Кислицын А.А.
Физика атома, атомного ядра и элементарных частиц

13 (2). Операторы физических величин.

Уравнение Шредингера (диф. уравнение в частных производных) можно решать традиционными методами, с использованием традиционных обозначений, что было проиллюстрировано при рассмотрении предыдущих вопросов. При этом процедура решения и результаты выражаются с помощью довольно громоздких математических выражений.

Чтобы сделать записи более компактными, был разработан (М.Борн, П.Дирак) математический аппарат, основанный на применении линейных операторов. В дальнейшем выяснилось, что более удобной формой записи польза этого аппарата не ограничивается. Оказалось, что с его помощью можно учесть спин электрона, а также некоторые другие релятивистские эффекты, которые прямо в уравнении Шредингера на содержатся.

В математическом аппарате современной квантовой механики большое значение имеет понятие оператора.

В классической механике каждая физическая величина (координата, скорость, импульс, энергия и др.) характеризуется числовым значением в какой-либо точке пространства и (или) в какой-то момент времени. Например, скорость частицы в каждый момент времени имеет вполне определенные числовые значения проекции v_x, v_y, v_z на оси координат; энергия частицы в каждый момент времени также имеет вполне определенные числовые значения и т.д. Другими словами, физические величины классической механики описываются функциями координат и времени.

В квантовой механике, вследствие принципа неопределенности, физические величины, как правило, не имеют определенных числовых значений, а можно говорить только о вероятности получения того или иного значения (в некоторых случаях эта вероятность может быть равна 1). В связи с этим каждая физическая величина (координата, импульс, энергия и т.д.) характеризуется не числовым значением, а оператором, который эту физическую величину представляет. Оператором называется правило, по которому из некоторого математического объекта ψ получается другой объект φ:

$$\varphi = \hat{F}\psi \tag{13.1}$$

(при действии на функцию ψ оператором $\hat{F}$ получается величина φ).

В квантовой механике применяются не любые операторы, а только линейные и самосопряженные ("эрмитовы").

Условие линейности: для любых функций ψ_1 и ψ_2 и любых постоянных чисел a_1 и a_2 должно выполняться равенство:

$$\hat{F}\left(a_1\psi_1 + a_2\psi_2\right) = a_1\hat{F}\psi_1 + a_2\hat{F}\psi_2 \qquad (13.2)$$

Условие самосопряжения: для любых двух функций ψ и φ должно выполняться равенство:

$$\int \psi^* \left(\hat{F}\varphi\right) dV = \int \left(\hat{F}\psi\right)^* \varphi dV \qquad (13.3)$$

где интегрирование производится по всей области изменения независимых переменных dV.

Если в результате применения оператора $\hat{F}$ к некоторой функции ψ получается та же самая функция ψ, умноженная на некоторое число λ, т.е. если

$$\hat{F}\psi = \lambda\psi \qquad (13.4)$$

то такая функция называется собственной функцией этого оператора (собственные функции должны удовлетворять естественным условиям), а число λ называется собственным значением этого оператора. Совокупность всех собственных значений оператора называется его спектром. Смысл условия самосопряженности заключается в том, что у таких операторов собственные значения являются действительными числами, а собственные функции взаимно ортогональны и нормированы, т.е.

$$\int \psi_n^* \psi_m dV = \delta_{nm} \qquad (13.5)$$

Основные положения современной квантовой механики формулируют в виде четырех постулатов, которые являются обобщением экспериментальных фактов:

1).Состояние микрочастицы или системы микрочастиц может быть описано определенной (вообще говоря, комплексной) функцией координат и времени $\psi(\boldsymbol{r},t)$, которая называется волновой функцией. Волновая функция полностью определяет состояние физической системы (с той степенью полноты, которая вообще допускается квантовой теорией). В частности, квадрат модуля этой функции определяет вероятность того, что проведенные измерения обнаружат значения координат частиц в данном элементе пространства (формула (7.9)).

