Mühazirə 1. OPERATORLAR VƏ ONLAR ÜZƏRİNDƏ ƏMƏLLƏR

Kvant mexanikasının riyazi aparatı operatorlar nəzəriyyəsinə əsaslanır. Operator latın əlifbasının böyük hərfləri ilə işarə olunur. $\hat{A}, \hat{B}, \hat{L}, \hat{M}$. Qeyd edək ki, riyaziyyatda istifadə olunan hər bir əməl operatordur. Operatorlar müəyyən sinif funksiyalar üçün təyin olunur. Məsələn: diferensiallama əməliyyatı yalnız diferensiallana bilən funksiyalar üçün təyin olunur və aşağıdakı kimi işarə olunur:

$$\hat{L} = \frac{d}{dx}$$

Bu əməliyyat hər hansı funksiyadan x dəyişəninə görə I tərtib törəmə alınmasını nəzərdə tutur. Operatorun hər hansı funksiyaya təsiri nəticəsində yeni bir funksiya yaranır. Ümumi şəkildə $\hat{L}$ operatorunun hər hansı ψ funksiyasına təsiri $\hat{L}\psi$ kimi yazılır və nəticədə yeni funksiya alınır:

$$\hat{L}\psi = \varphi \tag{1}$$

Tutaq ki, L operatoru d/dx-dır. Funksiya isə $\psi(x) = \sin x$ olsun. Onda

$$\hat{L}\psi = \frac{d}{dx}\sin x = \cos x$$

Operatorların cəmi, fərqi, hasili əməlləri mövcuddur. Məs:

$$\left(\hat{A} \pm \hat{B}\right)\psi = \hat{A}\psi \pm \hat{B}\psi \tag{2}$$

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}\underbrace{(\hat{B}\psi)}_{\varphi} = \hat{A}\varphi = f \tag{3}$$

Qeyd edək ki, bəzən iki operatorun $\hat{A}\hat{B}$ hasili həmin operatorların $\hat{B}\hat{A}$ hasilinə bərabər olur:

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \tag{4}$$

Bu halda $\hat{A}$ və $\hat{B}$ operatorları kommutativdir. Əgər qeyd olunan (4) bərabərliyi ödənmirsə, onda $\hat{A}$ və $\hat{B}$ operatorları kommutativ deyildir.

Riyaziyyatda istifadə olunan operatorların heç də hamısı kvant mexanikasının operatorları deyildirlər. Kvant mexanikası operatorları aşağıdakı 2 şərti ödəyirlər:

1. Kvant mexanikasında istifadə olunan operatorlar xətti olmalıdırlar. Tutaq ki, c_1 və c_2 iki ixtiyari sabitdir. ψ_1 və ψ_2 isə $\hat{L}$ operatorunun təsir etdiyi 2 ixtiyari funksiyadır. Əgər

$$\hat{L}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{L}\psi_1 + c_2\hat{L}\psi_2 \qquad (5)$$

şərti ödənərsə, $\hat{L}$ operatoru xətti olur. Yuxarıda qeyd etdiyimiz $\hat{L} = d/dx$ operatoru xəttidir. Doğrudan da

$$\hat{L}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = \frac{d}{dx}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = \frac{d}{dx}c_1\psi_1 + \frac{d}{dx}c_2\psi_2 =$$

$$c_1\frac{d}{dx}\psi_1 + c_2\frac{d}{dx}\psi_2 = c_1\hat{L}\psi_1 + c_2\hat{L}\psi_2$$

Xəttilik şərtini bəzən daha ümumi şəkildə yazırlar:

$$\hat{L}\sum_{i=1}^{s} c_i\psi_i = \sum_{i=1}^{s} c_i\hat{L}\psi_i \qquad (6)$$

Göstərmək olar ki, qüvvətə yüksəltmə, kökalma operatorları xətti deyildirlər. Deməli, bu operatorlar kvant mexanikasının operatorları ola bilməzlər.

