараймыз. (М.28)-қағыйда бойынша

$$(\mathrm{AE})_{ik} = \sum_i \mathrm{A}_{im} \delta_{mk}$$

аңлатпасын жазамыз (δ_{mk} шамалары Е матрицасының элементлери болып табылады). Бул суммада тек m = k шәрти орынланатуғын қосылыўшы нолге тең болмайды. Демек $(\mathrm{AE})_{ik} = (\mathrm{A})_{ik}$. Тап сол сыяқлы

$$(\mathrm{EA})_{ik} = \sum_i \delta_{im} \mathrm{A}_{mk} = (\mathrm{A})_{ik}.$$

Жоқарыда айтылғанлардан бирлик матрицаға көбейткенде А матрицасының өзгермейтуғынлығы келип шығады:

$$\mathrm{EA} = \mathrm{AE} = \mathrm{A}. \qquad \text{(M.36)}$$

Соңғы жазылған аңлатпа бирлик матрицаның қәлеген А матрицасы менен коммутацияланатуғынлығы (орынларын алмастырыўға болатуғынлығы) келип шығады.

Қандай да бир векторға дәслеп А түрлендириўин қолллансақ ҳәм буннан кейин оған кери болған A^{-1} түрлендириўин қолллансақ, бизиң дәслепки векторға қайтып келетуғынлығымыз анық

$$a = A^{-1}Aa. \qquad (M.37)$$

Буннан туўры ҳәм кери матрицалардың көбеймесиниң бирлик матрицаға тең болатуғынлығын көремиз: $A^{-1}A = E$[9]). Соның менен бирге туўры ҳәм кери матрицалардың көбеймелери коммутативлик екенлиги (коммутацияланатуғынлығы) айқын болады:

$$A^{-1}A = AA^{-1} = E. \qquad (M.38)$$

A ҳәм A^{-1} матрицаларының көбеймесин (M.28)-формула бойынша жазсақ туўры ҳәм кери матрицалардың элементлери арасындағы байланысты табамыз:

$$\sum_m \alpha'_{im}\alpha_{mk} = \sum_m \alpha_{im}\alpha'_{mk} = \delta_{ik}. \qquad (M.39)$$

Ортогоналлық матрица ушын [яғный (M.8)-шәртти қанаатландыратуғын матрица ушын] $\alpha'_{ik} = \alpha_{ki}$ [(M.6)-аңлатпаға қараңыз]. (M.39)-аңлатпада тап усындай алмастырыўды орынласақ

$$\sum_m \alpha_{ml}\alpha_{mk} = \delta_{ik}, \qquad (M.40)$$

$$\sum_m \alpha_{lm}\alpha_{km} = \delta_{ik} \qquad (M.41)$$

формулаларына ийе боламыз. Солай етип ортогоналлық матрицаның элементлери (M.39)- ҳәм (M.40)-қатнасларды қанаатландырады екен.

Енди операторларды матрицалар түринде көрсетиў мәселесине қайтып келемиз.

$$f = \hat{Q}\varphi \qquad (1.9.1)$$

теңлемесин матрицалық формада жазыўға болады. Буның ушын f ҳәм α функцияларын базы бир жәрдемши $\hat{R}$ операторының меншикли функциялары болған $\psi_k^{(r)}$ функциялары бойынша қатарға жаямыз, соның менен бирге $\psi_k^{(r)}$ функцияларын ортонормировкаланған деп есаплаймыз. Яғный

$$\langle\psi_m^{(r)}|\psi_n^{(r)}\rangle = \delta_{mn}. \qquad (1.9.2)$$

Солай етип

$$\varphi = \sum_n a_n \psi_n^{(r)}, \qquad (1.9.3)$$

$$f = \sum_k b_k \psi_k^{(r)}. \qquad (1.9.4)$$

Бул аңлатпаларда

[9] Бул аңлатпадан кери матрицаны белгилеў ушын қолланылатуғын A^{-1} белгилеўиниң мәниси аңсат түсиндириледи (E = «бир» деген мәнисти береди).

$$a_n = \langle\psi_n^{(r)}|\varphi\rangle, \quad b_k = \langle\psi_k^{(r)}|f\rangle \tag{1.9.5}$$

[(1.7.11)-формулаға қараңыз].

$\psi_m^{(r)}$ функцияларын белгилеп сайлап алғанда φ функциясы a_n коэффициентлердиң жыйнағы арқалы, ал f функциясы b_k коэффициентлериниң жыйнағы менен анықланады. Сонлықтан, айтайық, φ функциясын (яғный ∞×1 тәртибиндеги матрицаны) былайынша

$$\varphi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ a_n \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}, \tag{1.9.6}$$

ямаса төмендегидей қатар (яғный 1×∞ түриндеги матрица) түринде жаза аламыз[10]:

$$\varphi = (a_1 a_2 \ldots\ a_n \ldots). \tag{1.9.7}$$

Тап сол сыяқлы таллаўлар f функциясы ушын да дурыс.

(1.9.3)- ҳәм (1.9.4)-қатарларды (1.9.1)-теңлемеге қойсақ, a_n ҳәм b_k коэффициентлери тек сан болғанлықтан $\widehat{Q}$ операторына тәсир етпейтуғынлығын есапқа алсақ

$$\sum_k b_k\psi_k^{(r)} = \sum_n a_n\widehat{Q}\psi_n^{(r)} \tag{1.9.8}$$

теңлигине ийе боламыз. Бул теңликтиң еки тәрепин де $\psi_m^{(r)}$ функцияларына скаляр көбейтемиз:

$$\sum_k b_k\langle\psi_m^{(r)}|\psi_k^{(r)}\rangle = \sum_k a_n\langle\psi_m^{(r)}|\widehat{Q}\psi_n^{(r)}\rangle. \tag{1.9.9}$$

(1.9.2)-формулаға сәйкес b_k ның алдында турған коэффициенти δ_{mk} ға тең. Сонлықтан шеп тәрепте турған сумма b_m ге тең ҳәм биз

$$b_m = \sum_n Q_{mn}a_n \tag{1.9.8}$$

аңлатпасына келемиз. Бул аңлатпада Q_{mn} символы арқалы

$$Q_{mn} = \langle\psi_m^{(r)}|\widehat{Q}\psi_n^{(r)}\rangle = \int \left(\psi_m^{(r)}\right)^* \widehat{Q}\,\psi_n^{(r)}\,dV \tag{1.9.9}$$

[10] Тап сол сыяқлы берилген базисте (яғный e_k ортлары системасында) a векторы оның қураўшылары болған a_k санларының жыйнағы менен анықланады.

аңлатпасы белгиленген.

(1.9.1)-теңлеме φ функциясының f функциясына түрлендириўге жәрдем беретуғын қағыйданы анықлайды. Ал (1.9.8)-теңлеме болса a_n коэффициентлериниң жыйнағын (бул коэффициентлер жыйнағы φ функциясын береди) b_m (бул коэффициентлер жыйнағы болса f функциясын береди) коэффициентлери жыйнағына түрлендириўдиң қағыйдасын анықлайды. Демек (1.9.8)-теңлеме (1.9.1)-теңлемениң басқа формадағы жазылыўы екен. a_n коэффициентлери бул формулада φ функциясын береди, ал b_m коэффициентлери f функциясын береди. Q_{mn} шамаларының жыйнағы $\hat{Q}$ операторы болып табылады. Бул жыйнақ бағаналары менен қатарларының саны шексиз үлкен болған квадрат матрица түринде жазылады:

$$\hat{Q} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \cdots & Q_{1n} & \cdots \\ Q_{21} & Q_{22} & \cdots & Q_{2n} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ Q_{m1} & Q_{m2} & \cdots & Q_{mn} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}. \tag{1.9.10}$$

f ҳәм φ функциялары арасындағы матрицалық қатнасқа сырттан қарағанда (1.9.1)-теңлемеге уқсас форма бериўге болады. Буның ушын

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b \\ \cdots \\ \cdots \\ b_m \\ \cdots \\ \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \cdots & \cdots & \cdots \\ Q_{21} & Q_{22} & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & Q_{mn} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdots \\ \cdots \\ a_n \\ \cdots \\ \cdots \end{pmatrix} \tag{1.9.11}$$

аңлатпасының [бул аңлатпаның оң тәрепинде еки матрицаның көбеймеси тур] (1.9.8)-формулаға эквивалент екенлигин көрсетемиз.

Матрицаны матрицаға көбейтиўдиң қағыйдасы бойынша [(М.28)-формула] Г ҳәм А матрицалары бир бирине көбейтилгенде (В = ГА) алынған В матрицасының β_{mk} элементлери γ_{mn} ҳәм α_{nk} элементлери арқалы былайынша есапланады

$$\beta_{mk} = \sum_n \gamma_{mn}\alpha_{nk}. \tag{1.9.12}$$

Егер А матрицасы элементлери $\alpha_{n1} = \alpha_n$ болған тек бир бағанаға ийе болса (1.9.12)-формула В матрицасының элементлери ушын $\beta_{m1} = \sum_n \gamma_{mn}\alpha_n$ мәнислерин берди. Демек көбейме-матрица да элементлери $\beta_{m1} = b_m$ болған бағана болып табылады екен. Соның менен бирге

$$\beta_m = \sum_n \gamma_{mn}\alpha_n. \tag{1.9.13}$$

α_n, γ_{mn} ҳәм β_m шамаларының орнына сәйкес a_n, Q_{mn} ҳәм b_m шамаларын алып биз (1.9.8)-аңлатпаға келемиз. Солай етип (1.9.11)-матрицалық жазыўдың дурыс екенлиги дәлилленеди.

Солай етип $\hat{Q}$ операторын (1.9.10)-матрица түринде жазыў мүмкин екен. Бул матрицаның элементлери (1.9.9)-формула бойынша есапланады. Бул элементлер «базисти» сайлап алыўдан ғәрезли. Яғный олардың мәнислери меншикли функциялары φ ҳәм f функцияларын қатарға жайыў ушын қолланылатуғын қосымша $\hat{R}$ операторынан ғәрезли. φ ҳәм *f* функцияларын қатарға жайыў коэффициентлериниң мәнислери де $\hat{R}$ операторын сайлап алыўдан ғәрезли. a_n коэффициентлериниң жыйнағы, b_m коэффициентлериниң жыйнағы ҳәм Q_{mn} матрицасы ҳаққында гәп еткенде r-көринисте алынған φ функциясы, *f* функциясы ҳәм $\hat{Q}$ операторы нәзерде тутылады. Егер $\hat{R}$ координата операторы болса, онда функциялардың ҳәм оператордың координаталық көриниси ҳаққында айтылады. Егер $\hat{R}$ импульс операторы болып табылатуғын болса импульслик көринис алынады ҳәм тағы басқалар. Қәлеген қатнасқа кириўши барлық операторлар менен функцияларды бирдей көринисте алыў керек.

Егер (1.9.9)-формулада ψ_k функциясы сыпатында $\hat{Q}$ операторының өзиниң меншикли функциялары $\psi_k^{(q)}$ алынатуғын болса, онда өзиниң меншикли көринисиндеги оператор алынады. Бул жағдайда (1.9.9)-формуланың жәрдеминде матрицалық элементлерди есаплаў ушын пайдаланылатуғын функциялардың $\hat{Q}\psi_n = q_n\psi_n$ теңлемесин қанаатландырыўы ушын төмендегидей әпиўайыластырыў орын алады:

$$Q_{mn} = \langle\psi_m^{(q)}|\hat{Q}\psi_n^{(q)}\rangle\langle\psi_m^{(q)}|q_n\,\psi_n^{(q)}\rangle = q_n\varphi_{mn}. \tag{1.9.14}$$

Алынған нәтийжелер мынаны аңғартады: оператордың матрицасы өзиниң меншикли көринисинде диагоналлық оператор болып табылады, диагоналлық элементлер оператордың меншикли мәнислерине сәйкес келеди:

$$(Q_{mn}) = \begin{pmatrix} q_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & q_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & q_3 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}. \tag{1.9.15}$$

Егер $\hat{Q}$ операторы өзиниң меншикли көринисинде алынған болса (φ ҳәм *f* функциялары да *q*-көринисинде алынған) (1.9.8)-аңлатпа төмендегидей болып әпиўайыласады:

$$b_m = \sum_n Q_{mn}a_n = \sum_n q_{mn}\delta_{mn}\,a_n = q_m a_m. \tag{1.9.16}$$

Бул нәтийже мыналарды аңлатады: b_m коэффициентлери a_m коэффициентлерин өзиниң меншикли көринисиндеги операторды анықлайтуғын диагоналлық матрицаның сәйкес диагоналлық элементине көбейтиў арқалы алынады.

