Добро пожаловать
в «Физику атома
и атомных явлений»!

Раздел 2
Теоретические основы квантовомеханического описания атомных систем

Тема 6
Операторы основных физических величин. Законы сохранения в квантовой механике

1 Операторы основных физических величин.

2 Собственные функции и собственные значения операторов основных физических величин.

3 Средние значения физических величин.

4 Законы сохранения в квантовой механике.

Цель – ***продолжить формирование системы знаний о квантовомеханическом аппарате атомной физики***

1Операторы основных физических величин

Оператором называют правило, посредством которого каждой функции из некоторого множества сопоставляется функция из того же или другого множества.

Функции Ψ_n , являющиеся решением уравнения $\hat{A}\Psi_n = a_n\Psi_n$, называют ***собственными функциями*** оператора $\hat{A}$,
а соответствующие им коэффициенты a_n – его ***собственными значениями***.

Собственные значения операторов физических величин, измеряемых в опытах, действительны. Операторы таких величин ***эрмитовы*** –для любых двух функций u и υ выполняется условие

$$\int \upsilon^* \hat{A} u \, dV = \int u \left(\hat{A}\upsilon\right)^* dV$$

а их *собственные функции взаимно ортогональны*: если $m \neq n$,

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^* \Psi_m \, d^3\vec{r} = 0$$

Операторы координат

Действие операторов координат $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ состоит в умножении волновой функции на эту координату, например, $\hat{x}\Psi(x,y,z,t) \equiv x\Psi(x,y,z,t)$

$$\hat{x} = x$$

Операторы проекций импульса

Действие операторов проекций импульса состоит в дифференцировании волновой функции по соответствующей координате и умножении на $\hbar / i$: $\hat{p}_x\Psi(x,y,z,t) \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,y,z,t)$

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

$$\hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$$

$$\hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

Операторы кинетической, потенциальной и полной энергии

Физическая величина	Формула в классической физике	Явный вид оператора
Кинетическая энергия	$T = \frac{p^2}{2m}$	$\hat{T} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$
Потенциальная энергия	$U = U(x,y,z,t) = U(\vec{r},t)$	Зависит от вида функции $U(\vec{r},t)$ Действие: $\hat{U}\Psi = U\Psi$
Полная Энергия	$H(\vec{r},\vec{p}) = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r})$	$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})$

Оператор момента импульса и его проекций

Физическая величина	Формула в классической физике	Явный вид оператора	
		в декартовых координатах	в сферических координатах
Момент импульса	$\vec{L} = [\vec{r}, \vec{p}] = L_x\vec{i} + L_y\vec{j} + L_z\vec{k}$	$\vec{L} = \hat{L}_x\vec{i} + \hat{L}_y\vec{j} + \hat{L}_z\vec{k}$	
Проекция момента импульса	$L_x = yp_z - zp_y,$ $L_y = zp_x - xp_z,$ $L_z = xp_y - yp_x.$	$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),$ $\hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),$ $\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$	$\hat{L}_x = -i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\,\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$ $\hat{L}_y = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \mathrm{ctg}\,\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$ $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}.$

Операторы квадрата момента импульса

$$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

В декартовых координатах	В сферических координатах
$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$; $\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$, $\hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$, $\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$.	$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar^2\hat{\Lambda}$; $\hat{\Lambda} = \frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$ $\hat{L}_x = -i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$, $\hat{L}_y = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$, $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$.

2 Собственные функции и собственные значения операторов основных физических величин

Функции Ψ_n , являющиеся решением уравнения $\hat{A}\Psi_n = a_n\Psi_n$, называют ***собственными функциями*** оператора $\hat{A}$, а соответствующие им коэффициенты a_n – его ***собственными значениями***.

Если два оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют, то они имеют общие собственные функции . Справедливо и обратное утверждение: если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ имеют общую полную систему собственных функций, то они коммутируют. Следствием этого положения является утверждение: если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют, то одновременно могут быть определены точные значения этих физических величин.

Операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ называют коммутирующими, если для любой функции выполняется условие: $\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{B}\hat{A}\Psi$ или $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$.

Ортогональную систему функций называют полной, если к ней нельзя добавить ни одной функции, не равной тождественно нулю и ортогональной ко всем функциям системы.