2. Kvant mexanikasında istifadə olunan operatorlar ermit və ya öz-özünə qoşma operatorlar olmalıdır. Bu şərt riyazi olaraq aşağıdakı kimi ifadə olunur:

$$\int \psi_1^* \hat{L}\psi_2 d\tau = \int \psi_2 \hat{L}^* \psi_1^* d\tau \qquad (7)$$

(7) ifadəsində $d\tau$ həcm elementidir. Ermitilik şərtindəki * ifadəsi funksiyanın, operatorun kompleks qoşmasını göstərir. Funksiyanın, operatorun kompleks qoşmasını tapmaq üçün onun ifadəsində xəyali vahidin qarşısındakı işarəni dəyişirlər. Məs:

$$(a+ib)^* = a - ib; \quad (a+b)^* = a+b$$

$$\left(e^{i\alpha x}\right) = e^{-i\alpha x}; \quad (e^{\alpha x})^* = e^{\alpha z}$$

$$\left(i\frac{d}{dx}\right)^* = -i\frac{d}{dx}; \quad \left(\frac{d}{dx}\right)^* = \frac{d}{dx}$$

$i = \sqrt{-1}$ (xəyali vahid)

Yazılanlardan aydın olur ki, həqiqi ədədin, funksiyasının və operatorun kompleks qoşması elə onun özünə bərabər olur. Yuxarıda qeyd etdiyimiz $L = d/dx$ operatoru xəttidir, lakin ermitlik şərtini ödəmir. Deməli, bu operatordan kvant mexanikasında istifadə oluna bilməz. Lakin $\hat{M} = i\dfrac{d}{dx}$ operatoru həm xəttidir, həm də ermitdir. Kvant mexanikasında bu operatordan istifadə oluna bilər.

Operatorların məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları. Qeyd etdik ki, operatorun funksiyaya təsiri nəticəsində yeni funksiya yaranır. Bu qayda bəzən pozulur. Belə ki, bəzi hallarda operatorun funksiyaya təsiri nəticəsində müəyyən sabit vuruq dəqiqliyi ilə funksiyanın özü alınır. Məs:

$$\hat{L} = \frac{d^2}{dx^2}; \quad \psi(x) = \sin k\,x \qquad k = const$$

$$\hat{L}\psi = \frac{d^2}{dx^2}\sin k\,x = \frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}\sin k\,x\right) = \frac{d}{dx}k\cdot\cos k\,x = -k^2\sin k\,x$$

Operatorlar nəzəriyyəsində bu hal ümumi halda aşağıdakı kimi yazılır:

$$\hat{L}\psi = L\psi \qquad (8) \qquad (L = const)$$

(8) operator tənliyi müəyyən sərhəd şərtləri daxilində həll olunur, L və ψ tapılır. L-ə operatorun məxsusi qiyməti, ψ-ə isə həmin operatorun məxsusi funksiyası deyilir. Operatorun bir neçə məxsusi qiyməti ola bilər: $(L_1, L_2, ..., L_s)$. Operatorun məxsusi qiymətləri çoxluğuna həmin operatorun spektri deyilir. Spektr həm kəsilməz, həm də diskret ola bilər. Əgər operatorun hər bir məxsusi qiymətinə yalnız bir məxsusi funksiya uyğun gələrsə - spektr cırlaşmamışdır – deyilir. Əgər operatorun bir məxsusi qiymətinə məs, L-ə $\psi_1, \psi_2, ..., \psi_s$ kimi bir neçə funksiyaya uyğun gələrsə, onda – spektr cırlaşmışdır – deyilir. Məxsusi funksiyaların sayı isə (s) spektrin cırlaşma tərtibi adlanır.

KVANT MEXANİKASI OPERATORLARININ XASSƏLƏRİ

I. Ermit operatorunun məxsusi qiyməti həqiqidir.

Tutaq ki, $\hat{L}$ ermit operatordur və onun üçün

$$\hat{L}\psi = L\psi$$

tənliyi ödənir.

$$\hat{L}^{*}\psi^{*} = L^{*}\psi^{*}$$

(9)

$$\left.\begin{matrix}\hat{L}\psi = L\psi \\ \hat{L}^{*}\psi^{*} = L^{*}\psi^{*}\end{matrix}\right| \begin{matrix}\psi^{*} \\ \psi\end{matrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{matrix}\psi^{*}\hat{L}\psi = L\psi^{*}\psi \\ \psi\hat{L}^{*}\psi^{*} = L^{*}\psi^{*}\psi\end{matrix}$$