(1.9.1)-теңлемеде φ сыпатында $\hat{R}$ операторының $\psi_k^{(r)}$меншикли функциясын аламыз:

$$f = \hat{Q}\psi_k^{(r)}. \tag{1.9.17}$$

Бундай жағдайда (1.9.2) менен (1.9.5) ке сәйкес $a_n = \delta_{nk}$. Бул мәнисти (1.9.8)-аңлатпаға қойып

$$b_m = \sum_n Q_{mn} = Q_{mk}$$

формуласын аламыз. Демек (1.9.4) аңлатпасын есапқа алған ҳалда (1.9.17)-

функцияны былайынша жазыўға болады екен:

$$\hat{Q}\psi_k^{(r)} = \sum_m Q_{mk}^{(r)}\psi_m^{(r)} \qquad (1.9.18)$$

(биз матрицалық элементте оның r көринисинде есапланғанлығын көрсетиў ушын жоқарыда (r) индексин жаздық).

(1.9.18)-қатнасты былайынша трактовкалаў мүмкин: $|Q_{mk}|^2$ шамасы ҳалы $\hat{Q}\psi_k^{(r)}$ функциясы менен тәрийипленетуғын системаның $\psi_m^{(r)}$ ҳалында турыўының итималлығын анықлайды. Басқа сөзлер менен айтқанда $|Q_{mk}|^2$ шамасы $\hat{Q}$ операторы менен тәрийипленетуғын тәсирдиң астында системаның $\psi_k^{(r)}$ ҳалынан $\psi_m^{(r)}$ ҳалына өтиўиниң итималлығын береди. Усы жағдайға сәйкес Q_{mk} шамасын k ҳалынан m ҳалына өтиўдиң матрицалық элементи деп атайды.

Матрицаларға тийисли болған бир неше анықламаларды келтиремиз. Егер

$$\left(\tilde{A}\right)_{mn} = A_{mn} \qquad (1.9.19)$$

шәрти орынланатуғын болса, онда $\tilde{A}$ матрицасын A матрицасына қатнасы бойынша транспонирленген деп атайды.

Солай етип транспонирленген матрица дәслепки матрицадан қатарларды бағаналар менен алмастырыў жолы менен алынады.

Элементлери A матрицасының элементлери менен комплексли түйинлес болған A^* матрицасын A матрицасы менен комплексли түйинлес матрица деп атаймыз. Олар ушын төмендегидей теңлик орын алады:

$$(A^*)_{mn} = (A_{mn})^*. \qquad (1.9.20)$$

A матрицасына эрмитлик түйинлес матрица деп

$$A_{mn}^+ = \left(\tilde{A}_{mn}\right)^* = A_{mn}^* \qquad (1.9.21)$$

қағыйдасы менен анықланатуғын A^+ матрицасына айтамыз.

Демек A^+ матрицасы A матрицасынан транспонирлеў ҳәм комплекс түйинлеслеў операцияларын избе-из орынлаў жолы менен алынады екен. (1.9.21)-аңлатпа эрмитлик түйинлес операторды анықлайтуғын (1.8.7)-аңлатпаға сәйкес келеди.

Ең ақырында

$$A_{mn} = A_{mn}^* = A_{mn}^+ \qquad (1.9.22)$$

шәртин қанаатландыратуғын A_{mn} матрицасын өзи өзине түйинлес ямаса эрмитлик деп аталады [(1.8.9)- ҳәм (1.8.10)-аңлатпаларды салыстырыңыз]. Солай етип эрмитлик матрица жағдайында транспонирленген матрицаның элементлери дәслепки матрицаның комплексли түйинлес элементлерине сәйкес келеди.

Эрмитлик түйинлес матрицаның анықламасы болған (1.9.21)-аңлатпаның эрмитлик түйинлес оператордың (1.8.7)-анықламасына сәйкес келетуғынлығын көрсетемиз. (1.9.9)-, (1.8.7)- ҳәм (1.8.3)-аңлатпаларға сәйкес

$$A_{mn}^+ = \langle\psi_m|\psi_n\hat{A}^+\rangle = \langle\psi_n\hat{A}^+|\psi_m\rangle^* = \langle\psi_n|\hat{A}^+\psi_m\rangle^* = A_{nm}^*.$$

Демек дәслепки анықлама сыпатында (1.8.7)-анықламаны алып биз (1.9.21)-анықламаға келдик.

Еки функцияның скаляр көбеймеси болған $\langle\varphi|\psi\rangle$ көбеймесине эквивалент болған матрицалық аңлатпаны табамыз. Бул функцияларды базы бир $\hat{R}$ операторының меншикли функциялары бойынша қатарға жаямыз:

$$\varphi = \sum_m a_m\psi_m, \ \psi = \sum_m b_n\psi_n.$$

Бул аңлатпаларды (1.7.9)-аңлатпаға қойсақ

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\sum_m a_m\psi_m|\sum_m b_n\psi_n\rangle = \sum_{m,n} a_m^* b_n\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \tag{1.9.23}$$
$$= \sum_{m,n} a_m^* b_n\delta_{mn} = \sum_n a_m^* b_n$$

аңлатпаларын аламыз [(1.7.10)-аңлатпаға қараңыз].

r —көринисинде φ ҳәм ψ функциялары

$$\varphi\sim A = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \psi\sim B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

матрицалары менен анықланады. (1.9.23)-аңлатпаны алыў ушын A^+ ҳәм B матрицаларын бир бирине көбейтиў керек. Ҳақыйқатында да матрицаларды көбейтиў қағыйдасы бойынша

$$(a_1^* \quad a_2^* \quad \dots)\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_n a_n^*\, b_n.$$

Солай етип биз

$$\langle\varphi|\psi\rangle = A^+B \tag{1.9.24}$$

формуласына келдик. (1.7.7)-формуладағы интеграл белгисиниң астындағы φ комлексли түйинлес функцияға (1.9.24)-формуладағы эрмитлик түйинлес матрица сәйкес келеди.

Q шамасының орташа мәниси ушын матрицалық аңлатпаны табамыз. Бунның ушын биз қарап атырған ҳалдың пси-функциясын базы бир $\hat{R}$ операторының меншикли функциялары бойынша қатарға жаямыз. (яғный r —көринисиндеги пси-функциясын аламыз): $\psi = \sum c_k\psi_k^{(r)}$ ҳәм бул аңлатпаны (1.7.14)-формулаға қоямыз:

$$\langle q\rangle = \langle\sum_m c_m\psi_m|\hat{Q}\sum_n c_n\psi_n\rangle = \sum_{n,m} c_m^* c_n\,\langle\psi_m|\hat{Q}\psi_n\rangle.$$

$\langle\psi_m|\hat{Q}\psi_n\rangle$ аңлатпасы $\hat{Q}$ операторының r —көринисиндеги матрицалық элементи болып табылады. Демек

$$\langle q\rangle = \sum_{n,m} c_m^* Q_{mn} c_n \qquad (1.9.25)$$

формуласын аламыз. Бул формула (1.7.14)-формуланың матрицалық аналогы болып табылады.

Егер $\hat{Q}$ операторын меншикли көринисинде алсақ (бундай жағдайда пси-функцияны -көринисинде алыў керек болады) матрицалық элементлер $Q_{mn} = q_n\delta_{mn}$ ге тең болады [(1.9.14)-аңлатпаға қараңыз]. Сонлықтан (1.9.25)-формула (1.7.12)-формулаға сәйкес келетуғын

$$\langle q\rangle = \sum_{n,m} c_m^* q_n \delta_{mn}\, c_n = \sum_{n,m} c_m^* q_n\, c_m$$

формулаға айланады.

Ақырында $\hat{Q}\psi = q\psi$ теңлемесин матрицалық түрде шешиўге бола ма? деген мәселеге айқынлық киргиземиз [яғный –көринисиндеги Q_{mn} матрицасын билген ҳалда Q шамасының q_n меншикли мәнислерин ҳәм меншикли функцияларын (r–көринисиндеги) табыў менен шуғылланамыз]. Теңлемеге $\psi(x)$ тың орнына $\hat{R}$ операторының меншикли функциялары бойынша жайылған қатардың $\psi_n(x)$ функцияларын қоямыз:

$$\sum_n c_n \hat{Q}\psi_n(x) = q\sum_n c_n\psi_n(x).$$

Бул аңлатпаны $\psi_m(x)$ функцияларына скаляр көбейтемиз:

$$\sum_n c_n\langle\psi_m|\hat{Q}\psi_n\rangle = q\sum_n c_n\langle\psi_m|\psi_n\rangle$$

Шеп тәрептеги c_n көбейтиўшиси Q_{mn} шамаларының өзи болып табылады (Q_{mn} шамаларының –көринисиндеги $\hat{Q}$ операторының матрицалық элементи екенлигин аңғарамыз). Демек

$$\sum_n c_n Q_{mn} = q\sum_n c_n\delta_{mn} = qc_m. \qquad (1.9.26)$$

(1.9.26)-аңлатпада $m = 1,2,\dots$ мәнислерин қойыў жолы менен биз шексиз көп санлы $c_1, c_2, \dots$ белгисизлерине ийе сызықлы бир текли теңлемелер системасын аламыз (Q_{mn} шамалары берилген деп есаплаймыз):

$$\begin{gathered} (Q_{11} - q)c_1 + Q_{12}c_2 + \dots + Q_{1m}c_m + \dots = 0, \\ Q_{21}c_1 + (Q_{11} - q)c_2 + \dots + Q_{2m}c_m + \dots = 0, \\ \dots \\ Q_{m1}c_1 + Q_{m2}c_2 + \dots + (Q_{mm} - q)c_m + \dots = 0. \\ \dots \end{gathered} \qquad (1.9.27)$$

1-томның VII-қосымшасында егер анықлаўшысы нолге тең болса ғана бир текли сызықлы теңлемелер системасының нолге тең емес шешимлериниң болатуғынлығы атап өтилген еди:

$$\begin{vmatrix} Q_{11}-q & Q_{12} & \cdots & Q_{1m} & \cdots \\ Q_{21} & Q_{22}-q & \cdots & Q_{2m} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ Q_{mq} & Q_{m2} & \cdots & Q_{mm}-1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix} = 0. \qquad (1.9.28)$$

(1.9.28)-аңлатпа белгисиз q шамасының шексиз үлкен дәрежеси ушын жазылған аңлатпа болып табылады. Оны шекли болған N дана қатар ҳәм бағана ушын (1.9.28) түриндеги аңлатпаның $\mathrm{N} \to \infty$ шегиндеги аңлатпа сыпатында қараўға болады. Әлбетте (1.9.28)-аңлатпа бундай шек болған бар жағдайда ғана мәниске ийе бола алады.

(1.9.28)-теңлеме шексиз көп санлы $q_1, q_2, \dots, q_m, \dots$ түбирлерге ийе болады. Бул түбирлердиң барлығы $\psi(x)$ ты r −көринисинде (бундай көринисте Q_{mn} берилген) анықлайтуғын $c_1, c_2, \dots, c_m, \dots$ коэффициентлериниң ноллик емес болған мәнислери алынатуғын q шамаларының мәнислери болып табылады. Демек (1.9.28)-теңлемениң түбирлери Q шамасының меншикли мәнислери болып табылады екен.

