

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.

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

- 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:

$$\hat{f} \Psi_n = f_n \Psi_n$$

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:

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

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \mathit{grad}$$

3. Оператор момента импульса.

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

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

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)

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

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

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:

$$E = T_{\text{КИН}} + U_{\text{ПОТЕН}} .$$

Оператор:

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

Подстановка:

$$\hat{E} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x, y, z) \quad - \text{ оператор полной энергии.}$$

- 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.

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

Уравнение для собственных значений импульса

^

$$p_x \psi(x, t) = p_x \psi(x, t)$$

Если зафиксировать момент времени, получим дифференциальное уравнение:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = p_x \psi(x);$$

- Разделим переменные:

$$\frac{\partial \psi(x)}{\psi(x)} = - \left(\frac{p_x}{i\hbar} \right) dx;$$

$$\frac{\partial \psi(x)}{\psi(x)} = \left(\frac{p_x i}{\hbar} \right) dx;$$

- Проинтегрируем:

$$\ln \psi(x, t) = \left(\frac{p_x x i}{\hbar} \right) + C'; \quad \psi(x, t) = c e^{i \frac{p_x x}{\hbar}}$$

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