АТОМНАЯ ФИЗИКА. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ.

Глава 3. Элементы квантовой механики

3.1. Операторы. Собственные функции и собственные значения.

3.1.1. Операторы в квантовой механике.

Операторный метод – традиционная и основная формулировка квантовой механики. *В квантовой механике любой динамической переменной, любой физической величине приводится в соответствие оператор*.

Оператор $\hat{F}$ – это правило, по которому любой выбранной функции φ приводится в соответствие другая функция f:

$$f = \hat{F}\varphi \tag{3.1.1}$$

Ранее мы уже встречались с операторами: оператор градиента $\nabla \equiv grad$, оператор Лапласа $\Delta = \nabla^2$, операторы дивергенции и ротора $div \equiv (\nabla ...), rot \equiv [\nabla ...]$, соответственно.

При использовании операторов имеется «договорное» условие: оператор пишется всегда слева от функции, на которую он действует. Вообще оператор действует на все, что стоит справа от него, если нет ограничивающих скобок.

В квантовой механике применяются только *линейные операторы*, чтобы не нарушался принцип суперпозиции состояний. Одно из основных свойств линейного оператора: его действие на сумму функций равно сумме действий оператора на каждую из них в отдельности, которое записывается в виде:

$$\hat{F}(C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2) = C_1\hat{F}\varphi_1 + C_2\hat{F}\varphi_2, \tag{3.1.2}$$

где C_1, C_2 – произвольные постоянные.

Примеры операторов, соответствующих физическим величинам:

1) *Оператор координаты*: $\hat{x} = x$ является оператором умножения. (3.1.3)
2) *Оператор полной энергии* – Гамильтониан:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}). \tag{3.1.4}$$

Оператор кинетической энергии:

$$\hat{E}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2. \tag{3.1.5}$$

Оператор потенциальной энергии (обычно оператор умножения): $\hat{U} = U(\vec{r})$ (3.1.6)

3) *Оператор импульса*. Исходя из выражения для кинетической энергии $E_{kin} = \dfrac{p^2}{2m}$, получим, что оператор импульса равен:

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla \tag{3.1.7}$$

Оператор x- проекции импульса на ось $0x$ имеет вид:

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{3.1.8}$$

Аналогично выглядят операторы проекции импульса и на другие оси. Вводятся и другие операторы: момента импульса, проекции момента импульса, спина и так далее.

3.1.2. Собственные функции и собственные значения.

Итак, каждой физической величине сопоставляется оператор. Свойства операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$ определяются уравнениями на собственные функции и собственные значения:

$$\begin{aligned} \hat{F}\varphi_n &= f_n\varphi_n \\ \hat{G}\psi_n &= g_n\psi_n \end{aligned} \tag{3.1.9}$$

где n – немой значок, соответствующий номеру решения. Из этих уравнений находятся функции φ_n или ψ_n и числа f_n или g_n, соответствующих операторам $\hat{F}$ или $\hat{G}$.

Найденные волновые функции ψ_n (их число может быть конечным, а может быть бесконечным) – называются *собственными функциями оператора* $\hat{G}$. Иначе говоря, собственные функции – это такие функции, которые под действием оператора $\hat{G}$ переходят сами в себя, умноженные на постоянное число g_n. Соответствующие значения g_n – *собственные значения оператора* $\hat{G}$.

Физический смысл: **собственные волновые функции ψ_n описывают в квантовой механике такие состояния, в которых данная физическая величина g имеет определенное значение g_n.** Или иначе, если частица (или система) находится в состоянии ψ_n, то описывающая ее физическая величина g в этом состоянии равна g_n и постоянна во времени.

Совокупность собственных значений g_n называют *спектром оператора* $\hat{G}$.

Спектр собственных значений может быть *дискретным* и *непрерывным*. Дискретный спектр g_n имеет место, если уравнение $\hat{G}\psi_n = g_n\psi_n$ имеет решение не при всех, а только при определенных значениях g_n. Непрерывный или сплошной спектр g_n имеет место, когда это уравнение имеет решение при всех значениях g_n или хотя бы при всех g_n в некоторой области. Спектр собственных значений может быть смешанным, т.е. состоящим из дискретных и непрерывных значений g_n.