(1.9.27)-системаға $q = q_1$ мәнисин қойып ҳәм оны c_n белгисизине қарата шешип $q = q_1$ теңлигине сәйкес келетуғын $\hat{Q}$ операторының меншикли функциясын анықлайды. (1.9.27)-теңлемелер системасына $q = q_2$ мәнисин қойып екинши меншикли функцияны анықлайтуғын коэффициентлер жыйнағын табамыз. Бундай операцияларды шексиз даўам ете бериў мүмкин. Солай етип Q_{mn} матрицасы менен берилген $\hat{Q}$ операторының меншикли мәнислери менен меншикли функцияларын табыў мәселеси шешиледи.

Егер Q_{mn} матрицасы өзиниң меншикли көринисинде анықланған болса матрицаның барлық диагоналлық емес элементлери нолге тең болады ҳәм (1.9.28)-теңлеме мынадай түрге ийе болады:

$$\begin{vmatrix} Q_{11}-q & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\ 0 & Q_{22}-q & \cdots & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & Q_{mm}-1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix} = 0.$$

Бул теңлемениң түбирлериниң $q_1 = Q_{11}$, $q_2 = Q_{22}, \dots$ шамаларына тең екенлиги айқын. Демек биз белгили болған нәтийжеге қайта келемиз: өзиниң меншикли көринисинде жазылған матрицаның диагоналлық элементлери бул шаманың меншикли мәнислерине тең.

Солай етип Q_{mn} матрицасын өзиниң меншикли көринисине алып келиў ушын (1.9.28)-теңлемедей теңлеме дүзиў ҳәм оның түбирлерин табыў керек. Диагоналлық түрге алып келинген матрицада бул түбирлер матрицаның элементлери болып табылады [(1.9.15-аңлатпаға қараңыз].

Коммутацияланатуғын операторлар меншикли функциялардың улыўмалық системасына ийе болады (бул ҳаққында келеси параграфта толығырақ айтылады). Демек олардың матрицаларын бир ўақытта диагоналлық түрге алып келиў мүмкин екен.

1-10. **Операторлар алгебрасы**

Сызықлы операторларды бир бирине қосыў ҳәм бир бирине көбейтиў мүмкин. Буннан былай биз сөзлерди жийи қайталамаў ушын «сызықлы» сөзин пайдаланбаймыз. Бирақ барлық ўақытта да сызықлы оператор нәзерде тутылады.

$\hat{A}$ ҳәм $\hat{B}$ операторларының суммасы $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$ деп

$$\hat{C}\varphi = (\hat{A} + \hat{B})\varphi = \hat{A}\varphi + \hat{B}\varphi \tag{1.10.1}$$

шәрти менен анықланатуғын операторға айтамыз. (1.10.1)-аңлатпаны (1.9.9)-аңлатпаға қойып $\hat{A}$, $\hat{B}$ ҳәм $\hat{C}$ операторлары арасындағы матрицалық формадағы байланысты анықлаймыз

$$C_{mn} = A_{nm} + B_{mn}. \tag{1.10.2}$$

Бул аңлатпа матрицаларды қосыў қағыйдасына сәйкес келеди [(M.25)-формулаға қараңыз].

$\hat{A}$ ҳәм $\hat{B}$ операторларының көбеймеси деп

$$\hat{K}\varphi = (\hat{A}\,\hat{B})\varphi = \hat{A}(\hat{B}\varphi) \tag{1.10.3}$$

шәртин қанаатландыратуғын $\hat{K} = \hat{A}\,\hat{B}$ операторына айтамыз ($\hat{K}\varphi$ функциясын табыў ушын дәслеп $\hat{B}\varphi$ функциясын табыў керек, буннан кейин бул табылған функцияға $\hat{A}$ операторы менен тәсир етемиз. (1.9.8)-формулаға сәйкес

$$K_{mn} = \langle\psi_m|\hat{A}\hat{B}\psi_n\rangle = \langle\psi_m|\hat{A}(\hat{B}\psi_n)\rangle. \tag{1.10.4}$$

Бул аңлатпада ψ_k арқалы $\hat{R}$ операторының меншикли функциясы белгиленген.

$\hat{B}\psi_n$ функциясын басқа қәлеген функция сыяқлы сол $\hat{R}$ операторының меншикли функциялары бойынша қатарға жайыўға болады (яғный $\hat{B}\psi_n = \sum c_k\psi_k$ түринде). c_k коэффициентлери ушын (1.7.11)-формула бойынша $c_k = \langle\psi_k|\hat{B}\psi_n\rangle$ шамасы алынады. Соңғы аңлатпа r-көринисиндеги $\hat{B}$ операторының B_{kn} матрицалық элементи болып табылады. Демек

$$\hat{B}\psi_n = \sum_k B_{kn}\psi_k. \tag{1.10.5}$$

(1.10.5)-аңлатпаны (1.10.4)-аңлатпаға қойыў мынаны береди

$$K_{mn} = \langle\psi_m|\hat{A}\sum_k B_{kn}\psi_k\rangle = \sum_k B_{kn}\langle\psi_m|\hat{A}\psi_k\rangle = \sum_k B_{kn}A_{mk}.$$

Ең ақырында көбейтиўшилердиң орынларын алмастырып

$$K_{mn} = \sum_k A_{mk}B_{kn} \tag{1.10.6}$$

формуласына келемиз. Бул формула матрицаларды бир бирине көбейтиў қағыйдасын қанаатландырады.

Операторлардың көбеймесиниң анықламасы бойынша оператордың квадраты $\hat{Q}^2$ дегенимизде $\hat{Q}$ операторы функциясына еки рет тәсир етиўди түсинемиз:

$$\hat{Q}^2\varphi = \hat{Q}(\hat{Q}\varphi). \tag{1.10.7}$$

Тап усындай жоллар менен оператордың жоқары дәрежелери де анықланады

$\widehat{K} = \widehat{A}\widehat{B}$ операторлардың көбеймеси менен транспонирленген операторды табамыз. Транспонирленген оператордың анықламасын ҳәм еки функцияның скаляр кобеймесиниң (1.7.8)-қәсийетин пайдаланып төмендегидей түрлендириўлер дизбегин жаза аламыз:

$$\langle \psi|\widetilde{A}\widetilde{B}\psi\rangle = \langle \left(\widetilde{B}\psi\right)^{*}|\widetilde{\widehat{A}}\psi^{*}\rangle = \langle \widetilde{\widehat{A}}\psi^{*}|(\widehat{B}\psi)^{*}\rangle =$$
$$\langle \left(\widetilde{\widehat{A}}\psi^{*}\right)^{*}|\widehat{B}\psi\rangle = \langle \psi^{*}|\widetilde{\widehat{B}}\left(\widetilde{\widehat{A}}\psi^{*}\right)\rangle \langle \psi^{*}|\widetilde{\widehat{B}}\widetilde{\widehat{A}}\psi^{*}\rangle.$$

Усының менен бир қатарда анықлама бойынша

$$\langle \psi|\widehat{K}\psi\rangle = \langle \psi^{*}|\widetilde{\widehat{K}}\,\psi^{*}\rangle.$$

Алынған нәтийжелерди бир бири менен салыстырсақ

$$\widetilde{\hat{A}\hat{B}} = \tilde{\hat{B}}\tilde{\hat{A}} \tag{1.10.8}$$

теңлигине ийе боламыз ҳәм еки оператордың көбеймесине транспонирленген оператор кери тәртипте алынған транспонирленген көбейтиўшилердиң көбеймесине тең екенлигин коремиз.

Транспонирленген матрицалар ушын да тап сондай қатнаслар орын алады. (1.10.6)-аңлатпаға сәйкес A ҳәм B матрицаларының AB көбеймесиниң матрицалық элементи $(AB)_{mn} = \sum_k A_{mk}B_{kn}$ формуласының жәрдеминде анықланады. (1.9.19)-аңлатпаны пайдаланып

$$(\widetilde{AB})_{mn} = (AB)_{mn} =$$
$$= \sum_k A_{nk}B_{km} = \sum_k \tilde{A}_{kn}\tilde{B}_{mk} = \sum_k \tilde{B}_{mk}\tilde{A}_{kn} = (\tilde{B}\tilde{A})_{mn}$$

аңлатпасын жазамыз. Буннан

$$\widetilde{AB} = \widetilde{A}\widetilde{B} \tag{1.10.9}$$

теңлигиниң орын алатуғынлығын көремиз

(1.8.6)-формулаға сәйкес

$$\left(\hat{A}\hat{B}\varphi\right)^{*} = \left(\hat{A}\hat{B}\right)^{*}\varphi^{*}.$$

Усының менен бир қатарда

$$\left(\hat{A}\hat{B}\varphi\right)^{*} = \left[\hat{A}(\hat{B}\varphi)\right]^{*} = \hat{A}^{*}\left(\hat{B}\varphi\right)^{*} = \hat{A}^{*}\hat{B}^{*}\varphi^{*}.$$

Бул аңлатпаларды бир бири менен салыстырыўдан

$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)^{*} = \hat{A}^{*}\hat{B}^{*}. \tag{1.10.10}$$

аңлатпасы алынады.

Енди $\hat{A}\hat{B}$ операторы менен эрмитлик түйинлес операторды табамыз. $\hat{A}\hat{B}$ операторын бир оператор деп қарап (1.8.5)-аңлатпаны

$$\langle \varphi|\hat{A}\hat{B}\psi\rangle = \langle \varphi(\hat{A}\hat{B})^{+}|\psi\rangle$$

түринде жазамыз. Егер $\hat{A}\hat{B}\varphi = \hat{A}(\hat{B}\varphi)$ екенлигин есапқа алсақ, онда

$$\langle\varphi|\hat{A}\hat{B}\psi\rangle = \langle\varphi\hat{A}^{+}|\hat{B}\psi\rangle = \langle(\varphi\hat{A}^{+})\hat{B}^{+}|\psi\rangle = \langle\varphi\hat{A}^{+}\hat{B}^{+}|\psi\rangle$$

аңлатпасын жазамыз. Бул аңлатпалардың екеўин де салыстырыў

$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)^{+} = \hat{A}^{+}\hat{B}^{+}. \tag{1.10.11}$$

қатнасын береди.

Алынған нәтийже мыналарды билдиреди: түйинлеслик пайда етилгенге шекем функцияға $\hat{B}$ операторы менен тәсир етеди, ал буннан кейин алынған нәтийжеге $\hat{A}$ операторы менен тәсир етеди. Түйинлеслик пайда етилгеннен кейин функцияға дәслеп $\hat{A}$ операторы менен тәсир етеди. Буннан кейин алынған нәтийжеге $\hat{B}$ операторы менен тәсир етиў керек. Демек түйинлеслик $\hat{A}$ ҳәм $\hat{B}$ операторларының тәсир етиўиниң избе-излигин өзгертеди екен. Бул жағдай көбейтиўшилердиң саны екиден артық болған жағдайлар ушын да дурыс.

$\hat{C}\hat{Q}$ түриндеги операторды аламыз. Бул жерде $\hat{C}$ операторы тек c санына көбейтиў болсын. (1.10.11)-аңлатпаға сәйкес $\left(\hat{C}\hat{Q}\right)^{*} = \hat{C}^{+}\hat{Q}^{+}$. 1-8 параграфта егер $\hat{C}^{+} = c$ болған жағдайда $\hat{C}^{+} = \hat{C}^{*}$ теңлигиниң орынланатуғынлығы көрсетилген еди. Усы жағдайды есапқа алған ҳалда

$$\left(\hat{C}\hat{Q}\right)^{+} = \hat{C}^{*}\hat{Q}^{+}. \tag{1.10.12}$$

Дара жағдайда

$$\left(i\hat{Q}\right)^{+} = -i\hat{Q}^{+}. \tag{1.10.13}$$

$\hat{A}$ ҳәм $\hat{B}$ операторларының көбеймесине эрмитлик түйинлес болған матрицаны табамыз. (1.9.21)-аңлатпаға сәйкес

$$(AB)^{+}_{mn} = (AB)^{*}_{nm} = \left(\sum_{k} A_{nk}B_{km}\right)^{*} = \sum_{k} A^{*}_{nk}B^{*}_{km} = \sum_{k} B^{+}_{mk}A^{+}_{kn}.$$

Алынған нәтийже

$$(\mathrm{AB})^{+} = \mathrm{B}^{+}\mathrm{A}^{+} \tag{1.10.14}$$

теңлигиниң орынланатуғынлығын аңғартады.