2 Собственные функции и собственные значения операторов основных физических величин

Нахождение множеств собственных значений $\{a_n\}$ и собственных функций $\{\Psi_n\}$ для операторов основных физических величин является важной задачей, так как собственные значения $\{a_n\}$– возможные результаты измерения физической величины *A*.

Конкретное значение a_n будет наблюдаться, если частица находится в состоянии, описываемом собственной функцией Ψ_n , *принадлежащей* этому собственному значению.

2 Собственные функции и собственные значения операторов основных физических величин

Оператор	Уравнение $\hat{A}\Psi_n = a_n \Psi_n$	Собственные функции Ψ_n	Собственные значения a_n
$\hat{p}_x$	$-i\hbar \dfrac{\partial \Psi}{\partial x} = p_x \Psi$	$\Psi(x) = $ $= C \exp\left(\dfrac{i}{\hbar} p_x x\right)$	$-\infty < p_x < \infty$
$\hat{L}_z$	$i\hbar \dfrac{\partial \Psi}{\partial \varphi} = L_z \Psi$	$\Psi(\varphi) = $ $= A \exp\left(\dfrac{i}{\hbar} L_z \varphi\right)$	$L_z = m_l \hbar$ $= m_l$ 0, ± 1, ± 2, …
$\hat{\vec{L}}^2$	$-\hbar^2 \left[\dfrac{1}{\sin\theta} \dfrac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \dfrac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \dfrac{1}{\sin^2\theta} \dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \right] = L^2 \Psi$	$Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) = $ $= N_{lm_l} P_l^{m_l}(\cos\theta)$ $\cdot e^{i m_l \varphi}$	$\lvert \vec{L} \rvert^2 = \hbar^2 l(l+1)$ $l = 0, 1, 2, \ldots$
$P_l^{m_l}(\cos\theta) = \sin^m\theta \dfrac{d^m}{d(\cos\theta)^m} P_l(\cos\theta)$; $N_{lm_l} = \sqrt{\dfrac{(l - m_l)!\,(2l+1)}{(l + m_l)!\,4\pi}}$			

Оператор Гамильтона (полной энергии, если $U \neq f(t)$)

Оператор	Уравнение $\hat{A}\Psi_n = a_n\Psi_n$	Собственные функции	Собственные значения
$\hat{H}(\vec{r},\vec{p})$	$\hat{H}(\vec{r},\vec{p})\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\dfrac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$	$\Psi(\vec{r},t) = \sum_n C_n\Psi_n(\vec{r},t)$ $\Psi_n = C_n \exp\left[i\left(\vec{k}_n\vec{r} - \omega_n t\right)\right]$	$E = \hbar\omega_n$ с вероятностью $\lvert C_n\rvert^2$
	$\left[-\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})\right]\Psi = \mathrm{E}\Psi$	$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})e^{-i\omega t}$	Зависят от вида функции $U(\vec{r})$
	$i\hbar\dfrac{\partial\Psi}{\partial t} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi$	$\Psi = \Psi_0 \exp\left[i\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t\right)\right]$	$E = \hbar\omega$

3 Средние значения физических величин

- Соотношения, имеющие место для *физических величин* в классической механике, в квантовой механике по форме совпадают с соотношениями для *операторов* и *средних значений* этих физических величин.

Вероятность того, что при измерении физической величины *A*, произведённом в момент времени t_1, будет получено значение a_n из её спектра, определяется числом $|C_n|^2$, где C_n – коэффициент в разложении волновой функции $\Psi(\vec{r}, t_1)$ по собственным функциям Ψ_n оператора $\hat{A}$:

$$\Psi(\vec{r}, t_1) = \sum_n C_n \Psi_n(\vec{r}, t_1)$$

3 Средние значения физических величин

Вопрос	Способ получения ответа в квантовой механике
Каково множество $\{a_n\}$ возможных результатов измерения данной физической величины?	Множество возможных результатов измерения физической величины совпадает с множеством собственных значений её оператора
Какова вероятность получения конкретного возможного значения a_n в опыте по измерению физической величины A у частицы, находящейся в состоянии $\Psi(x)$?	Чтобы найти вероятность получения значения a_n в опыте по измерению физической величины A для частицы, находящейся в состоянии $\Psi(x)$, следует разложить функцию $\Psi(x)$ по собственным функциям оператора $\hat{A}$ $$\Psi(x,t_1)=\sum_n C_n \Psi_n(x,t_1)$$ Искомая вероятность ω_n равна квадрату модуля коэффициента C_n: $$\omega_n = \lvert C_n \rvert^2 \quad , \qquad C_n = \int \psi_n^*(x)\,\Psi(x)\,dx$$

