

## Лекции 7 - 8. Представление физических величин операторами.

*Операторы координаты, импульса, момента импульса, потенциальной и кинетической энергии. Гамильтониан квантовой системы как оператор полной энергии. Основные постулаты квантовой механики. Вероятностный характер результатов измерений в квантовой механике. Вычисление средних значений физических величин в квантовых системах.*

Как уже было сказано процесс измерения любого параметра, характеризующего состояние системы, изменяет это состояние. Следовательно, меняется и волновая функция. Поэтому любому измерению какой-либо физической величины  $A$  в квантовой механике соответствует оператор, обозначаемый как  $\hat{A}$ , переводящий волновую функцию состояния до измерения  $\Psi$  в волновую функцию состояния после измерения  $\check{\Psi}$ , т.е.  $\hat{A}(\Psi) = \check{\Psi}$ . Принцип суперпозиции состояний требует, чтобы этот оператор был линейным  $\hat{A}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\hat{A}\Psi_1 + c_2\hat{A}\Psi_2$ .

В квантовой механике любое значение измеряемой физической величины должно являться *собственным значением* оператора данной физической величины, т.е. если при измерении получается значение  $A$ , то существует такая волновая функция  $\Psi'$ , что выполняется соотношение  $\hat{A}(\Psi') = A \cdot \Psi'$ . Эта функция называется *собственной функцией* данного оператора. Так как измеряемые величины должны быть вещественными, то и все собственные значения данного оператора, соответствующего этой физической величине, должны быть вещественными. Это означает, что оператор должен быть *эрмитовым* (или *комплексно самосопряжённым*.)

Это следует понимать следующим образом. Паре любых комплексно-значных функций  $u$  и  $v$ , заданных в одной области  $V$  можно сопоставить скалярное произведение по следующему правилу  $(u, v) = \int_V v^* \cdot u \cdot dV$  (при условии, что данный интеграл существует).

Аксиомы скалярного произведения выполняются

$$(u, u) = \int_V u^* \cdot u \cdot dV = \int_V |u|^2 \cdot dV \geq 0. \text{ Если } (u, u) = \int_V |u|^2 \cdot dV = 0, \text{ то } u \equiv 0.$$

В комплексном случае условие симметричности скалярного произведения принимает вид

$$(u, v) = \int_V v^* \cdot u \cdot dV = \int_V (u^* \cdot v)^* \cdot dV = (v, u)^*.$$

Для любого числа  $\lambda$  справедливо  $(\lambda u, v) = \lambda(u, v)$  и  $(u, \lambda v) = \lambda^*(u, v)$ .

Линейность по аргументам очевидна.

Оператор  $\hat{B}$  называется *сопряжённым* к оператору  $\hat{A}$  (относительно скалярного произведения) если для любых функций  $u$  и  $v$  выполняется равенство  $(\hat{A}(u), v) = (u, \hat{B}(v))$ . Сопряжённый оператор обозначается  $\hat{B} = \hat{A}^*$ . Оператор называется *самосопряжённым* (или *эрмитовым*) если он совпадает со своим сопряжённым  $\hat{A} = \hat{A}^*$ .

1. Все собственные числа самосопряжённого оператора являются вещественными.

Пусть  $u$  – собственная функция самосопряжённого оператора  $\hat{A}$ . Тогда существует ненулевое число  $A$ , такое, что выполняется равенство  $\hat{A}(u) = A \cdot u$ . Поэтому  $(\hat{A}(u), u) = A \cdot (u, u)$ . Но  $(\hat{A}(u), u) = (u, \hat{A}^*(u)) = (u, \hat{A}(u)) = (u, A \cdot u) = A^* \cdot (u, u)$ . Следовательно,  $A = A^*$  - собственное значение является вещественным.

2. Собственные функции самосопряжённого оператора, отвечающие разным собственным значениям взаимно ортогональны  $(u, v) = 0$ .

Пусть  $\hat{A}(u) = A_1 \cdot u$  и  $\hat{A}(v) = A_2 \cdot v$ . Тогда  $(\hat{A}(u), v) = A_1 \cdot (u, v)$  и  $(\hat{A}(u), v) = (u, \hat{A}^*(v)) = (u, \hat{A}(v)) = (u, A_2 \cdot v) = A_2^* \cdot (u, v) = A_2 \cdot (u, v)$

Но т.к.  $A_1 \neq A_2$ , то равенство  $A_1 \cdot (u, v) = A_2 \cdot (u, v)$  выполняется при  $(u, v) = 0$ .

Все собственные значения данного оператора образуют множество, которое называется спектр оператора. Если это множество является отрезком прямой (т.е. образуют континуум), то говорят, что у оператора непрерывный спектр. Если собственные значения образуют дискретное множество, то говорят о дискретном спектре оператора.