Демек еки матрицаның көбеймесине эрмитлик түйинлес матрица кери избе-изликте алынған эрмитлик түйинлес матрицалардың көбеймесинен турады екен.

Енди биз эрмитлик түйинлес операторды усы оператор тәсир ететуғын функцияның оң тәрепине қойып жазыўдың себебин түсиндириў мүмкиншилигине ийемиз. Буның ушын (1.9.8)-теңлемеге итибар беремиз. Бул теңлеме $\hat{Q}$ операторының тәсиринде φ функциясын f функциясына айландырыўды тәрийиплейди. Бул теңлемени былайынша жазамыз:

$$b_{m1} = \sum_n Q_{mn} a_{n1}. \tag{1.10.15}$$

«1» индекси a ҳәм b матрицаларының тек бир бирден бағанаға ийе екенлигин билдиреди. (1.10.15)-қатнасты былайынша жаза аламыз:

$$b = Qa. \tag{1.10.16}$$

Бул аңлатпада b, Q ҳәм a шамалары сәйкес матрицалар болып табылады. (1.10.16)-аңлатпа менен эрмитлик түйинлесликке ийе аңлатпаны жазамыз ҳәм (1.10.14) формуласынан пайдаланамыз:

$$b^+ = (Qa)^+ = a^+Q^+. \tag{1.10.17}$$

Матрицаларды эрмитлик түйинлеске айландырғанда бағаналар қатарлар менен алмастырылады, матрица элементлери өзлериниң комплексли түйинлеслери менен алмастырылады. [(1.9.21)-аңлатпаны қараңыз]. Демек b^+ ҳәм a^+ матрицалары да бир бирден қатарларға ийе болады. (1.10.7)-аңлатпадағы матрицаны кестелер түринде көрсетсек

$$(b_1^* b_2^* \dots\ b_m^* \dots) = (a_1^* a_2^* \dots\ a_n^* \dots) \begin{pmatrix} Q_{11}^* & Q_{21}^* & \cdots \\ Q_{12}^* & Q_{22}^* & \cdots \\ . & . & \cdots \\ . & . & \cdots \end{pmatrix} \tag{1.10.18}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпада Q_{mn}^* элементлерине ийе матрица $\hat{Q}^+$ операторын көрсетеди.

(1.10.17)- ҳәм (1.10.18)-аңлатпаларда Q^+ матрицасы a^+ матрицасының оң тәрепинде турғанда ғана дурыс нәтийжениң шығатуғынлығын аңсат көриўге болады (матрицаларды бир бирине көбейткенде қатардың бағанаға көбейтилетуғынлығын еске түсиремиз). Буннан Q^+ матрицасын усы матрица тәсир ететуғын функцияның оң тәрепине жазыўдың керек екенлиги келип шығады.

Улыўма айтқанда операторлардың көбеймеси коммутативлик емес:

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}.$$

Бул жағдайдың дурыс екенлигине $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$ ҳәм $\hat{B} = x$ операторларының мысалында исениўге болады. Ҳақыйқатында да:

$$(\hat{A}\hat{B})\varphi = \frac{\partial}{\partial x}(x\varphi) = x\frac{\partial \varphi}{\partial x} + \varphi. \tag{1.10.19}$$
$$(\hat{B}\hat{A})\varphi = x\frac{\partial \varphi}{\partial x}.$$

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \tag{1.10.20}$$

шәрти орынланатуғын операторларды бир бири менен коммутацияланатуғын операторлар деп атаймыз. Егер (1.10.20)-шәрт орынланбайтуғын болса операторлар бир бири менен коммутацияланбайдуғын операторлар деп есаплаймыз.

$$\hat{A}\hat{B} = -\hat{B}\hat{A} \tag{1.10.21}$$

шәрти орынланатуғны операторларды антикоммутацияланыўшы операторлар деп атаймыз.

$\hat{A}$ ҳәм $\hat{B}$ операторларынан пайда етилген $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ операторын бул оператордың коммутаторы деп атайды ҳәм $[\hat{A},\hat{B}]$ арқалы белгилейди. Солай етип

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \tag{1.10.22}$$

(1.10.19)-аңлатпаға сәйкес

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, x\right] = \frac{\partial}{\partial x}x - x\frac{\partial}{\partial x} = 1.$$

Бул $\left[\frac{\partial}{\partial x}, x\right]$ операторы менен базы бир φ функциясына тәсир еткенимизде биз қайтадан сол φ функциясын алатуғынымызды аңлатады. Функцияны өзгериссиз қалдыратуғын операторды бирлик оператор деп атаймыз. Демек $\frac{\partial}{\partial x}$ ҳәм x операторларының коммутаторы бирлик операторға тең екен.

Коммутацияланатуғын операторлардың коммутаторы нолге тең.

Квантлық механикада операторлардың жәрдеминде физикалық шамалар көрсетиледи (сүўретленеди). Енди операторларды қосыў менен көбейтиў қағыйдаларының физикалық шамларды қосыў ҳәм көбейтиў менен қалай сәйкес келетуғынлығын анықлаймыз.

Мейли физикалық еки Q ҳәм R шамалары бир ўақытта анық мәнислерге ийе болатуғны болсын. Q шамасы q_1 мәнисине, ал R шамасы r_n мәнисине ийе болатуғын ҳалдың пси-функциясы бир ўақытта еки теңлемени қанаатландырыўы керек:

$$\hat{Q}\psi_n = q_n\psi_n, \tag{1.10.23}$$

$$\hat{R}\psi_n = r_n\psi_n. \tag{1.10.24}$$

Демек бул жағдайда пси-функциясы еки оператордың да меншикли функциясы болыўы керек. Солай етип бир ўақытта өлшенетуғын шамалардың операторлары улыўмалық меншикли функцияларға ийе болады екен. (1.10.23) ҳәм (1.10.24) теңлемелерди қосып

$$(\hat{Q} + \hat{R})\psi_n = (q_n + r_n)\psi_n \tag{1.10.25}$$

аңлатпасын аламыз. Демек $\hat{Q} + \hat{R}$ операторының меншикли мәнислери сол $\hat{Q}$ ҳәм $\hat{R}$ операторларының меншикли мәнислериниң қосындысына тең болады екен. Демек Q ҳәм R шамаларының қосындысы дегенимизде меншикли мәнислери қосылыўшы шамалардың меншикли мәнислериниң қосындысына тең болған $Q + R$ шамасын түсиниўимиз керек екен.

Бир ўақытта өлшенетуғын еки Q ҳәм R шамаларының көбеймеси деп меншикли мәнислери көбейтилетуғын шамалардың меншикли мәнислериниң көбеймесине тең QR шамасына айтамыз. Усыған байланыслы Q ҳәм R шамаларының көбеймесиниң операторын $\hat{K}$ арқалы белгилеп

$$\hat{K}\psi_n = q_n r_n\psi_n \tag{1.10.26}$$

аңлатпасын жазыў мүмкин.

(1.10.24)-теңлемеге $\widehat{Q}$ операторы менен тәсир етемиз ҳәм бул жағдайда (1.10.23)-теңлемени итибарға аламыз:

$$\widehat{Q}\widehat{R}\psi_n = r_n\widehat{Q}\psi_n = r_n q_n \psi_n = q_n r_n \psi_n. \qquad (1.10.27)$$

Алынған нәтийжени (1.10.26)-аңлатпа менен салыстырыў (1.10.3)-қағыйдаға сәйкес келетуғын еки шаманың операторларының көбеймеси ушын $\widehat{K} = \widehat{Q}\widehat{R}$ аңлатпасын береди.

Жоқарыда айтылғанлардан Q шамасының квадратына $\hat{Q}^2$ операторының жуўап беретуғынлығы келип шығады. Бул аңлатпада $\hat{Q}$ арқалы Q шамасының операторы белгиленген. Тап сол сыяқлы Q^s шамасына $\hat{Q}^s$ операторының сәйкес келетуғынлығын анықлаўымыз мүмкин.

(1.10.23)-теңлемеге $\widehat{R}$ операторы менен тәсир етип (1.10.24)-аңлатпаны есапқа алып

$$\widehat{R}\widehat{Q}\psi_n = r_n\widehat{R}\psi_n = q_n r_n \psi_n.$$

теңлигин аламыз. (1.10.27)-аңлатпа менен салыстырыў $\widehat{Q}\widehat{R} = \widehat{R}\widehat{Q}$ екенлигин дәлиллейди, яғный $\widehat{Q}$ ҳәм $\widehat{R}$ операторлары бир бири менен коммутацияланады екен.

Алынған нәтийжелерден төмендегише жуўмақлар шығарыў мүмкин.

Егер еки физикалық шама бир ўақытта анық мәнислерге ийе болатуғын болса, онда:

1) олардың операторлары улыўмалық меншикли функцияларға ийе болады,

2) олардың операторлары бир бири менен коммутацияланады.

1)- ҳәм 2)- тастыйықлаўлар бир биринен келип шығады. Биз жоқарыда 1)-тастыйықлаўдан 2)-тастыйықлаўдың келип шығатуғынлығын көрсеткен едик. Енди 2)-тастыйықлаўдан 1)-тастыйықлаўдың келип шығатуғынлығын дәлиллеймиз.

Мейли $\widehat{A}$ ҳәм $\widehat{B}$ операторлары бир бири менен коммутацияланатуғын болсын. Олардың меншикли функциялары

$$A\psi_n^{(a)} = a_n\psi_n^{(a)}, \qquad (1.10.28)$$

$$B\psi_n^{(b)} = b_n\psi_n^{(b)} \qquad (1.10.29)$$

теңлемелерин қанаатландырады. (1.10.28)-теңлемеге $\widehat{B}$ операторы менен тәсир етемиз ҳәм $\widehat{A}$ ҳәм $\widehat{B}$ операторларының орынларын алмастырыўға болатуғынлығынан пайдаланамыз:

$$\hat{B}\hat{A}\psi_n^{(a)} = a_n\hat{B}\psi_n^{(a)} \to \hat{A}\left[\hat{B}\psi_n^{(a)}\right] = a_n\left[\hat{B}\psi_n^{(a)}\right].$$

Алынған нәтийже $[\hat{B}\psi_n^{(a)}]$ функциясының турақлы c көбейтиўши дәллигинде $\widehat{A}$ операторының a_n меншикли мәнисине сәйкес келетуғын меншикли функциясына сәйкес келетуғынлығын көрсетеди. Яғный

$$\hat{B}\psi_n^{(a)} = c\psi_n^{(a)}.$$

Алынған нәтийжеден өз гезегинде $\psi_n^{(a)}$ функциясының $\hat{B}$ операторының меншикли функциясы екенлиги келип шығады. Соның менен бирге $c = b_n$. Солай етип $\widehat{A}$ операторының қәлеген меншикли функциясы болған $\psi_n^{(a)}$ функциясы $\hat{B}$ операторынында меншикли функциясы болады екен. (1.10.29)-теңлемеге $\widehat{A}$

операторы менен тәсир етип ҳәм жоқарыдағы таллаўларымыздай таллаўлардан кейин биз $\hat{B}$ операторының қәлеген меншикли функциясының $\widehat{\mathrm{A}}$ операторының да меншикли функциясы болатуғынлығына ийе боламыз. Солай етип коммутацияланатуғын операторлардың улыўмалық меншикли функциялардың системасына ийе болатуғынлығын дәлилледик.