Hər iki bərabərliyi bütün fəza üzrə inteqrallayaq:

$$\int\psi^{*}\hat{L}\psi d\tau = \int L\psi^{*}\psi d\tau = \dot{L}\int\psi^{*}\psi\, d\tau \qquad (10)$$

$$\int\psi^{*}\hat{L}^{*}\psi^{*}d\tau = \int\hat{L}^{*}\psi^{*}\psi d\tau = L^{*}\int\psi^{*}\psi\, d\tau \qquad (11)$$

$\hat{L}$ operatoru Ermit olduğundan (10) və (11) bərabərliklərinin sol tərəfləri bərabərdir. Onda,

$$\Rightarrow L\int\psi^{*}\psi\, d\tau = L^{*}\int\psi^{*}\psi\, d\tau \Rightarrow L = L^{*}$$

II. Ermit operatorunun 2 müxtəlif məxsusi qiymətinə uyğun məxsusi funksiyaları ortoqonaldırlar. Tutaq ki, $\hat{L}$ ermit operatorudur. L_n, L_m həmin operatorun məxsusi qiymətləridir və $L_n \neq L_m$. Aşağıdakı operator tənliklərini yazaq.

$$\hat{L}\psi_n = L_n\psi_n \quad (12) \qquad\qquad \hat{L}\psi_m = L_m\psi_m \quad (13)$$

Göründüyü kimi ψ_n funksiyası L_n, ψ_m - L_m məxsusi qiymətinə uyğundur. Göstərək ki, $\int\psi^{*}{}_n\psi_m d\tau = 0$ (ortoqonallıq şərti).

(13) tənliyinin kompleks qoşmasını yazaq:

$$\hat{L}^{*}\psi_m = L^{*}{}_m\psi^{*}{}_m \qquad (14)$$

(12) tənliyini $\psi^{*}{}_m$-a, (14)-ni ψ_n-ə vurub bütün fəza üzrə inteqrallayaq:

$$\int\psi^{*}_{m}\hat{L}\psi_n d\tau = L_n\int\psi^{*}_{m}\psi_n\, d\tau \qquad (15)$$

$$\int\psi_n\hat{L}^{*}\psi^{*}_{m}d\tau = L^{*}_{m}\int\psi^{*}_{m}\psi_n d\tau = L_m\int\psi^{*m}\psi_n\, d\tau \qquad (16)$$

L- ermit olduğundan (15) və (16) bərabərliklərinin sağ tərəfləri eynidir. Onda,

$$0=\left(L_n-L_m\right)\int \psi_m^*\psi_n d\tau \Rightarrow \int \psi_m^*\psi_n d\tau = 0$$

Göstərmək olar ki, ermit operatorun məxsusi funksiyalarının $|\psi|^2$-nin bütün fəza üzrə inteqralı sabit ədəddir. Yəni,

$$\int |\psi|^2 d\tau = A \qquad (A=const)$$

Yeni bir φ_m funksiyası daxil edək:

$$\varphi_m = \frac{\psi_m}{\sqrt{A}}$$

Aydındır ki, bu funksiya üçün

$$\int |\varphi_m|^2 d\tau = \int \varphi_m^*\varphi_m d\tau = 1 \tag{17}$$

(17) şərtinə normallıq şərti deyilir. φ_m funksiyasının ortoqonal olduğunu nəzərə alsaq, onlar üçün

$$\int \varphi_m^*\varphi_n d\tau = \delta_{mn} \tag{18}$$

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m=n \\ 0, & m\neq n \end{cases} \tag{19}$$

δ_{mn} - Kroneker simvolları adlanır:

$$\delta_{11}=1,\ \delta_{00}=1,\ \ \delta_{10}=0$$

(18) şərti məxsusi funksiyaların ortonormallıq şərti də adlanır.