При измерениях конкретные значения физической величины получаются с некоторой вероятностью. Поэтому можно определить среднее значение физической величины, получаемое при измерениях в данном состоянии.

Для оператора с дискретным спектром среднее значение соответствующей физической величины определяется соотношением  $\langle A \rangle = \sum_n p_n A_n$ , где  $p_n = p(A_n)$  - вероятность получения значения  $A_n$ .

В большинстве случаев собственные функции самосопряжённого оператора образуют полную систему функций. Это значит, что любую функцию можно представить в виде суммы  $\Psi = \sum_n c_n \Psi_n$ , где  $\Psi_n$  - все собственные функции, образующие полную систему. (Предполагается, что этот ряд сходится равномерно.) Для поиска коэффициентов разложения следует использовать свойство ортогональности функций. Умножим левую и правую части на  $\Psi_n$

$$(\Psi, \Psi_n) = c_n (\Psi_n, \Psi_n), \quad c_n = \frac{(\Psi, \Psi_n)}{(\Psi_n, \Psi_n)}.$$

Пусть полная система функций ортонормированна, т.е.

$$(\Psi_n, \Psi_m) = 1 \text{ при } n = m \text{ и } (\Psi_n, \Psi_m) = 0 \text{ при } n \neq m.$$

Это условие записывают в виде  $(\Psi_n, \Psi_m) = \delta_{nm}$ , где символ Кронекера определяют как функцию от двух натуральных чисел

$$\delta(n, m) = \delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m \\ 0, & n \neq m \end{cases}.$$

При выполнении этих условий получаем, что  $c_n = (\Psi, \Psi_n)$ .

Будем предполагать, что для функции  $\Psi$  выполняется условие нормировки  $\int_V |\Psi|^2 dV = 1$ ,

которое можно переписать в виде  $(\Psi, \Psi) = 1$ . Тогда

$$(\Psi, \Psi) = \left( \sum_n c_n \Psi_n, \sum_m c_m \Psi_m \right) = \sum_m c_n (c_m)^* (\Psi_n, \Psi_m) = \sum_n |c_n|^2 = 1.$$

Если функцию, нормированную на единицу, разложить в ряд по полной ортонормированной системе собственных функций самосопряжённого оператора физической величины, то квадраты модулей коэффициентов разложения дадут вероятности получения собственных значений, соответствующих данным собственным функциям. Т.е. если  $(\Psi, \Psi) = 1$  и

$(\Psi_n, \Psi_m) = \delta_{nm}$ , то  $p_n = p(A_n) = |c_n|^2$ , где  $c_n = (\Psi, \Psi_n)$  при выполнении  $\hat{A}(\Psi_n) = A_n \cdot \Psi_n$ . В этом случае среднее значение можно определить равенством

$$\langle A \rangle = \sum_n p_n A_n = \sum_n |c_n|^2 A_n = \sum_m c_n (c_m)^* (\Psi_n, \Psi_m) A_n = \left( \sum_n A_n c_n \Psi_n, \sum_m c_m \Psi_m \right) = (\hat{A}(\Psi), \Psi).$$

Если оператор имеет непрерывный спектр, то среднее значение соответствующей физической величины определяется аналогично

$$\langle A \rangle = (\hat{A}(\Psi), \Psi) = \int_V \Psi^* \hat{A}(\Psi) dV.$$

Следовательно, если функция  $\Psi$ , описывающая состояние системы является собственной для данного оператора  $\hat{A}$ , то при измерении мы получаем пропорциональную функцию  $\tilde{\Psi} = A \cdot \Psi$ , которая «теряет условие нормировки на единицу»  $\int_V |\tilde{\Psi}|^2 dV = \int_V |A \cdot \Psi|^2 dV = A^2$ . Т.е. можно считать, что состояние системы не меняется. Очевидно, что вероятность получения результата  $A$  при измерениях в этой ситуации равна 1. И среднее значение совпадает с результатом  $\langle A \rangle = A$ .

Если в каком-то состоянии, определяемом функцией  $\Psi$  надо измерить одновременно две физические величины  $A$  и  $B$ , то согласно общим правилам измерений надо действовать соответствующими операторами  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  на пси-функцию данного состояния. Если эта функция является собственной одновременно для обоих операторов, то состояние системы не изменится и вероятность получения обоих результатов равна единице. Говорят, что в этом случае *две величины одновременно могут быть измерены с сколь угодно точностью*. В этом случае результаты измерений не зависят от порядка их проведения, т.к.  $\hat{A}(\hat{B}(\Psi)) = \hat{B}(\hat{A}(\Psi))$ .