Параграфтың ақырында биз физикалық шамаларды сәўлелендиретуғын матрицалар ҳаққында бир неше ескертиўлер келтиремиз. Биз жоқарыда бир ўақытта өлшенетуғын Q ҳәм R физикалық шамаларына $\widehat{\mathrm{Q}}\widehat{\mathrm{R}}$ операторының сәйкес келетуғынлығын көрдик. Усыған сәйкес бул шамалардың көбеймесиниң матрицасы $\widehat{\mathrm{Q}}\widehat{\mathrm{R}}$ операторының матрицасы болып табылады. Бул матрица (1.10.6)-аңлатпаның жәрдеминде анықланады:

$$(\mathrm{QR})_{mn} = \sum_{k} \mathrm{Q}_{mk}\mathrm{R}_{kn}. \tag{1.10.30}$$

Алынған нәтийже еки шаманың көбеймесиниң матрицасының көбейтилетуғын шамалардың матрицаларының көбеймесине тең екенлигин көрсетеди. Усыған сәйкес Q шамасының квадратының матрицасы

$$(\mathrm{Q}^2)_{mn} = \sum_{k} \mathrm{Q}_{mk}\mathrm{Q}_{kn} \tag{1.10.31}$$

аңлатпасының жәрдеминде есапланады.

1-11. Анықсызлық қатнаслары

$\widehat{\mathrm{A}}$ ҳәм $\widehat{\mathrm{B}}$ операторлары бир бири менен коммутацияланбайтуғын болса, онда усындай операторларға сәйкес келетуғын физикалық шамалар бир ўақытта анық мәнислерге ийе бола алмайды. Усындай шамалардың анықсызлықларының бир бири менен қандай қатнасқа ийе екенлигин анықлаўға тырысамыз.

Өлшеўлер нәтийжелериниң пытыраңқылығының характеристикасы сыпатында айырым өлшеўлердиң нәтийжелериниң бул шаманың орташа мәнисинен орташа квадратлық аўысыўын аламыз. Айырым өлшеўлердеги аўысыў

$$\Delta a = a - \langle a \rangle.$$

Бул шама ушын оператор жазамыз

$$\widehat{\Delta\mathrm{A}} = \widehat{\mathrm{A}} - \langle \mathrm{a} \rangle. \tag{1.11.1}$$

($\langle \mathrm{a} \rangle$ шамасына сәйкес келетуғын оператор әдеттеги сан болып табылады).

Анықламасы бойынша орташа квадратлық аўысыў $\sqrt{\langle (\Delta a)^2 \rangle}$ шамасына тең. Демек орташа квадратлық аўысыўды табыў мәселеси $\langle (\Delta a)^2 \rangle$ шамасын анықлаўға алып келинеди екен. Егер Δa шамасы ушын $\widehat{\Delta\mathrm{A}}$ операторы жазылатуғын болса, онда $(\Delta a)^2$ шамасы ушын $\left(\widehat{\Delta\mathrm{A}}\right)^2$ операторының жазылыўы керек (1-10 параграфқа қараңыз). Орташа мәнислерди есаплаўдың улыўмалық қағыйдасы бойынша

$$\langle (\Delta a)^2 \rangle = \int \psi^* \left(\widehat{\Delta A}\right)^2 \psi \, dV. \tag{1.11.2}$$

Тап сол сыяқлы

$$\langle(\Delta b)^2\rangle = \int \psi^* \left(\widehat{\Delta B}\right)^2 \psi \, dV. \tag{1.11.3}$$

Енди η ҳақыйқый параметринен ғәрезли болған

$$\mathcal{I}(\eta) = \int \left|\left(\eta\widehat{\Delta A} - i\widehat{\Delta B}\right)\psi\right|^2 dV \geq 0 \tag{1.11.4}$$

жәрдемши интегралын қараймыз. Бул интегралдың терис мәниске ийе болмайтуғынлығы анық. Оны төмендегише жазамыз:

$$\mathcal{I}(\eta) = \int \left[\left(\eta\widehat{\Delta A} - i\widehat{\Delta B}\right)\psi\right]\left[\left(\eta\widehat{\Delta A}^* - i\widehat{\Delta B}^*\right)\psi^*\right] dV =$$
$$= \int \left(\eta\widehat{\Delta A}\psi - i\widehat{\Delta B}\psi\right)\left(\eta\widehat{\Delta A}^*\psi^* - i\widehat{\Delta B}^*\psi^*\right) dV.$$

Интеграл белгисиниң астындағы қаўсырмаларды ашамыз ҳәм интегралды

$$\mathcal{I}(\eta) = \eta^2 \int (\widehat{\Delta A}\psi)\widehat{\Delta A}^*\psi^* dV + i\eta \int \left(\widehat{\Delta A}\psi\right)\widehat{\Delta B}^*\psi^* dV -$$
$$-i\eta \int \left(\widehat{\Delta B}\psi\right)\widehat{\Delta A}^*\psi^* dV + \int (\widehat{\Delta B}\psi)\widehat{\Delta B}^*\psi^* dV$$

түринде жазамыз.

Операторлардың өзи өзине түйинлес екенлигинен пайдаланып $\left(\widehat{\Delta A}\psi\right)$ ны (1.8.13)-аңлатпада қатнасатуғын функциялардың бири сыпатында қарап ҳәр бир интегралда (1.8.13) түрлендириўин әмелге асырамыз. Усының менен бирге екинши ҳәм үшинши интегралларды байланыстырамыз. Нәтийжеде

$$\mathcal{I}(\eta) = \eta^2 \int \psi^* \left(\widehat{\Delta A}\right)^2 \psi dV - i\eta \int \psi^* \left(\widehat{\Delta A}\widehat{\Delta B} - \widehat{\Delta B}\widehat{\Delta A}\right)\psi dV +$$
$$+ \int \psi^* \left(\widehat{\Delta B}\right)^2 \psi \, dV \geq 0 \tag{1.11.5}$$

формуласына келемиз. Биринши ҳәм үшинши интеграллар сәйкес $\langle(\Delta a)^2\rangle$ ҳәм $\langle(\Delta b)^2\rangle$ шамаларына тең [(1.11.2)- ҳәм (1.11.3)-аңлатпаларға қараңыз]. Екинши интеграл белгиси астында $\widehat{\Delta A}$ ҳәм $\widehat{\Delta B}$ операторларының коммутаторы тур. (1.11.5)-аңлатпадағы жормал бирликтен қутылыў ушын бул коммутаторды $i\widehat{K}$ арқалы белгилеймиз, яғный

$$\left[\widehat{\Delta A}, \widehat{\Delta B}\right] = \Delta\hat{A}\,\Delta\hat{B} - \Delta\hat{B}\,\Delta\hat{A} = i\widehat{K} \tag{1.11.6}$$

белгилеўин киргиземиз.

(1.11.6)-аңлатпаға $\widehat{\Delta A}$ ушын жазылған (1.11.1)-аңлатпаны ҳәм тап сол сыяқлы $\widehat{\Delta B}$ операторы ушын жазылған аңлатпаны қоямыз:

$$\left(\hat{A} - \langle a\rangle\right)\left(\hat{B} - \langle b\rangle\right) - \left(\hat{B} - \langle b\rangle\right)\left(\hat{A} - \langle a\rangle\right) = i\widehat{K}.$$

Қурамалы емес түрлендириўлерден кейин шеп тәрепи $\hat{A}$ ҳәм $\hat{B}$ операторларының коммутаторына айланады. Демек

$$[\widehat{\Delta A}, \widehat{\Delta B}] = [\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{K}. \qquad (1.11.7)$$

Сонлықтан $i\hat{K}$ шамасын $\hat{A}$ ҳәм $\hat{B}$ операторларының коммутаторы деп есаплаўға болады. (1.11.6)-белгилеўден пайдаланып (1.11.5)-аңлатпаның екинши ағзасын

$$-i\eta \int \psi^* (i\hat{K})\, \psi dV = \eta \int \psi^* \hat{K} \psi dV = \eta \langle k \rangle$$

түринде жазыўға болады. Бул аңлатпада $\langle k \rangle$ арқалы $\hat{R}$ операторының жәрдеминде сүўретленетуғын физикалық шаманың орташа мәниси белгиленген.

Жоқарыда айтылғанлардың барлығын нәзерде тутып (1.11.5)-формуланы былайынша жазыўға болады:

$$\mathcal{I}(\eta) = \eta^2 \langle (\Delta a)^2 \rangle + \eta \langle k \rangle + \langle (\Delta b)^2 \rangle \geq 0. \qquad (1.11.8)$$

Енди $\alpha x^2 + \beta x + \gamma$ үш ағзалысының $\alpha > 0$ шәрти орынланғанда x шамасы ҳеш қашан терис мәнислерге ийе болмайтуғын жағдай ушын коэффициентлер арасындағы қатнасты изертлеймиз. Буның ушын

$$\alpha x^2 + \beta x + \gamma = \alpha \left(x + \frac{\beta}{2\alpha} \right)^2 + \gamma - \beta^2/4\alpha$$

түрлендириўин жүргиземиз. Бул аңлатпаның минималлық мәниси $\gamma - \beta^2/4\alpha$ шамасына тең (бул мәниси қаўсырманың ишиндеги аңлатпа нолге айланатуғын x тың мәнисинде алынады). Демек үш ағзалының терис емес мәнислери ушын

$$\gamma - \beta^2/4\alpha \geq 0 \text{ ямаса } \alpha\gamma \geq \beta^2/4$$

теңсизликлериниң орынланыўы шәрт. Алынған нәтийжени (1.11.8) үш ағзалысына қолланып

$$\langle (\Delta a)^2 \rangle \langle (\Delta b)^2 \rangle \geq \langle k \rangle^2/4$$

шәртине келемиз. Буннан

$$\sqrt{\langle (\Delta a)^2 \rangle} \sqrt{\langle (\Delta b)^2 \rangle} \geq \langle k \rangle/2 \qquad (1.11.9)$$

теңлигин аламыз.

(1.11.9)-аңлатпа анықсызлық қатнасы деп аталады. Бул аңлатпадан бизге белгили болған нәтийже келип шығады: Егер $\hat{A}$ ҳәм $\hat{B}$ операторлары бир бири менен коммутацияланатуғын болса, яғный $\hat{K} = 0$ болса, онда A ҳәм B шамалары бир ўақытта анық мәнислерге ийе бола алады.

1-12. Үзликсиз спектр

Егер $\hat{Q}$ операторы q меншикли мәнислериниң үзликсиз спектрине ийе болатуғын болса, онда меншикли функцияларды номерлеўге болмайды. Бул функцияларды бир биринен айырыў ушын функцияның символына индекс сыпатында усы функция сәйкес келетуғын q меншикли мәнисин жазамыз. Мысалы ψ_q ҳәм тағы басқалар.

(1.7.4)-формуладан айырма соннан ибарат, ықтыярлы ψ функциясын оператордың меншикли функциялары бойынша жайылған қатар интеграл түрине ийе болады:

$$\psi(x) = \int c(q)\psi_q(x)dq. \tag{1.12.1}$$

Интеграллаў Q шамасы ийелей алатуғын мәнислердиң барлық областлары бойынша жүргизиледи. c(q) коэффицинети q шамасының базы бир функциясы болып, ол пси-функцияны q көринисинде анықлайды.

(1.8.13)-формуладан кейин жазылған формулалардағы ψ_m функциясын $\psi_{q'}$ менен, ψ_n функциясын $\psi_{q''}$ менен, усыған сәйкес q_m шамасын q', ал q_n шамасын q'' пенен алмастырып

$$\langle\psi_{q'}|\psi_{q''}\rangle = \int \psi_{q'}^{*}\psi_{q''}dV = 0 \tag{1.12.2}$$

формуласын аламыз. Бул формуладан тутас спектрдиң меншикли функцияларының дискрет спектрдиң меншикли функциялары сыяқлы ортогоналлық екенлигин көремиз.

Үзликсиз спектрге ийе оператордың меншикли функцияларының нормировкасы мәселеси қурамалы мәселелердиң бири болып табылады. Бундай функциялар ушын $\int \psi_q^{*}\psi_q dV$ интегралы барлық ўақытта тарқалыўшы болып шығады (яғный шексизликке айланады).

1-15 параграфта бул жағдайды импульс операторының меншикли функциялары мысалында көрсетемиз.

Үзликсиз спектрге тийисли функциялардың нормировкасын Дирактың дельта-функциясының жәрдеминде әмелге асырады.

