Операторы

Операторы

Рассмотрим некоторую физическую величину f, характеризующую состояние квантовой системы. Значения, которые может принять данная величина, в квантовой механике называются собственными значениями, а о совокупности этих значений говорят как о спектре собственных значений.

- Спектр собственных значений может быть непрерывным, если физическая величина принимает непрерывный ряд значений (пример координата).Спектр может быть дискретным, если собственные значения физических величин образуют дискретный набор.

- Предположим физическая величина f имеет дискретный спектр значений. Волновую функцию системы в состоянии, в котором физическая величина f принимает значение f_n , обозначают ψ_n и называют собственной волновой функцией.

Каждой физической величине в квантовой механике сопоставляется свой оператор.

$$f_{(ФИЗИЧ....ВЕЛИЧИНА)} \rightarrow \hat{f}_{(ОПЕРАТОР...f)}$$

- Оператор – это символ показывающий каким способом волновой функции

$$\psi(x, y, z, t)$$

можно сопоставить волновую функцию

$$\varphi(x, y, z, t).$$

- Если волновая функция ψ_n является собственной функцией для собственного значения f_n, то действие оператора данной физической величины на собственную волновую функцию сводится к умножению собственного значения на собственную волновую функцию:

$$\hat{f}\psi_n = f\psi_n$$

Данное равенство можно рассматривать, как уравнение для нахождения собственных значений величины f.

1. Оператором координаты (функции координат) является сама координата (функция координат). Таким образом действие этих операторов на волновую функцию сводится к простому умножению на координату или функцию координат.

2. Операторы компонент импульса

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

Оператор полного импульса:

$$\hat{\bar{p}} = \hat{p}_x\bar{i} + \hat{p}_y\bar{j} + \hat{p}_z\bar{k}$$

$$\hat{\bar{p}} = -i\hbar\, grad$$

3.Оператор момента импульса.

$\overline{M} = [\overline{r}, \overline{p}]$ - момент импульса.

$\hat{\overline{M}} = [\hat{\overline{r}}, \hat{\overline{p}}]$ - оператор момента импульса.

Операторы компонент момента импульса:

$$\hat{M}_x = y\,\hat{p}_z - z\,\hat{p}_y$$

$$\hat{M}_y = z\,\hat{p}_x - x\,\hat{p}_z$$

$$\hat{M}_z = x\,\hat{p}_y - y\,\hat{p}_x$$

- Подстановка операторов компонент импульса приводит к результату

$$\hat{M}_x = i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$\hat{M}_y = i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$\hat{M}_z = i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

4. Оператор кинетической энергии.

Кинетическая энергия (Т) $T = \dfrac{p^2}{2m}$.

Оператор $\hat{T} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m}$.

Используем оператор импульса $\hat{p} = -i\hbar\nabla$.

Окончательно оператор кинетической энергии

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

5. Оператор потенциальной энергии.

Так как потенциальная энергия является функцией координат, то оператором потенциальной энергии является сама потенциальная энергия:

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

6. Оператор полной энергии:

Полная энергия:

$$E = T_{КИН.} + U_{ПОТЕН.}$$

Оператор:

$$\hat{E} = \hat{T} + \hat{U}$$

Подстановка:

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

- оператор полной энергии.

- В квантовой механике невозможно одновременно точно измерить кинетическую и потенциальную энергию. Этот факт связан с соотношением неопределённостей Гейзенберга. Кинетическая энергия определяется импульсом частицы, а потенциальная энергия значением координат.

Так как в квантовой механике невозможно одновременно измерить координату и импульс, то невозможно одновременно измерить кинетическую и потенциальную энергию.

Операторы

Рассмотрим действие оператора одной из компонент импульса на собственную волновую функцию.

Уравнение для собственных значений импульса

$$\hat{p}_x \psi(x,t) = p_x \psi(x,t)$$

Если зафиксировать момент времени, получим дифференциальное уравнение:

$$-i\hbar \, {}^{\partial}\!/_{\partial x}\, \psi(x) = p_x \psi(x);$$

Операторы

- Разделим переменные:

$$\partial\psi(x)\big/\psi(x) = -\left(p_x\big/i\hbar\right)dx;$$

$$\partial\psi(x)\big/\psi(x) = \left(p_x i\big/\hbar\right)dx;$$

- Проинтегрируем:

$$\ln\psi(x,t) = \left(\frac{p_x\, xi}{\hbar}\right) + C'; \qquad \psi(x,t) = ce^{i\frac{p_x x}{\hbar}}$$

- Полученная волновая функция является координатной частью волны де Бройля, (т.е. частице с компонентой импульса сопоставляется плоская волна распространяющаяся в направлении оси ОХ).