III. Tutaq ki, $\hat{L}$ ermit operatorunun hər hansı məxsusi qiyməti s tərtibdən cırlaşmışdır. Yəni, L məxsusi qiymətinə $\psi_1,\psi_2,...,\psi_s$ kimi məxsusi fuknsiyalar uyğun gəlir. Göstərmək olar ki, bu funksiyaların istənilər xətti kombinasiyasından düzəldilmiş hər hansı funksiya da L məxsusi qiymətinə uyğun məxsusi funksiya olacaqdır:

$$\begin{array}{l} \hat{L}\psi_1 = L\psi_1 \\ \hat{L}\psi_2 = L\psi_2 \\ -------- \\ \hat{L}\psi_3 = L\psi_3 \end{array} \Rightarrow \psi = \sum_{i=1}^{s} c_1\psi_1 = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + ... + c_s\psi_s$$

İsbat edək ki, $\hat{L}\psi = L\psi$

$$\hat{L}\psi = \hat{L}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + ... + c_s\psi_s) =$$
$$= c_1\hat{L}\psi_1 + c_2\hat{L}\psi_2 + ... + c_s\hat{L}\psi_s = L(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + ... + c_s\psi_s) = L\psi$$

IV. Ermit operatorun məxsusi funksiyaları çoxluğu tam sistem təşkil edir. Bu o deməkdir ki, operatorun təyin olunduğu funksiyalar çoxluğundan götürülmüş hər hansı funksiyanı həmin operatorun məxsusi funksiyaları üzrə sıraya ayırmaq olar.

Hər hansı $F(x)$ funksiyası üçün

$$F(x) = \sum_i c_i\psi_1(x) \qquad (9)$$

Buradakı c_i naməlum əmsallarının qiymətləri ψ_i və F funksiyalarından istifadə etməklə tapıla bilər.

V. Əgər $\hat{L}$ və $\hat{M}$ funksiyalarının məxsusi funksiyaları eynidirsə, onda bu operatorlar kommutativdir.

Tutaq ki, aşağıdakı operator tənlikləri ödənir:

$$\begin{matrix} \hat{L}\psi = L\psi \\ \hat{M}\psi = M\psi \end{matrix} \Rightarrow \hat{L}\hat{M} = \hat{M}\hat{L}$$

I tənliyinə $\hat{M}$ operatoru, II tənliyinə isə $\hat{L}$ operatoru ilə təsir edək:

$$\begin{matrix} \hat{M}(\hat{L}\psi) = \hat{M}L\psi = L(\hat{M}\psi) = LM\psi \\ \hat{L}(\hat{M}\psi) = \hat{L}M\psi = M(\hat{L}\psi) = ML\psi \end{matrix} \Rightarrow \hat{M}\hat{L} = \hat{L}\hat{M}!$$

VI. Əgər 2 $\hat{L}$ və $\hat{M}$ operatorları kommutativdirsə, onda onların məxsusi funksiyaları eynidir.

KVANT MEXANİKASININ POSTULATLARI

I postulat. Kvant mexanikasında hər bir fiziki kəmiyyətə müəyyən bir ermit operatoru qarşı qoyulur. Məs: enerjiyə qarşı qoyulan operator Hamilton operatorudur. Operatorları təyin etmək üçün aşağıdakı 3 qaydadan istifadə olunur.

I qayda – koordinatlara və zamana qarşı qoyulan operatorlar elə onların özünə bərabərdir:

$$\hat{x} = x; \quad \hat{y} = y; \;\; \hat{z} = z; \quad \hat{t} = t$$

Bu o deməkdir ki,

$$\hat{x}f(x) = xf(x)$$

II qayda – impulsun p_x, p_y, p_z Dekart proyeksiyalarının operatorları aşağıdakı kimi təyin olunurlar:

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}; \quad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}; \;\; \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

$$i = \sqrt{-1}; \;\; \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Bəzən başqa yazılışdan istifadə olunur:

$$\hat{p}_x = -\frac{i^2}{i}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

III qayda – koordinatlardan və impulslardan asılı hər hansı L fiziki kəmiyyətinə qarşı qoyulan operatoru təyin etmək üçün bu kəmiyyətin klassik fizikadan məlum düsturu yazılır və p_x, p_y, p_z uyğun operatorlarla əvəz olunur:

$$L(x, y, z, p_x, p_y, p_z) \Rightarrow \hat{L}(x, y, z, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$$