III бап

ФИЗИКАЛЫҚ ШАМАЛАРДЫҢ МЕНШИКЛИ МӘНИСЛЕРИ ҲӘМ МЕНШИКЛИ ФУКЦИЯЛАРЫ

1-13. Физикалық шамалардың операторлары

(1.4.3)- ҳәм (1.4.4)-формулаларды (1.7.14)-аңлатпа менен салыстырып координаталардың қәлегенининң операторының усы координатаға көбейтиў екенлигин көремиз:

$$x = \hat{x}, \quad y = \hat{y}, \quad z = \hat{z}. \qquad (1.13.1)$$

Тап сол сыяқлы $U(x, y, z)$ потенциаллық энергия операторының тәсири де тек усы функцияға көбейтиўден ибарат болады:

$$\widehat{U} = U. \qquad (1.13.2)$$

(1.7.3)-теңлемеге тийкарланып және де бир физикалық шаманың операторының түрин табыўға болады. Ҳақыйқатында да толық энергия операторын $\widehat{H}$ арқалы белгилеп

$$\widehat{H}\psi = E\psi \qquad (1.13.3)$$

теңлемесин жазамыз[11]. Бул теңлемени (1.5.7)-теңлеме менен салыстырып

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U \qquad (1.13.4)$$

екенлигине ийе боламыз. Бул операторды гамильтониан деп атайды.

Биз жоқарыда U шамасының потенциал энергия операторы $\widehat{U}$ екенлигин көрген едик. $\widehat{H}$ операторы болса толық энергия операторы болып табылады. $H = T + U$ классикалық аңлатпасына сәйкес кинетикалық энергия операторының

$$\widehat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \qquad (1.13.5)$$

түрине ийе екенлигин көремиз. Бул аңлатпаны бөлекшениң кинетикалық энергиясы T менен импульси $\mathbf{p}$ арасындағы байланысты сәўлелендиретуғын

$$T = \frac{\mathrm{p}^2}{2m}$$

аңлатпа менен салыстырып импульс операторы болған $\widehat{\mathbf{p}}$ шамасын $\hbar\nabla$ шамасына (∇ арқалы Гамильтон операторы белгиленген) деп болжаўға болады. (1.13.5)-оператордың аңлатпасындағы минус белгисин $\widehat{\mathbf{p}}$ шамасына плюс ямаса минус

---

[11]Квантлық механикада энергияны тезлик арқалы емес, ал импульс арқалы аңлатады. Аналитикалық механикада импульс арқалы аңлатылған энергияны Гамильтон функциясы деп атайды ҳәм H арқалы белгилейди.

белгиси менен алынған жормал бирликти киргизиў менен алыўға болады. Классикалық механикаға шеклик өтиўдиң жәрдеминде i көбейтиўшисин минус белгиси менен алыўдың керек екенлигин көрсетиўге болады. Демек

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \tag{1.13.6}$$

Усыған сәйкес импульстиң қураўшыларының операторлары

$$\hat{p}_x = ih\frac{\partial}{\partial x}, \qquad \hat{p}_y = ih\frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = ih\frac{\partial}{\partial z}. \tag{1.13.7}$$

түрине ийе болады.

Биз барлық ўақытта да квантлық механикада қабыл етилген қағыйда бойынша жүрдик: операторлар арасындағы қатнаслар классикалық физикадағы бақланатуғын сәйкес физикалық шамалар арасындағы қатнаслардай болыўы керек. Бул қағыйда 1-2 параграфта гәп етилген сәйкеслик принципиниң нәтийжеси болып табылады.

$\hat{\mathbf{p}}$ ҳәм $\hat{\mathbf{r}}$ операторларының қандай түрге ийе болатуғынлығын билгеннен кейин [(1.13.1)-формулаға сәйкес $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$] импульс моменти $\mathbf{M}$ ушын операторды жазыўымызға болады. Оны қозғалыс муғдарының моменти операторы ямаса мүйешлик момент операторы деп атайды. Биз көбинесе мүйешлик момент операторы атамасынан пайдаланамыз. Классикалық механикада M = [rp]. Демек

$$\hat{\mathbf{M}} = [\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}] = [\mathbf{r}, -i\hbar\nabla] = i\hbar[\mathbf{r}\nabla]. \tag{1.13.8}$$

Векторлық көбеймени анықлағыш түринде жазамыз:

$$\hat{\mathbf{M}} = -i\hbar\begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ x & y & z \\ \dfrac{\partial}{\partial x} & \dfrac{\partial}{\partial y} & \dfrac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}.$$

Буннан мүйешлик момент қураўшылары операторлары ушын төмендегидей аңлатпа алыўға болады:

$$\begin{aligned} \hat{M}_x &= -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \\ \hat{M}_z &= -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \\ \hat{M}_x &= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \end{aligned} \tag{1.13.9}$$

Мүйешлик моменттиң квадраты операторы қураўшылары ушын жазылған операторлардың аңлатпалары арқалы анықланады:

$$\hat{\mathbf{M}}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2. \tag{1.13.10}$$

Көпшилик жағдайларда мүйешлик момент операторының квадраты ҳәм қураўшылары ушын сфералық координаталарды пайдаланған қолайлы болады. Ҳәр қыйлы координаталар арасындағы байланысларды сәўлелендиретуғын формулалар тийкарында

$$\widehat{\boldsymbol{M}}_{\boldsymbol{x}} = -\boldsymbol{i}\hbar\frac{\boldsymbol{\partial}}{\boldsymbol{\partial\varphi}}, \qquad (1.13.11)$$

$$\widehat{\mathbf{M}}^2 = -\hbar^2\left\{\frac{1}{sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}(sin\vartheta)\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\} \qquad (1.13.12)$$

формулаларын жаза аламыз.

(1.13.12)-формуладағы фигуралық қаўсырма ишинде турған аңлатпа сфералық координаталарда алынған Лаплас операторының мүйешлик бөлеги болып табылады. Бул аңлатпаны $\Delta_{\vartheta,\varphi}$ арқалы аңлатып

$$\widehat{\mathbf{M}}^2 = -\hbar^2\Delta_{\vartheta,\varphi} \qquad (1.13.13)$$

аңлатпасын жазыўға болады.

Координата $\mathbf{r}$ диң (1.13.11) — (1.13.13) формулаларының ҳеш қайсысына да кирмейтуғынлығын аңғарамыз.

Мүйешлик момент операторы $\delta\varphi$ шексиз киши мүйешине бурыў операторы менен тығыз байланысқан. Бундай бурыўға еки түрли трактовка бериў мүмкин. Бириншиден, координаталар системасы қозғалмайды, ал координата басы әтирапында биз қарап атырған бөлекшелер системасы бурылады. Екиншиден бөлекшелер системасы қозғалыссыз қалады, ал координаталар системасы бурылады (K системасы K' системасына өтеди). Еки жағдайда да бөлекшелердиң координаталары өзгереди, яғный $\mathbf{r} \to \mathbf{r}'$ түрлендириўи орын алады. Координаталардың бирдей өзгерисин алыў ушын биз жоқарыда қараған еки жағдайда бурыўларды қарама-қарсы бағытта әмелге асырыў керек.

Координата көшерлерин бурғанда координаталардың өзгерислерин координаталарды түрлендириў операторы болған $\hat{g}$ операторының тәсири деп қараў мүмкин:

$$\hat{\mathbf{r}}' = \hat{g}\hat{\mathbf{r}}. \qquad (1.13.14)$$

Кери түрлендириў

$$\hat{\mathbf{r}} = \widehat{g^{-1}}\hat{\mathbf{r}}' \qquad (1.13.15)$$

түрине ийе болады.

Бөлекшелер системасын бурғанда координаталардың өзгерислерин $\hat{G}$ операторының тәсири деп қарай аламыз:

$$\hat{\mathbf{r}}' = \hat{G}\hat{\mathbf{r}}. \qquad (1.13.16)$$

Бундай жағдайда

$$\hat{G} = \widehat{g^{-1}} \qquad (1.13.17)$$

екенлиги өз-өзинен айқын ($\hat{g}$ ҳәм $\hat{G}$ операторларын избе-из қолланғанда бөлекшелердиң координаталары өзгериссиз қалады, яғный $\hat{G}\hat{g} = 1$).

(1.13.14)- ҳәм (1.13.16)-түрлендириўлер менен байланыслы болған пси-функциясының өзгерисин қараймыз.

Бөлекшелер системасын шексиз киши $\boldsymbol{\delta\varphi}$ мүйешине бурғанда (әпиўайылық ушын биз системаны тек бир бөлекшеден турады деп есаплайық) бөлекшениң радиус-векторы $\delta r = [\delta\boldsymbol{\varphi}, r]$ өсимин алады. Демек

$$\mathbf{r}' = \hat{G}\mathbf{r} = \mathbf{r} + \delta\mathbf{r} = \mathbf{r} + [\delta\mathbf{r}, \mathbf{r}]. \qquad (1.13.18)$$

Пси-функцияның сәйкес өзгерисин оған $\hat{R}_G$ операторының тәсири сыпатында қараўға болады:

$$\psi(\mathbf{r}') = \hat{R}_G\psi(\mathbf{r}). \qquad (1.13.19)$$

(G индекси координатаның өзгериси бөлекшелер системасының бурылыўы менен байланысқан екенлигин көрсетеди). (1.13.18)-аңлатпаны есапқа алып

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) + \nabla\psi(\mathbf{r})\delta\mathbf{r} =$$
$$= \psi(\mathbf{r}) + \{[\delta\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{r}]\nabla\}\psi(\mathbf{r})$$

түринде жазыўға болады. Фигуралық қаўсырма ишинде турған векторлардың аралас көбеймеси ушын цикллық орын алмастырыўды әмелге асырып

$$\psi(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}) + \{[\delta\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{r}]\nabla\}\psi(\mathbf{r}) = (1 + \delta\boldsymbol{\varphi}[\mathbf{r}\nabla])\psi(\mathbf{r}) =$$
$$= \{1 + (i/\hbar)\delta\boldsymbol{\varphi}\hat{\mathbf{M}}\}\psi(\mathbf{r})$$

аңлатпасын аламыз [(1.13.8)-аңлатпаға қараңыз]. (1.13.19)-аңлатпа менен салыстырыў

$$\hat{R}_G = 1 + \left(\frac{i}{\hbar}\right)\delta\boldsymbol{\varphi}\hat{\mathbf{M}} \qquad (1.13.20)$$

аңлатпасын береди.

Енди системаны $\delta\varphi$ мүйешке бурғанда пси-функцияны түрлендириў операторын табамыз. Бундай операторды биз жоқарыда $\hat{R}_g$ арқалы белгилейик. Координаталар системасын бурыў системаның ҳалын өзгертпейтуғын болғанлықтан жаңа координаталардың жаңа функциясы гөне координаталардың гөне функциясындай болады, яғный

$$\psi'(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}). \qquad (1.13.21)$$

Пси-функцияны бурыўды түрлендиретуғын бурыў операторы

$$\psi'(\mathbf{r}') = \hat{R}_g\psi(\mathbf{r}')$$

теңлигинен анықланады (функцияның аргументин белгилеўдиң парқы жоқ, $\mathbf{r}'$ шамасының орнына шеп тәрепке де, оң тәрепке де $\mathbf{r}$ шамасын қойыўға болады). Буннан (1.13.21)-аңлатпаны дыққатқа алып

$$\psi(\mathbf{r}) = \hat{R}_g\psi(\mathbf{r}') \qquad (1.13.22)$$

аңлатпасын аламыз. (1.13.15)-аңлатпаны есапқа алып бул қатнастың түрин былайынша өзгертемиз:

$$\psi(\mathbf{r}') = \hat{R}_{g^{-1}}\psi(\mathbf{r})$$

(1.13.19)-аңлатпа менен салыстырыў $\hat{R}_{g^{-1}} = \hat{R}_G$ екенлигин көрсетеди. Бул жағдай (1.13.17)-аңлатпаға сәйкес келеди.