2) Каждая физическая величина, характеризующая движение частиц (эти величины называются динамическими переменными) представляется определенным линейным эрмитовым оператором.

3) При измерении численного значения некоторой динамической переменной, представляемой оператором $\hat{F}$, с определенной вероятностью получается одно из чисел $\lambda_1, \lambda_2 ,..., \lambda_n ,...$ являющихся собственными значениями этого оператора $\hat{F}$.

4) Волновая функция $\psi(\boldsymbol{r},t)$ подчиняется уравнению Шредингера, записанному в форме

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \qquad (13.6)$$

где $\hat{H}$ - оператор Гамильтона (гамильтониан).

Вычисление средних значений динамических переменных

Среднее значение величины $\langle F \rangle$, принимающей значения λ_1, λ_2 ,..., λ_n с вероятностью $|\psi_1|^2, |\psi_2|^2, ..., |\psi_n|^2$, вычисляется по формуле

$$\langle F \rangle = \sum_{i=1}^{n} |\psi_i|^2 \lambda_i \qquad (13.7)$$

Плотность вероятности определяется квадратом модуля нормированной волновой функции

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dV = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi \, dV = 1$$

поэтому формулу (13.7) можно обобщить на среднее значение любой динамической переменной:

$$\langle F \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{F} \psi \, dV \qquad (13.8)$$

Оператор координаты

Выбор конкретного оператора для конкретной динамической переменной определяется согласием полученных результатов с экспериментом. Т.к. величина $\psi^*(x)\psi(x)$ характеризует плотность вероятности нахождения частицы в точке x, то среднее значение координаты x, очевидно, равно

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* x \psi \, dx \qquad (13.9)$$

Сравнение (13.8) и (13.9) показывает, что оператором координаты является умножение волновой функции на эту координату:

$$\hat{x}\psi = x\psi, \quad \hat{y}\psi = y\psi, \quad \hat{z}\psi = z\psi \qquad (13.10)$$

Оператор импульса

По определению собственного значения (13.4) уравнение для проекции импульса на ось x должно иметь вид:

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

Свободная частица, имеющая импульс p_x, представляется плоской волной с волновым числом $k_x = p_x / \hbar$ (формула (5.4)). Поэтому оператор импульса по проекциям:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \qquad (13.11)$$

или в векторной форме:

$$\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x}\boldsymbol{i} + \frac{\partial}{\partial y}\boldsymbol{j} + \frac{\partial}{\partial z}\boldsymbol{k} \right) = -i\hbar \nabla \qquad (13.12)$$

Оператор Гамильтона

В классической механике функцией Гамильтона называется полная энергия, выраженная через импульсы и координаты частиц. Для одной частицы это

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + U(\mathbf{r}) \tag{13.13}$$

Чтобы найти оператор квадрата импульса, подействуем 2 раза оператором импульса на волновую функцию:

$$\hat{p}_x^2\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

Таким образом, оператор Гамильтона в квантовой механике имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + U(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r}) \tag{13.14}$$

Оператор момента импульса

В классической физике момент импульса частицы определяется как векторное произведение радиус-вектора частицы на ее импульс:

$$\boldsymbol{L} = [\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}] = \begin{vmatrix} \boldsymbol{i} & \boldsymbol{j} & \boldsymbol{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} = \qquad (13.15)$$

$$= \left(yp_z - zp_y\right)\boldsymbol{i} + \left(zp_x - xp_z\right)\boldsymbol{j} + \left(xp_y - yp_x\right)\boldsymbol{k}$$

Поэтому в квантовой теории проекциям момента импульса соответствуют операторы:

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad \hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \quad \hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \qquad (13.16)$$

Оператор момента импульса в сферических координатах

Связь декартовых и сферических координат:

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta \tag{13.17}$$

Выполняя элементарные преобразования, находим:

$$\hat{L}_x = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + ctg\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \quad \hat{L}_y = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - ctg\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{13.18}$$