3 Средние значения физических величин

Обработка результатов измерения физической величины для частиц, находящихся *в одинаковых состояниях*	В классической физике	В квантовой механике
Результаты измерений	$\{\ \alpha_1,\ \alpha_2,\ \dots,\alpha_N\}$	Каждый из элементов множества $\{\alpha_1,\ \alpha_2,\ \dots,\alpha_N\ \}$ должен совпадать с каким-нибудь элементом множества собственных значений $\{a_n\}$ оператора физической величины
Среднее значение	$\langle\alpha\rangle_{эксп} = \dfrac{\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_N}{N}$	$\langle a\rangle = \sum\limits_n^{n_{max}} \omega_n a_n = \sum\limits_n^{n_{max}} \lvert C_n\rvert^2 a_n$
	$\langle\alpha\rangle_{эксп} = \dfrac{s_1 a_1 + s_2 a_2 + \dots + s_K a_K}{N} = \sum\limits_n^{n_{max}=K} \omega_n a_n$	$\langle a\rangle = \int \Psi^*(x)\hat{A}\Psi(x)\,dx$

3 Средние значения физических величин

Обработка результатов измерения физической величины для частиц, находящихся *в одинаковых состояниях*	В классической физике	В квантовой механике
Среднее квадратичное отклонение (СКО) (разброс, стандартное отклонение)	$\Delta a_{\text{эксп}} = \sqrt{\langle a^2 \rangle_{\text{эксп}} - \langle a \rangle^2_{\text{эксп}}}$	$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle \alpha \rangle$ $(\Delta\hat{A})^2 = (\hat{A} - \langle \alpha \rangle)^2$
СКО отдельного (i) измерения при N измерениях величины a в неизменных условиях	$\Delta a_{\text{эксп}\, i} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \cdot \sum_{i=1}^{N} (\alpha_i - \langle \alpha_i \rangle)^2}$	$\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle = \int \psi^*(x) (\Delta\hat{A})^2 \psi(x) dx$ $(\Delta\hat{A})^2 = (\hat{A} - \langle \alpha \rangle)^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \alpha \rangle^2$ $\Delta a = \sqrt{\langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2}$ $\langle a^2 \rangle = \int \Psi^*(x)\, \hat{A}^2\, \Psi(x) dx$ $\langle a \rangle = \int \Psi^*(x)\, \hat{A}\, \Psi(x)\, dx$

При сравнении результатов эксперимента с результатами теоретического расчета следует сопоставить значения средних квадратичных отклонений, вычисленных по формулам $\Delta a_{\text{эксп}} = \sqrt{\langle a^2 \rangle_{\text{эксп}} - \langle a \rangle^2_{\text{эксп}}}$ и $\Delta a = \sqrt{\langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2}$

4 Законы сохранения в квантовой механике

• **Физическая величина сохраняется с течением времени, если соответствующий ей *оператор не зависит явно от времени* и *коммутирует с оператором полной энергии – оператором Гамильтона*:**

$$\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{F}\right] = 0$$, где $$\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{F}\right] = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{F} - \hat{F}\hat{H})$$ *– квантовые скобки Пуассона*

Если физическая величина *F* является сохраняющейся, то для неё в квантовой механике верны утверждения:

- если величина *F* в некоторый момент времени имеет определённое значение, то и в последующие моменты времени она будет иметь это же значение;
- если в некоторый момент времени состояние частицы описывается суперпозицией собственных функций оператора $\hat{F}$, то вероятность обнаружения каждого из значений оператора $\hat{F}$ на опыте не будет изменяться с течением времени; как следствие будет оставаться постоянным и среднее значение этой величины.