В общем случае каждое измерение меняет состояние системы, поэтому результаты будут зависеть от порядка измерений  $\hat{A}(\hat{B}(\Psi)) \neq \hat{B}(\hat{A}(\Psi))$ .

Коммутатором двух операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  называется оператор  $[\hat{A}, \hat{B}]$ , определяемый соотношением  $[\hat{A}, \hat{B}](\Psi) = \hat{A}(\hat{B}(\Psi)) - \hat{B}(\hat{A}(\Psi))$ .

Смысл этого определения можно уяснить, если переписать определение в другом виде

$$\hat{A}(\hat{B}(\Psi)) = \hat{B}(\hat{A}(\Psi)) + [\hat{A}, \hat{B}](\Psi).$$

Т.е. коммутатор – это добавочный оператор, позволяющий переставлять порядок операторов.

Если для двух операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  их коммутатор является нулевым оператором  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{0}$ , то говорят, что эти операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  перестановочны или *коммутируют* друг с другом.

Оказывается, что если для операторов двух величин  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  выполняется соотношение  $[\hat{A}, \hat{B}] = i \cdot \hat{K}$ , где  $\hat{K}$  - оператор некоторой величины, то для неопределённостей этих величин

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{|\langle K \rangle|}{2}.$$

Как известно, две физические величины могут быть одновременно измерены со сколь угодно точностью только в случае, если они канонически не сопряжены  $\Delta A \cdot \Delta B = 0$ . Поэтому для них должно быть  $|\langle K \rangle| = 0$ , т.е.  $\hat{K} = \hat{0}$  (нулевой оператор). Это значит, что *две величины одновременно могут быть измерены с сколь угодно точностью, если их операторы коммутируют, т.е. их коммутатор является нулевым оператором*.

### Операторы квантовой механики.

1. Операторы координаты определяются действием на функции

$$\hat{x}(\Psi) = x \cdot \Psi, \quad \hat{y}(\Psi) = y \cdot \Psi, \quad \hat{z}(\Psi) = z \cdot \Psi.$$

Все три оператора перестановочны между собой. Например,

$$\text{коммутатор } [\hat{x}, \hat{y}](\Psi) = \hat{x}(\hat{y}(\Psi)) - \hat{y}(\hat{x}(\Psi)) = x \cdot y \cdot \Psi - y \cdot x \cdot \Psi = 0, \text{ т.е. } [\hat{x}, \hat{y}] = \hat{0}.$$

Следовательно, координаты могут быть одновременно измерены с любой точностью.

Оператор координаты является самосопряженным. Проверим это, например, для  $\hat{x}$ :

$$\begin{aligned}
(\hat{x}(\Psi_1), \Psi_2) &= \int_V \Psi_2^* \cdot \hat{x}(\Psi_1) \cdot dV = \int_V \Psi_2^* \cdot x \cdot \Psi_1 \cdot dV = \int_V \Psi_2^* \cdot x^* \cdot \Psi_1 \cdot dV = \\
&= \int_V (x\Psi_2)^* \cdot \Psi_1 \cdot dV = (\Psi_1, \hat{x}(\Psi_2))
\end{aligned}$$

Собственные числа этого оператора – это значения координат. Очевидно, что эти значения – действительные числа. Оператор координаты обладает непрерывным спектром, поэтому среднее значение, например, координаты  $x$  определяется равенством

$$\langle x \rangle = \int_V \Psi^* \hat{x}(\Psi) dV = \int_V \Psi^* x \Psi dV = \int_V x |\Psi|^2 dV.$$

Оператор радиус-вектора определяется как векторная функция

$$\vec{R}(\Psi) = \vec{e}_x \hat{x}(\Psi) + \vec{e}_y \hat{y}(\Psi) + \vec{e}_z \hat{z}(\Psi) = x \cdot \Psi \cdot \vec{e}_x + y \cdot \Psi \cdot \vec{e}_y + z \cdot \Psi \cdot \vec{e}_z$$

где  $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$  – орты декартовой системы координат.

2. Оператор проекции импульса на ось декартовой системы координат

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

Проверим, что этот оператор самосопряженный для одномерного случая. Т.к. частица находится в ограниченной области, то на границе области волновая функция частицы обязательно обращается в ноль. Если область задана интервалом  $a < x < b$ , то  $\Psi(a) = 0$  и  $\Psi(b) = 0$

$$\begin{aligned}
(\hat{p}_x(\Psi_1), \Psi_2) &= \int_a^b \Psi_2^* \cdot \hat{p}_x(\Psi_1) \cdot dx = \int_a^b \Psi_2^* \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} \cdot dx = \frac{\hbar}{i} \int_a^b \Psi_2^* \cdot \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} \cdot dx = \\
&= \frac{\hbar}{i} \left\{ \int_a^b \frac{\partial \Psi_2^*}{\partial x} \cdot \Psi_1 \cdot dx - \int_a^b \frac{\partial \Psi_2^*}{\partial x} \cdot \Psi_1 \cdot dx \right\} = \int_a^b \left( -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_2^*}{\partial x} \right) \cdot \Psi_1 \cdot dx = \int_a^b \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} \right)^* \cdot \Psi_1 \cdot dx = (\Psi_1, \hat{p}_x(\Psi_2))
\end{aligned}$$