(1.13.20)-қатнастың жәрдеминде мүйешлик момент операторына (18.8)-анықламаға салыстырғанда буннан да улыўмалырақ анықлама бериўге болады. Бул улыўмалық анықлама «орбиталық» қозғалыс ҳаққындағы көз-қарас пенен пүткиллей байланыслы емес. Сонлықтан бул жаңа анықламаны буннан да қурамалы жағдайларға, мысалы спинлик момент ушын тарқатылыўы мүмкин

Классикалық формулалар менен уқсаслығына байланыслы барлық физикалық шамалар ушын операторларды ала бериўге болмайды. Мысалы спин сыяқлы шама бар. Бундай шаманың классикалық аналогы жоқ. Бундай шаманың операторлары кейинирек келтирилип шығылады.

1-14. **Физикалық шамалардың операторларының коммутациясының қағыйдалары**

Қәлеген еки координатаның операторларының бир бири менен коммутацияланатуғынлығы өз-өзинен түсиникли ($\hat{x}\hat{y} - \hat{y}\hat{x} = 0$ ҳәм басқалар). Демек бөлекшениң барлық үш координатасы бир ўақытта анық мәнислерге ийе болады екен. Тап усындай тастыйықлаў импульстиң қураўшылары ушын да дурыс ($\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x} = 0$).

$\hat{x} = x$ ҳәм $p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ операторларының коммутаторын табамыз. Буның ушын коммутатордың базы бир ψ функциясына тәсирин қараймыз:

$$[\hat{x},\ \hat{p}_x]\,\psi = x\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) - (-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = i\hbar\psi.$$

Алынған нәтийжеден

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \qquad (1.14.1)$$

екенлиги келип шығады. (1.11.7)-аңлатпаға сәйкес бал жағдайда $\hat{K}$ операторының орнында ħ турыпты. Сонлықтан $\langle k\rangle = \hbar$ ҳәм (1.11.9)-аңлатпа төмендегидей түрге енеди:

$$\sqrt{\langle(\Delta x)^2\rangle}\,\sqrt{\langle(\Delta p_x)^2\rangle} \geqslant \hbar/2. \qquad (1.14.2)$$

Биз әдетте (1.2.1)-аңлатпа түринде жазылатуғын Гейзенбергтиң анықсызлық қатнасына келдик. Енди биз (1.2.1)-аңлатпадағы Δx ҳәм Δp_x шамаларының олардың орташа мәнислеринен орташа квадратлық аўысыўлары екенлигин түсиниўимиз керек.

$x\cdot\partial\psi/\partial y = \partial(x\psi)/\partial y$ болғанлықтан $\hat{x}$ ҳәм $\hat{p}_y$ операторлары коммутацияланатуғын операторлар болып шығады. Демек x шамалары бир ўақытта анық мәнислерге ийе болатуғын бөлекшениң ҳалының болыўы мүмкин. Тап усындай тастыйықлаў x ҳәм p_z, y ҳәм p_z лер ушын да орынлы.

$$x = x_1, \quad y = x_2, \quad z = x_3, \quad p_x = p_1, \quad p_y = p_2, \quad p_z = p_3$$

белгилеўлерин қабыл етсек координаталар операторлары менен импульстиң қураўшылары операторлары арасындағы барлық коммутациялық қатнасларды бир аңлатпа түринде былайынша жазамыз:

$$[\hat{x}_k,\ \hat{p}_m] = i\hbar\delta_{km}. \qquad (1.14.3)$$

Координата $\hat{x}$ ҳәм импульс қураўшысы $\hat{p}_y$ каноникалық түйинлес q ҳәм p шамаларының дара жағдайы болып табылады. Егер бул шамалардың операторлары бирдей функциялардың көплигинде анықланған болса анықсызлық қатнасы болған

$$\Delta q \cdot \Delta p \geqslant \hbar/2 \qquad (1.14.4)$$

қатнасы қәлеген q ҳәм p каноникалық түйинлес шамалардың қәлеген жубы ушын орынлы. Мысалы, φ ҳәм M_z каноникалық түйинлес өзгериўшилери ушын (φ арқалы азимуталлық мүйеш белгиленген) $\Delta\varphi \cdot \Delta M_z \geqslant \hbar/2$ қатнасы тек $\langle(\Delta\varphi)^2\rangle \ll \pi^2$ шәрти орынланған жағдайда ғана дурыс болады. Бул жағдайдың себеби мынадан ибарат: егер дәўири 2π болған ψ(φ) дәўирли функциялар көплигинде ғана оператор өзи өзине түйинлес бола алады. φ өзгериўшиси болса функциялардың усы көплигинде оператор болып табылмайды, себеби φψ(φ) функциясы усы көпликке тийисли емес[12].

Каноникалық түйинлес шамалардың қатарына энергия ҳәм ўақыт киреди. Демек

$$\Delta E \cdot \Delta t \geqslant \hbar/2 \qquad (1.14.5)$$

қатнасы орын алады деген сөз. Бул қатнас бойынша энергияны ΔE дәллигинде анықлаў $\Delta t \sim \hbar/\Delta E$ ўақыт интервалын киши емес ўақыт интервалын алыўы керек. Системаның базы бир ҳалының энергиясын өлшеў ҳалдың жасаў ўақыты τ дан үлкен болмаған Δt ўақыт аралығында әмелге асатуғын болғанлықтан ҳал энергиясы $\Delta E \sim \hbar/\tau$ шамасындағы анықсызлыққа ийе болады. Бул шаманы энергия қәддиниң кеңлиги деп атайды ҳәм Г (грек имласындағы) арқалы белгилейди. Солай етип

$$\Gamma \sim \hbar/\tau. \qquad (1.14.6)$$

Мүйешлик момент операторының коодинаталар ҳәм импульслер операторлары менен коммутацияланыў қағыйдаларын табамыз. (1.13.9)-аңлатпаны нәзерде тутып мынаған ийе боламыз:

$$[\hat{M}_x,\ \hat{x}]\,\psi = \\ = -i\hbar\left\{\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)(x\psi) - x\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi\right\} = 0.$$

Буннан $[\hat{M}_x, \hat{x}] = 0$ теңлигиниң орынланатуғынлығы келип шығады. Тап сондай аңлатпалар мүйешлик момент пенен координаталардың басқа да операторлары ушын да алынады. Солай етип

$$[\hat{M}_x,\ \hat{x}] = 0, \quad [\hat{M}_y,\ \hat{y}] = 0, \quad [\hat{M}_z,\ \hat{z}] = 0. \qquad (1.14.7)$$

Енди биз ψ функциясына $[\hat{M}_x,\ \hat{y}]$ коммутаторы менен тәсир етемиз:

---

[12] А.С.Давыдов. Квантовая механика. Издательство «Наука». Москва. 1973. стр. 55.

$$[\hat{M}_x,\ \hat{y}]\,\psi =$$
$$= -i\hbar\left\{\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)(y\psi) - y\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi\right\} =$$
$$= -i\hbar\left\{y^2\frac{\partial\psi}{\partial z} - zy\frac{\partial\psi}{\partial y} - z\psi - y^2\frac{\partial\psi}{\partial z} + yz\frac{\partial\psi}{\partial y}\right\} = i\hbar z\psi.$$

Демек $[\hat{M}_x, \hat{y}] = i\hbar z.$ Цикллық орын алмастырыўларды әмелге асырсақ

$$[\hat{M}_x,\ \hat{y}] = i\hbar z,\quad [\hat{M}_y,\ \hat{z}] = i\hbar x,\quad [\hat{M}_z,\ \hat{x}] = i\hbar y \tag{1.14.8}$$

формулаларына ийе боламыз. (1.14.7)- ҳәм (1.14.8)-формулаларды бир қатнас түринде жазыўға болатуғынлығын аңғарамыз:

$$[\hat{M}_k,\ \hat{x}_l] = i\hbar\varepsilon_{klm}x_m. \tag{1.14.9}$$

Бул формулаларда $x_1 = x,\ x_2 = y,\ x_3 = z,\ M_1 = M_x$ ҳәм басқалар. ε_{klm} арқалы Кронекердиң қыя симметриялы символы белгиленген.

Алынған формулалардан мүйешлик моменттиң қураўшысы менен сәйкес координатаның бир ўақытта анық мәнислерге ийе бола алатуғынлығын көрсетеди. M_x қураўшысы менен y координатасының (ямаса z координатасының) бир ўақытта анықланыўы мүмкин емес. Тап сол сыяқлы жағдай M_y ҳәм z (ямаса x) координатасы, соның менен бирге M_z ҳәм x (ямаса y) координаталары арасында да орын алады.

ψ функциясына $[\hat{M}_x, \hat{p}_x]$ коммутаторы менен тәсир етейик:

$$[\hat{M}_x,\ \hat{p}_x]\,\psi =$$
$$= (-i\hbar)^2\left\{\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(y\frac{\partial\psi}{\partial z} - z\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)\right\} = 0.$$

Биз $[\hat{M}_x, \hat{p}_x] = 0$ екенлигине ийе болдық. Тап усындай нәтийже сол сыяқлы қалған коммутаторлары ушын да алынады. $[\hat{M}_x, \hat{p}_y]$ операторы ушын басқаша нәтийже алынады:

$$[\hat{M}_x,\ \hat{p}_y]\,\psi =$$
$$= (-i\hbar)^2\left\{\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\frac{\partial\psi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y}\left(y\frac{\partial\psi}{\partial z} - z\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)\right\} =$$
$$= (-i\hbar)^2\left\{y\frac{\partial^2\psi}{\partial y\,\partial z} - z\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} - y\frac{\partial^2\psi}{\partial z\,\partial y} - \frac{\partial\psi}{\partial z} + z\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\right\} =$$
$$= (-i\hbar)^2\left(-\frac{\partial\psi}{\partial z}\right) = i\hbar\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial z}\right) = i\hbar\hat{p}_z\psi.$$

Алынған нәтийжени (1.14.9)-формулаға усаған

$$[\hat{M}_k,\ \hat{p}_l] = i\hbar\varepsilon_{klm}\hat{p}_m \tag{1.14.10}$$

формуласы менен көрсетиў мүмкин.

(1.14.9)- ҳәм (1.14.10)-формулаларының жәрдеминде мүйешлик моменттиң қураўшыларының коммутаторларын аңсат алыўға болады:

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_y] = \hat{M}_x\hat{M}_y - \hat{M}_y\hat{M}_x =$$
$$= \hat{M}_x(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) - (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)\hat{M}_x =$$
$$= \hat{M}_x\hat{z}\hat{p}_x - \hat{M}_x\hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x\hat{M}_x + \hat{x}\hat{p}_z\hat{M}_x.$$

$\hat{M}_x$ операторының $\hat{x}$ пенен де, $\hat{p}_x$ пенен де коммутацияланатуғынлығынан пайдаланып екинши қосылыўшыдағы $\hat{M}_x$ пенен $\hat{x}$ тың , ал үшинши қосылыўшыдағы $\hat{M}_x$ пенен $\hat{p}_x$ лардың орынларын алмастырамыз. Нәтийжеде

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_y] = \hat{M}_x\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{M}_x\hat{p}_z - \hat{z}\hat{M}_x\hat{p}_x + \hat{x}\hat{p}_z\hat{M}_x =$$
$$= (\hat{M}_x\hat{z} - \hat{z}\hat{M}_x)\hat{p}_x - \hat{x}(\hat{M}_x\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{M}_x) =$$
$$= i\hbar\varepsilon_{xzy}\hat{y}\hat{p}_x - \hat{x}i\hbar\varepsilon_{xzy}\hat{p}_y = i\hbar(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = i\hbar\hat{M}_z$$

теңлигине ийе боламыз [биз (1.14.9)- ҳәм (1.14.10)-формулалардан пайдаландық; $\varepsilon_{xyz} = \varepsilon_{132} = -1$).