4 Закон сохранения энергии (частные примеры)

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})$$

Условия		Следствия
Если $U \neq U(t)$, то $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$	$\left[\hat{H}, \hat{H}\right] = 0$	Полная энергия сохраняется
Если $U \neq U(t)$ и функция Ψ – решение уравнения $\hat{H}\Psi = E\Psi$		Состояние стационарно; полная энергия сохраняется
Частица свободна; $U = 0$		Энергия сохраняется
Система взаимодействующих частиц замкнута		Энергия сохраняется

4 Закон сохранения импульса (частные примеры)

$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})$		$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$	$\hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$	$\hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$
Условия			Следствия	
Частица в силовом поле (общий случай)	$[\hat{H}, \hat{\vec{p}}] \neq 0$		Импульс не сохраняется	
Частица в силовом поле, но $U = U(x,z) \neq f(y)$	$[\hat{H}, \hat{p}_y] = 0$		Сохраняется проекция импульса p_y	
Частица свободна; $U = 0$	$[\hat{H}, \hat{\vec{p}}] = 0$		Импульс сохраняется	
Система взаимодействующих частиц замкнута	$[\hat{H}, \hat{\vec{p}}] = 0$		Импульс сохраняется	

4 Закон сохранения момента импульса (частные примеры)

$\hat{H}=\dfrac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m}+U(\vec{r})=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(\vec{r})$ $\hat{\vec{L}}=-i\hbar\left[\vec{r},\vec{\nabla}\right]\neq f(t)$	$\hat{L}_x=y\hat{p}_z-z\hat{p}_y=-i\hbar\left(y\dfrac{\partial}{\partial z}-z\dfrac{\partial}{\partial y}\right),$ $\hat{L}_y=z\hat{p}_x-x\hat{p}_z=-i\hbar\left(z\dfrac{\partial}{\partial x}-x\dfrac{\partial}{\partial z}\right),$ $\hat{L}_z=x\hat{p}_y-y\hat{p}_x=-i\hbar\left(x\dfrac{\partial}{\partial y}-y\dfrac{\partial}{\partial x}\right).$	$\hat{L}_x=-i\hbar\left(\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{ctg}\,\theta\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right),$ $\hat{L}_y=-i\hbar\left(\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta}-\mathrm{ctg}\,\theta\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right),$ $\hat{L}_z=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}.$

Условия		Следствия
Частица в силовом поле (общий случай)	$\left[\hat{H},\hat{\vec{L}}\right]\neq 0$	Момент импульса не сохраняется
Частица, находящаяся в сферически симметричном силовом поле	$\left[\hat{H},\hat{\vec{L}}\right]=0$	Сохраняется момент импульса, вычисленный относительно центра симметрии поля (местоположения точечного источника поля)
Частица свободна; $U = 0$	$\left[\hat{H},\hat{\vec{L}}\right]=0$	Момент импульса сохраняется
Система взаимодействующих частиц замкнута	$\left[\hat{H},\hat{\vec{L}}\right]=0$	Полный момент импульса сохраняется

Вопросы для самопроверки

1. Как определяют понятие оператора физической величины?
2. Какими свойствами обладают операторы физических величин?
3. Какой оператор называют линейным?
4. Какой оператор называют эрмитовым?
5. Какие волновые функции называют собственными функциями оператора физической величины?
6. Каково общее правило нахождения собственных функций и собственных значений операторов в квантовой механике?
7. Каков явный вид основных операторов физических величин, каковы их собственные функции и собственные значения?
8. От чего зависит спектр собственных значений оператора физической величины?
9. Как определить вероятность обнаружения микрообъекта в каждом из его возможных состояний?
10. Каковы правила определения среднего значения физической величины, измеряемой при неизменных условиях?
11. Каков алгоритм определения среднего значения физической величины и среднего квадратического отклонения в квантовой механике?
12. Каковы условия сохранения физической величины в квантовой механике? Приведите частные примеры их применения.
13. Постройте блок-схему, отражающую взаимосвязи между основными понятиями квантовой механики, введенными в темах 4 – 6.

Эмерсон Ралф Уолдо (1803 – 1882, амер. писатель и философ)**:**

«Всякая стена – это дверь»

Поздравляю! После усвоения первых шести тем Вы готовы к решению задач с применением методов квантовой механики.

Желаю новых поводов для радости и новых успехов