Оператор квадрата момента импульса:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + ctg\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) = \hbar^2\hat{\Lambda} \tag{13.19}$$

где

$$\hat{\Lambda} = -\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\} \tag{13.20}$$

(оператор Лежандра)

Свойства суммы и разности операторов (13.2) аналогичны алгебраическим свойствам суммы и разности чисел, но свойства произведения операторов отличаются от алгебраических свойств чисел, а именно, результат произведения операторов может зависеть от порядка сомножителей. Если

$$\hat{F}\hat{G} = \hat{G}\hat{F} \qquad (13.21)$$

то такие операторы наз. коммутирующими, а если

$$\hat{F}\hat{G} \neq \hat{G}\hat{F} \qquad (13.22)$$

то операторы наз. некоммутирующими. В частности, может быть

$$\hat{F}\hat{G} = -\hat{G}\hat{F} \qquad (13.23)$$

такие операторы наз. антикоммутирующими.

Условие одновременной измеримости различных динамических переменных

Две динамические переменные F и G могут одновременно иметь определенные значения только в тех случаях, когда волновая функция, описывающая состояние системы, является собственной функцией и оператора $\hat{F}$, и оператора $\hat{G}$. Такие операторы являются коммутирующими, т.е. $\hat{F}\hat{G} = \hat{G}\hat{F}$, или коммутатор $\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}$ равен нулю: $\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = 0$.

Действительно, пусть $\hat{F}\psi = \lambda\psi,\quad \hat{G}\psi = \mu\psi$. Тогда

$$\hat{F}\left(\hat{G}\psi\right) = \hat{F}\left(\mu\psi\right) = \mu\hat{F}\psi = \mu\lambda\psi$$

$$\hat{G}\left(\hat{F}\psi\right) = \hat{G}\left(\lambda\psi\right) = \lambda\hat{G}\psi = \lambda\mu\psi$$

Пример коммутирующих операторов

Операторы $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ и $\hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$ коммутируют:

$$\hat{p}_x\left(\hat{p}_y\psi\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}$$

$$\hat{p}_y\left(\hat{p}_x\psi\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial x}$$

Аналогичные равенства можно записать для других проекций импульса: $\hat{p}_x$ и $\hat{p}_z$, $\hat{p}_y$ и $\hat{p}_z$, поэтому все три компонента импульса коммутируют между собой, и могут одновременно иметь определенные значения.

Примеры некоммутирующих операторов

1) Компонент импульса и соответствующая ему координата не коммутируют:

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

$$\hat{x}\left(\hat{p}_x\psi\right) = x\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} \qquad (13.24)$$

Таким образом

$$\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x = -i\hbar \qquad (13.25)$$

Аналогичные выражения можно получить и для операторов $\hat{p}_y$ и $\hat{y}$, $\hat{p}_z$ и $\hat{z}$. Это соответствует принципу и соотношениям неопределенности: координата и импульс микрочастицы не могут одновременно иметь определенные значения.

Компоненты момента импульса между собой не коммутируют. Пользуясь формулами (13.16), находим:

$$\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = i\hbar\hat{L}_z, \quad \hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y = i\hbar\hat{L}_x, \quad \hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z = i\hbar\hat{L}_y \qquad (13.26)$$

Поэтому только одна какая-то проекция момента импульса может иметь определенное значение (например, L_z), две другие остаются неопределенными, кроме случая когда все три проекции равны нулю (т.е. полный момент импульса равен нулю).

В то же время оператор квадрата момента импульса коммутирует с каждым из операторов проекции:

$$\hat{L}_x\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{L}_x = 0, \quad \hat{L}_y\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{L}_y = 0, \quad \hat{L}_z\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{L}_z = 0 \qquad (13.27)$$

Таким образом, определенные значения имеют модуль момента импульса (или квадрат модуля), и одна какая-либо проекция, например, L_z.