İmpuls operatoru.

$$\vec{p} = \vec{i}p_x + \vec{j}p_y + \vec{k}p_z$$

Burada $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ - koordinat oxları üzrə yönələn vahid vektorlardır.

$$\vec{p} = \vec{i}\hat{p}_x + \vec{j}\hat{p}_y + \vec{k}\hat{p}_z = -i\hbar\left(\vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$\vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z} = \vec{\nabla}$$

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$$

$\vec{\nabla}$ - nabla operatoru və ya Laplas operatoru adlanır.

Kinetik enerji operatoru.

$$T=\frac{mv^2}{2}=\frac{p^2}{2m}=\frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right);$$

$$\hat{T}=\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

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

Enerji operatoru.

Klassik fizikadan məlumdur ki, sərbəst zərrəciyin tam enerjisi onun Hamilton funksiyasına bərabərdir. Hamilton funksiyası zərrəciyin kinetik və potensial enerjisinin cəmi deməkdir:

$$E=H=T+U(x,y,z)$$

Ona görə də enerjiyə qarşı qoyulan operatoru Hamilton operatoru adlandırmışlar və o aşağıdakı kimi ifadə olunur:

$$\hat{H}=\hat{T}+\hat{U}(x,y,z)$$

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(x,y,z)$$

İmpuls momenti və onun proyeksiyalarının uyğun operatorları.

Klassik fizikada zərrəciyin impuls momenti $\vec{M}=[\vec{r},\vec{p}]$ kimi təyin olunur. Onda

$$\vec{M}=[\vec{r}\vec{p}]=\begin{vmatrix}\vec{i} & \vec{j} & \vec{k}\\ x & y & z\\ p_z & p_y & p_z\end{vmatrix}$$

$$\hat{\vec{M}}=\left[\vec{r}\hat{\vec{p}}\right]=-i\hbar\left[\vec{r}\vec{\nabla}\right] \quad \text{və ya}$$

$$\hat{\vec{M}} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \hat{p}_z & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix} = -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}$$

İndi də $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$ operatorlarını təyin edək:

$$\overleftarrow{M} = \vec{i} M_x + \vec{j} M_y + \vec{k} M_z$$

Bu determinantı açsaq

$$\vec{M} = \vec{i}(yp_z - zp_y) + \vec{j}(zp_x - xp_z) + \vec{k}(xp_y - yp_x)$$

Axırıncı 2 ifadədən alırıq:

$$M_x = yp_z - zp_y \Rightarrow \hat{M}_x = y\hat{p}_y - z\hat{p}_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$M_y = xp_z - zp_x \Rightarrow \hat{M}_y = x\hat{p}_z - z\hat{p}_x = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$M_z = xp_y - yp_x \Rightarrow \hat{M}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right)$$

$$M^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2; \quad \hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2$$

Kvant mexanikasında bir çox məsələləri həll edərkən qeyd olunan operatorların sferik koordinatlarda ifadələri tələb olunur. Belə ifadələri almaq üçün əvvəlcə dekatr və sferik koordinatlar arasında əlaqə düsturlarını tapaq:

$$0 \le r < \infty$$

$$0 \le \theta \le \pi$$

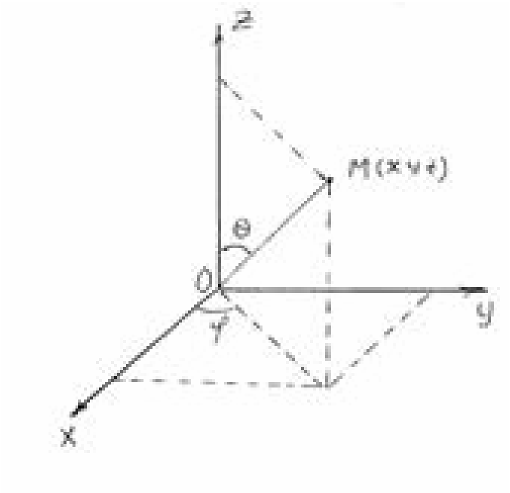
$$0 \le \varphi \le 2\pi$$

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\cos\theta \end{cases}$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$\theta = \arccos\frac{z}{r}$$

$$\varphi = arctg\frac{y}{x}$$



Şəkil 1.