Примеры:

1). Уравнение на собственные значения оператора координаты $\hat{x} = x$

$$\hat{x}\psi = x\psi \tag{3.1.10}$$

Это уравнение имеет решение при всех значениях координаты, таким образом оператор координаты x имеет сплошной спектр.

2). Уравнение на собственные значения оператора проекции импульса $\hat{p}_x = -i\hbar\,\partial/\partial x$

$$\hat{p}_x\psi = p_x\psi$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi = p_x\psi \tag{3.1.11}$$

Решая (3.1.11), получаем собственные функции оператора проекции импульса

$$\psi_{p_x} = Ae^{\frac{i}{\hbar}p_x x} \tag{3.1.12}$$

Получаем решение уравнения (3.1.11) при любых значениях p_x, отсюда заключаем, что оператор проекции импульса $\hat{p}_x$ имеет непрерывный спектр.

3). Стационарное уравнение Шредингера – уравнение на собственные значения оператора Гамильтона, т.е. оператора полной энергии (3.1.4):

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \tag{3.1.13}$$

При решении этого уравнения многое зависит от вида оператора потенциальной энергии $U(\vec{r})$, при этом можем получить дискретный спектр (определенные уровни энергии, например как в атоме водорода), либо непрерывный спектр (любая энергия, например для свободной частицы).

3.1.3. Правила действия с операторами.

1). Суперпозиция действия операторов

$$\hat{G}(C_1\varphi + C_2\psi) = C_1\hat{G}\varphi + C_2\hat{G}\psi \tag{3.1.14}$$

2). Сумма операторов

$$(\hat{G} + \hat{F})\psi = \hat{G}\psi + \hat{F}\psi \tag{3.1.15}$$

3). Произведение операторов

$$(\hat{G}\hat{F})\psi = \hat{G}(\hat{F}\psi) \tag{3.1.16}$$

Вообще говоря, операторы $\hat{G}$ и $\hat{F}$ некоммутативны, т.е. их последовательное действие не совпадает с последовательным обратным действием операторов: $\hat{G}\hat{F}\psi \neq \hat{F}\hat{G}\psi$. Можно определить *коммутатор двух операторов* или *скобки Пуассона*:

$$\left[\hat{G},\hat{F}\right] = \hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G} \tag{3.1.17}$$

Определение коммутативных операторов – когда их действие не зависит от порядка последовательности операторов:

$$\hat{G}\hat{F} = \hat{F}\hat{G} \ , \tag{3.1.18}$$

Коммутатор таких операторов равен нулю $\left[\hat{G},\hat{F}\right] = 0$. Если последовательное действие двух операторов на стоящую справа функцию зависит от порядка их действия, то такие операторы называются некоммутативными операторами $\left[\hat{G},\hat{F}\right] \neq 0$.

Приведем примеры коммутативных и некоммутативных операторов:

а). Коммутируют операторы координаты y и проекции импульса на перпендикулярную ось, например $\hat{p}_x$:

$$\hat{y}\hat{p}_x\psi = \hat{p}_x\hat{y}\psi \text{ , т.е. } \left[\hat{y},\hat{p}_x\right] = 0 .$$

В самом деле

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

б). Не коммутируют операторы координаты и проекции оператора импульса на эту же ось:

$$\hat{x}\hat{p}_x\psi - \hat{p}_x x\psi = \left[\hat{x},\hat{p}_x\right]\psi \neq 0 .$$

Их коммутатор равен:

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

Или запись в символической форме можно записать:

$$\left[\hat{x},\hat{p}_x\right] = i\hbar \tag{3.1.19}$$

Выводы параграфа:

1). Физические величины, которым соответствуют некоммутативные операторы, не могут иметь одновременно определенные значения, не могут быть одновременно точно измерены.

2). Физические величины, чьи операторы коммутируют, могут быть измерены с любой точностью одновременно.

Примечание 1. Существуют операторы, изменение порядка действия которых приводит к изменению знака $\hat{F}\hat{G} = -\hat{G}\hat{F}$. Такие операторы называются антикоммутирующими операторами. Или иначе их антикоммутатор равен:

$$\hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F} = \left\{\hat{F},\hat{G}\right\} = 0 \tag{3.1.20}$$