Циклլық орын алмастырыўларды әмелге асырып

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_y] = i\hbar\hat{M}_z, \quad [\hat{M}_y, \hat{M}_z] = i\hbar\hat{M}_x, \quad [\hat{M}_z, \hat{M}_x] = i\hbar\hat{M}_y \qquad (1.14.11)$$

теңликлерин ямаса

$$[\hat{M}_k, \hat{M}_l] = i\hbar\varepsilon_{klm}\hat{M}_m. \qquad (1.14.12)$$

теңлигин аламыз. Ең ақырында $\hat{\mathbf{M}}^2$ ҳәм $\hat{M}_x$ операторларының коммутаторларын есаплаймыз. (1.13.10)-аңлатпаны есапқа алып

$$[\hat{\mathbf{M}}^2, \hat{M}_x] = \qquad (1.14.13)$$
$$= (\hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2)\hat{M}_x - \hat{M}_x(\hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2) =$$
$$= \hat{M}_x^3 + \hat{M}_y^2\hat{M}_x + \hat{M}_z^2\hat{M}_x - \hat{M}_x^3 - \hat{M}_x\hat{M}_y^2 - \hat{M}_x\hat{M}_z^2.$$

теңлигине ийе боламыз. $\hat{M}_x\hat{M}_y - \hat{M}_y\hat{M}_x = i\hbar\hat{M}_z$ екенлигин пайдаланып [(1.14.11)-аңлатпаға қараңыз] екинши ҳәм бесинши қосылыўшыларды былайынша түрлендиремиз*:*

$$\hat{M}_y^2\hat{M}_x - \hat{M}_x\hat{M}_y^2 = \hat{M}_y\hat{M}_y\hat{M}_x - \hat{M}_x\hat{M}_y\hat{M}_y =$$
$$= \hat{M}_y(\hat{M}_x\hat{M}_y - i\hbar\hat{M}_z) - (\hat{M}_y\hat{M}_x + i\hbar\hat{M}_z)\hat{M}_y =$$
$$= -i\hbar(\hat{M}_y\hat{M}_z + \hat{M}_z\hat{M}_y).$$

$\hat{M}_z\hat{M}_x - \hat{M}_x\hat{M}_z = i\hbar\hat{M}_y$ қатнасын пайдаланып үшинши ҳәм алтыншы қосылыўшыларды тап сондай етип түрлендиремиз:

$$\hat{M}_z^2\hat{M}_x - \hat{M}_x\hat{M}_z^2 = \hat{M}_z\hat{M}_z\hat{M}_x - \hat{M}_x\hat{M}_z\hat{M}_z =$$
$$= \hat{M}_z(\hat{M}_x\hat{M}_z + i\hbar\hat{M}_y) - (\hat{M}_z\hat{M}_x - i\hbar\hat{M}_y)\hat{M}_z =$$
$$= i\hbar(\hat{M}_z\hat{M}_y + \hat{M}_y\hat{M}_z).$$

Бизлер түрлендирген аңлатпаларды (1.14.13)-формулаға қойсақ оң тәрепи нолге айланады. Тап усындай нәтийжелер $\hat{\mathbf{M}}^2$ менен $\hat{M}_y$ ҳәм $\hat{M}_z$ коммутаторлары арасында да алынады. Солай етип

$$[\hat{\mathbf{M}}^2,\ \hat{M}_x] = 0, \quad [\hat{\mathbf{M}}^2,\ \hat{M}_y] = 0, \quad [\hat{\mathbf{M}}^2,\ \hat{M}_z] = 0. \tag{1.14.14}$$

нәтийжесине ийе боламыз.

(1.14.11)- ҳәм (1.14.14)-формулаларынан биз мынадай жуўмақ шығарамыз: бир ўақытта тек $\mathbf{M}$ векторының квадраты ҳәм координаталар көшерине түсирилген проекциялардың тек биреўи ғана анық мәниске ийе бола алады. Қалған еки проекцияның шамалары анық мәниске ийе бола алмайды (бул талапқа үш проекция да бир ўақытта нолге тең болған жағдай кирмейди). Демек $\mathbf{M}$ векторы ҳаққында тек оның «узынлығы» ҳәм базы бир координата көшери менен усы вектор арасындағы мүйештиң мәниси ҳаққында ғана айта алады екенбиз. $\mathbf{M}$ векторының бағытын анықлаў мүмкиншилиги жоқ.

1-15. Координата ҳәм импульс операторларының меншикли функциялары

Координата операторының меншикли функцияларын табамыз. $\hat{x} = x$ болғанлықтан (1.7.3)-теңлеме

$$x\psi_{x'} = x'\psi_{x'} \tag{1.15.1}$$

түрине ийе болады. Бул аңлатпада x' арқалы базы бир ҳақыйқый сан, ал $\psi_{x'} = \psi_{x'}(x)$ арқалы x тың x' шамасына тең меншикли мәнисине тең меншикли функция белгиленген. δ функциясының белгили болған $x\delta(x) = 0$ қәсийетлеринен пайдаланып $x - x'$ аргументи ушын төмендегидей аңлатпа жазамыз:

$$(x - x')\delta(x - x') = 0.$$

Қаўсырманы ашып $x\delta(x - x') - x'\delta(x - x') = 0$ теңлигин аламыз. Буннан

$$x\delta(x - x') = x'\delta(x - x').$$

(1.15.1)-теңлеме менен салыстырыў

$$\psi_{x'}(x) = \delta(x - x') \tag{1.15.2}$$

теңлемесин береди. Бул $\hat{x}$ операторының $x = x'$ теңлигине сәйкес келиўши меншикли функциясы болып табылады. $\hat{x}$ операторының спектриниң үзликсиз екенлиги айқын.

$\delta(x - x')$ ҳәм $\delta(x - x'')$ функцияларының скаляр көбеймесин есаплаймыз. $\delta(x)$ функциясы ҳақыйқый болғанлықтан

$$\langle\delta(x-x')\,|\,\delta(x-x'')\rangle=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\delta(x-x')\,\delta(x-x'')\,dx.$$

Егер $\delta(x-x')=f(x)$ ҳәм $x''=a$ деп есапласақ, онда бул интегралды $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,\delta(x-a)\,dx=f(a)$ формасына алып келиў мүмкин. $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,\delta(x-a)\,dx=f(a)$ формуласы тийкарында биз есаплайын деп атырған интеграл $f(a)$ функциясына, яғный $\delta(x''-x')$ функциясына тең. Солай етип

$$\langle\delta(x-x')\,|\,\delta(x-x'')\rangle=\delta(x''-x').$$

Бул (1.15.2)-функцияларының дельта-функцияға нормировкаланғанлығын көрсетеди ($x\delta(x)=0$ формуласына итибар бериңиз).

$\psi_\alpha(x)$ функциясын (α арқалы ҳалдың индекси белгиленген) $\hat{x}$ операторының (1.15.2)-меншикли функциялары бойынша қатарға жаямыз. (1.12.1)-аңлатпаға сәйкес

$$\psi_\alpha(x)=\int\limits_{-\infty}^{+\infty} c(x')\,\psi_{x'}(x)\,dx'= \tag{1.12.3}$$

$$=\int\limits_{-\infty}^{+\infty} c(x')\,\delta(x-x')\,dx'=c(x).$$

Биз алған нәтийже координаталық көринистеги пси-функцияның $\psi_\alpha(x)$ функциясының өзи екенлигин аңғартады. Тап усындай жуўмаққа (1.12.7)-формула бойынша $c(x')$ функциясын есаплаў жолы менен де келиўге болады. q шамасын x' пенен алмастырып

$$c(x')=\langle\psi_{x'}\,|\,\psi_\alpha\rangle=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\psi^*_{x'}(x)\,\psi_\alpha(x)\,dx$$

аңлатпасын аламыз. Дельта-функция ҳақыйқый болып табылады. Сонлықтан $\psi^*_{x'}=\psi_{x'}=\delta(x-x')$. Демек

$$c(x')=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\delta(x-x')\,\psi_\alpha(x)\,dx=\psi_\alpha(x').$$

x өзгериўшисиндеги штрихты алып таслап биз $c(x)=\psi_\alpha(x)$ аңлатпасына келемиз.

Үш өлшемли жағдайда $\psi_\alpha=\psi_\alpha(x,y,z)=\psi_\alpha(\mathbf{r})$. Ал $\hat{\mathbf{r}}$ операторының меншикли функциялары $\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r})=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ функциялары болып табылады [буны биз (1.15.2)-формулаға алып келгендей есаплаўларды жүргизиў жолы менен әмелге асырамыз]. ψ_α функцияларын $\psi_{\mathbf{r}'}$ функциялары бойынша қатарға жайып (1.15.3)-нәтийжеге сәйкес келетуғындай нәтийжени аламыз:

$$\psi_\alpha(x,\,y,\,z)=\psi_\alpha(\mathbf{r})=\int c(\mathbf{r}')\,\psi_{\mathbf{r}'}\,dV= \tag{1.15.4}$$

$$=\int c(\mathbf{r}')\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,dV=c(\mathbf{r})=c(x,\,y,\,z).$$

(1.7.3)-теңлемени $\hat{p}_x = -i\hbar\,\partial/\partial x$ импульс операторы ушын жазамыз:

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} = p_x\psi.$$

Бул теңлемениң шешими

$$\psi = Ce^{(i/\hbar)\,p_x x} \tag{1.15.5}$$

функциясы болып табылады. $\hat{p}_x$ операторының спектриниң үзликсиз болатуғынлығы өз-өзинен түсиникли.

(1.15.5) функциясын 1 ге нормировкалаўға тырысамыз. Буның ушын

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left|Ce^{(i/\hbar)\,p_x x}\right|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty}|C|^2 dx = |C|^2\int_{-\infty}^{+\infty} dx.$$

интегралын есаплап көремиз. Бул интеграл қәлеген $C \neq 0$ болған жағдайда тарқалады (шексизликке айланады). Демек $\hat{p}_x$ операторының меншикли функцияларын 1 ге нормировкалаў мүмкин емес екен. 1-12 параграфта гәп етилгениндей биз келген нәтийже үзликсиз спектрге ийе меншикли функциялардың барлығы ушын орынлы болады. Бундай жағдайда дельта-функцияға нормировка етиледи.

(1.15.5)-түрдеги еки функцияның скаляр көбеймесин есаплаймыз:

$$\left\langle\psi_{p'_x}\middle|\psi_{p''_x}\right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} C^* e^{-(i/\hbar)\,p'_x x}\cdot Ce^{(i/\hbar)\,p''_x x}\,dx =$$

$$= C^*C\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\left[\left(p''_x - p'_x\right)/\hbar\right]x}\,dx.$$

$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\,dk = 2\pi\delta(x)$ формуласындағы k ҳәм x шамаларының ийелеген орынларын (роллерин) алмастырып

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\,dx = 2\pi\delta(k) \tag{1.15.6}$$

формуласын аламыз. Бул формулаға сәйкес

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\left[\left(p''_x - p'_x\right)/\hbar\right]x}\,dx = 2\pi\delta\left[\left(p''_x - p'_x\right)/\hbar\right] = \tag{1.15.7}$$

$$= 2\pi\hbar\delta\left(p''_x - p'_x\right).$$

(биз $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$ анықламасынан пайдаландық). Солай етип

$$\left\langle\psi_{p'_x}\middle|\psi_{p''_x}\right\rangle = C^*C\cdot 2\pi\hbar\delta\left(p''_x - p'_x\right).$$

Буннан әҳмийетли жуўмақ шығарамыз: (1.15.5)-функцияларды дельта-функцияға нормировкалаў ушын $|C|$ шамасын $1/(2\pi\hbar)^{1/2}$ шамасына тең етип алыўымыз керек екен. Пси-функция $e^{i\alpha}$ фазалық көбейтиўшиси дәллигине шекем анықланатуғын болғанлықтан C шамасын ҳақыйқый ҳәм $1/(2\pi\hbar)^{1/2}$ шамасына тең деп есаплаў мүмкин.

Демек импульс операторының дельта-функцияға нормировкаланған меншикли функциялары мыналарға тең:

$$\psi_{p_x}(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{(i/\hbar)\, p_x x}. \tag{1.15.8}$$

p операторының үш өлшемли дельта-функцияға нормировкаланған меншикли функцияларының

$$\psi_{\mathbf{p}} = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{(i/\hbar)\,\mathbf{pr}} \tag{1.15.9}$$

түрине ийе болатуғынлығына аңсат көз жеткериўге болады.