Sferik koordinatları r, θ, φ ilə işarə edirlər. r - koordinat başlanğıcından verilmiş nöqtəyə qədər məsafədir.

θ - r ilə z oxunun müsbət istiqaməti arasındakı bucaqdır. r radius vektorunun XOY müstəvisinin proyeksiyası ilə x oxunun müsbət istiqaməti arasındakı bucaq φ ilə işarə olunur.

Dekart və sferik koordinatlar arasında əlaqə düsturlarından istifadə etməklə kvant mexanikasında istifadə olunan operatorları sferik koordinatlarda da ifadə etmək olar.

Aşağıda daha çox istifadə olunun bəzi operatorların sferik koordinatlarda ifadələri verilmişdir:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$ Laplas operatoru

$$\nabla^2_{\theta\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$ Laplas operatorunun bucaqlardan

asılı hissəsidir.

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2 \nabla^2_{\theta,\varphi}, \;\; \hat{M}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\hat{H} = \hat{T}_r + \frac{\hat{M}^2}{2mr^2} + U(r)$$ Hamilton operatoru

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right)$$ kinetik enerji operatorunun radial hissəsidir.

II postulat. Kvant mexanikasında hər bir fiziki kəmiyyətin ala biləcəyi qiymət həmin kəmiyyətə uyğun operatorun məxsusi qiyməti olmalıdır. Məs: impuls-impuls operatorunun, enerji - Hamilton operatorunun məxsusi qiymətidir və s. Qeyd olunan kəmiyyətlər onlara uyğun operatorlar üçün yazılmış operator tənliklərinin həllindən tapılır. Məs: p_x kəmiyyəti $\hat{p}_x \psi = p_x \psi$, enerji

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad (1)$$

tənliyinin həllindən tapılır. (1) tənliyi ilk dəfə 1926-cı ildə alman alimi Şredinger tərəfindən təklif edilmiş və Şredinger tənliyi adlanır. Kvant mexanikasının yaranma tarixi də 1926-cı ildən hesablanır. Əgər sistemin Hamilton operatoru zamandan asılı deyilsə, onda (1) tənliyinə stasionar hal üçün Şredinger tənliyi deyilir. Zamandan asılı hallar üçün Şredinger tənliyi isə aşağıdakı kimidir:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\vec{r},t) \qquad (2)$$

III postulat. Kvant mexanikasında sistemin halı koordinatlardan və zamandan asılı müəyyən bir funksiya ilə təsvir olunur:

$$\psi(\vec{r},t)$$

Bu funksiyaya sistemin hal funksiyası və ya dalğa funksiyası deyilir. $\vec{r}$ ilə sistemdəki zərrəciklərin radius vektorları yığımı işarə edilir. Dalğa funksiyası verilmiş sistem üçün Şredinger tənliyinin həllindən tapılır. Klassik fizikada sistemin halı koordinatlardan və impulslardan asılı müəyyən bir funksiya ilə verilir. Əgər başlanğıc andan bu funksiya məlumdursa, onda müəyyən tənliklər həll olunaraq sonrakı hallar üçün də funksiya tapıla bilir. Bu prinsipə səbəbiyyət prinsipi deyilir. Bu prinsip kvant mexanikasında da doğrudur. Belə ki, başlanğıc halda sistemin dalğa funksiyası məlum olarsa, onda Şredinger tənliyi həll olunaraq, sonrakı hallar üçün dalğa funksiyası tapıla bilər. Ümumi halda ψ kompleks funksiya da ola bilər. Ona görə də dalğa funksiyasının özünün fiziki mənası yoxdur. Lakin onun modulunun kvadratı zərrəciyin müəyyən həcm elementində olması ehtimalını verir:

$$dW = \left|\psi\left(\vec{r},t\right)\right|^2 dV = \psi^*(\vec{r},t)\cdot\psi\left(\vec{r},t\right)dV \qquad (3)$$

Dalğa funksiyası real sistemlərin halını təsvir etdiyindən o müəyyən şərtləri ödəməlidir.

1. Dalğa funksiyası normallıq şərtini ödəyir:

$$\int\psi^*\left(\vec{r},t\right)\psi\left(\vec{r},t\right)dV = 1 \qquad (4)$$

2. Zərrəciyin sistemdən sonsuz uzaqlaşma ehtimalı çox kiçik olduğundan $r\to\infty, \psi\left(\vec{r},t\right)\to 0$ olmalıdır.
3. Dalğa funksiyasının özü və onun törəmələri kəsilməz qiymətlər almalıdır.
4. Dalğa funksiyası birqiymətli olmalıdır. Tutaq ki, dalğa funksiyası yalnız bir koordinatdan φ-dən asılıdır. $0\le\varphi\le 2\pi$ intervalında dəyişdiyindən birqiymətlilik şərti tələb edir ki, dalğa funksiyasının φ-də və $\varphi+2\pi$-də aldığı qiymətlər eyni olsun. Yəni,

$$\psi\left(\varphi\right) = \psi\left(\varphi+2\pi\right)$$

5. Əgər sistem bir-birindən asılı olmayan zərrəciklərdən təşkil olunmuşsa onda belə sistemin tam dalğa funksiyası ayrı-ayrı zərrəciklərin dalğa funksiyalarının hasili şəklində axtarılır. Xüsusi halda, sistem bir-birindən asılı olmayan 2 zərrəcikdən ibarətdirsə, onda onun dalğa funksiyasını aşağıdakı şəkildə axtarmaq olar:

$$\psi\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2,t\right) = \psi_1(\vec{r},t)\cdot\psi(\vec{r},t) \qquad (5)$$

6. Əgər $\psi_1,\psi_2,...,\psi_n$ sistemin dalğa funksiyalarıdırsa və sistemin halını xarakterizə edən L fiziki kəmiyyəti həmin hallarda $L_1, L_2,..., L_n$ qiymətlərini alırsa, onda bu funksiyaların ixtiyari xətti kombinasiyası da sistemin dalğa funksiyası olacaqdır:

$$\psi = \sum_{i=1}^{n} c_i \psi_i \tag{6}$$

ψ funksiyası ilə təsvir olunan halda L kəmiyyəti $L_1, L_2, ..., L_n$ qiymətlərindən birini alacaqdır.

IV postulat. Əgər sistemin ψ dalğa funksiyası məlum olarsa, sistemin halını xarakterizə edən hər hansı L kəmiyyətinin orta qiyməti aşağıdakı kimi hesablana bilər:

$$\overline{L} = \frac{\int \psi^* \hat{L} \psi \, d\tau}{\int \psi^* \psi \, d\tau} \tag{7}$$

Göründüyü kimi L kəmiyyətini hesablamaq üçün bu kəmiyyətə qarşı qoyulan operatoru və dalğa funksiyasını bilmək tələb olunur. Qeyd etdiyimiz kimi dalğa funksiyası Şredinger tənliyinin həllindən tapılır. Ona görə də kvant mexanikasında əsas məsələ Şredinger tənliyinin həllidir.

Əgər dalğa funksiyası normallıq şərtini ödəyərsə, yəni

$\int \psi^* \psi d\tau = 1$ isə $\overline{L} = \int \psi^* \hat{L} \psi d\tau$ alınır.

Tutaq ki, müəyyən nəzəri hesablamalarla $\overline{L}$ kəmiyyətinin orta qiyməti tapılmışdır. Aydındır ki, bu qiymət həmin kəmiyyətin təcrübədən tapılmış L dəqiq qiymətindən fərqli olacaqdır. Onda

$$\overline{L} - L = \Delta\overline{L}$$

Bu fərqə kəmiyyətin hesablanmasındakı qeyri-müəyyənlik və ya xəta da deyilir. Eyni qayda ilə fiziki kəmiyyətin orta kvadratik xətasından da danışmaq olar və o aşağıdakı kimi təyin olunur:

$$\left(\overline{\Delta L}\right)^2 = \left(\overline{\overline{L} - L}\right)^2 = \int \psi^* (\overline{L} - \hat{L})^2 \psi \, d\tau \tag{8}$$

V postulat. Əgər L və M kəmiyyətlərinə uyğun $\hat{L}$ və $\hat{M}$ operatorları kommutativdirsə, yəni $\hat{L}\hat{M} = \hat{M}\hat{L}$ şərti ödənirsə, yalnız onda bu kəmiyyətlər eyni zamanda və dəqiq ölçülə bilərlər. Əgər $\hat{L}$ və $\hat{M}$ kommutativ operatorlar deyilsə, yəni $\hat{L}\hat{M} \neq \hat{M}\hat{L}$, L və M kəmiyyətləri eyni zamanda dəqiq ölçülə bilməzlər. Bu müddəa kvant mexanikasında Heyzenberqin qeyri-müəyyənlik prinsipi adlandırılır.

Nəzəri hesablamalarla isbat edilmişdir ki, L və M kəmiyyətlərinin orta kvadratik xətaları arasında aşağıdakı münasibət ödənilir:

$$\left(\overline{\Delta L}\right)^2 \cdot \left(\overline{\Delta M}\right)^2 \geq \frac{1}{4}\overline{c^2} \qquad (9)$$

$$\hat{c} = \frac{1}{i}\left(\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}\right) \qquad (10)$$

Tutaq ki, $\hat{L}$ və $\hat{M}$ operatorları kommutativdir. Onda (9) münasibətinin sağ tərəfi 0-a bərabərdir. Bu o deməkdir ki, ΔL və ΔM kəmiyyətlərinin hər hansı biri və ya hər ikisi 0-a bərabərdir. L və M kəmiyyətləri bir-birindən fərqlənmədiyindən həm ΔL, həm də ΔM -in sıfra bərabər olduğunu qəbul etmək lazımdır. Bu o deməkdir ki, $\overline{L} = L,\ \overline{M} = M$ ödənilməlidir. Başqa sözlə desək, hər iki kəmiyyət eyni zamanda və dəqiq ölçülə bilərlər. Əgər $\hat{L}$ və $\hat{M}$ kommutativ deyildirsə, onda (9)-un sağ tərəfi sıfırdan fərqli olur və ΔL və ΔM -dən hər hansı birinin sıfra bərabər olduğunu demək olmaz. Başqa sözlə, qeyd olunan kəmiyyətlər eyni zamanda və dəqiq ölçülə bilmirlər.

İndi də bəzi xüsusi hallar üçün qeyri-müəyyənlik münasibətlərini alaq:

1. x və p_x

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

$$\hat{x}\hat{p}_x\psi = -i\hbar x\frac{\partial}{\partial x}\psi = -i\hbar x\psi'$$

$$\hat{p}_x\hat{x}\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = -i\hbar(\psi + x\psi')$$

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

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

$$\hat{c} = \frac{1}{i}i\hbar = \hbar$$

$\Delta\overline{x}\ \Delta\overline{p}_x \geq \dfrac{\hbar}{2}$, eyni qayda ilə

$$\Delta\overline{y}\ \Delta\overline{p}_y \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta\overline{z}\ \Delta\overline{p}_z \geq \frac{\hbar}{2} \qquad (11)$$

Göründüyü kimi koordinatın və impulsun eyni adlı proyeksiyaları eyni zamanda və dəqiq ölçülə bilməzlər. Başqa sözlə desək zərrəciyin x koordinatı dəqiq ölçülərsə, p_x-in ölçülməsi qeyri-müəyyən qalır. Ona görə də kvant mexanikasında zərrəciyin trayektoriyası anlayışından danışmaq mümkün deyil. Göstərmək olar ki, x və p_y, x və p_z, y və p_z, z və p_x, z və p_y kəmiyyətlərinə uyğun operatorlar bir-biri ilə kommutativdir. Yəni,

$$\hat{y}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{y} = 0 \qquad (12)$$

Bu o deməkdir ki, y və p_x kəmiyyətləri eyni zamanda və dəqiq ölçülə bilərlər.