Собственные значения оператора проекции импульса – это значения проекции импульса. Найдём, например, собственные функции оператора проекции импульса на ось  $X$ . Для этого надо разрешить операторное уравнение  $\hat{p}_x(\Psi) = p_x \cdot \Psi$ . С учётом определения оператора получаем обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} = p_x \cdot \Psi,$$

которое решаем методом разделения переменных  $\frac{d\Psi}{\Psi} = i \frac{p_x}{\hbar} \cdot dx$ , откуда  $\Psi = C \cdot e^{\frac{i p_x \cdot x}{\hbar}}$ , где  $C$  не зависит от  $x$ .

Коммутатор операторов проекций импульса на разные координатные оси

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

Т.е. координаты импульсов могут быть измерены одновременно с произвольной точностью.

Найдём коммутатор оператора координаты и проекции импульса на одну и ту же ось

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

Таким образом,  $[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar \cdot \hat{I}$ , где  $\hat{I}$  – единичный оператор, т.е.  $\hat{I}(\Psi) = \Psi$ .

С учётом того, что  $|\langle \hat{I} \rangle| = 1$  для импульса вдоль оси  $X$  и координаты  $x$  можно написать соотношение

$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ . Т.е. эти величины являются канонически сопряжёнными.

Найдём коммутатор оператора координаты и проекции импульса на разные оси

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

Т.е. эти величины не являются канонически сопряжёнными.

Оператор вектора импульса

$$\hat{\vec{p}}(\Psi) = \vec{e}_x \hat{p}_x(\Psi) + \vec{e}_y \hat{p}_y(\Psi) + \vec{e}_z \hat{p}_z(\Psi) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y} \vec{e}_y + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \vec{e}_z = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \Psi,$$

где оператор «набла» в декартовых координатах задаётся в виде  $\vec{\nabla} \Psi = \frac{\partial \Psi}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial \Psi}{\partial y} \vec{e}_y + \frac{\partial \Psi}{\partial z} \vec{e}_z$ .

В квантовой механике вводят оператор *полной энергии*  $\hat{E}$ , такой, что изменение волновой функции во времени (или как говорят *эволюция*) полностью определяется этим оператором:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{E}(\Psi).$$

Собственные значения оператора полной энергии – это значения энергии системы:

$\hat{E}(\Psi) = E \cdot \Psi$ . Найдём вид собственных функций для оператора полной энергии.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E \cdot \Psi, \quad \frac{d\Psi}{\Psi} = -i \frac{E}{\hbar} \cdot dt, \quad \Psi = \psi \cdot e^{-i \frac{E}{\hbar} t},$$

где  $\psi$  - функция, не зависящая от времени.

Если энергия системы не меняется (стационарное состояние), то волновая функция имеет вид

$$\Psi = \psi \cdot e^{-i \frac{E}{\hbar} t}.$$

### Построение операторов квантовой механики

Для построения оператора квантовой механики, соответствующей некоторой динамической переменной в классической механике, следует сначала записать классическое выражение этой величины через импульс и координаты, а затем заменить импульс и координату соответствующими операторами.

### 3. Оператор момента импульса.

В классической физике вектор момента импульса относительно некоторой точки определяется

$$\text{выражением } \vec{L} = \vec{R} \times \vec{p} = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} = \vec{e}_x (yp_z - zp_y) + \vec{e}_y (zp_x - xp_z) + \vec{e}_z (xp_y - yp_x),$$

где  $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$  - орты декартовой системы координат.

Тогда вектор-оператор момента импульса должен принять вид

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{R}} \times \hat{\vec{p}} = \vec{e}_x (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) + \vec{e}_y (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) + \vec{e}_z (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x).$$

Операторы проекций моментов импульса на оси

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x.$$

*Замечание.* Т.к. операторы проекции импульса на ось и координаты на *другую* ось коммутируют друг с другом, то в последних трёх равенствах их порядок не влияет на результат.

Рассмотрим, например, коммутатор

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y](\Psi) &= \hat{L}_x(\hat{L}_y(\Psi)) - \hat{L}_y(\hat{L}_x(\Psi)) = (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)(\Psi) - (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)(\Psi) = \\ &= \left( y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \right) \left( z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) - \left( z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \right) \left( y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial z} - z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right) = \\ &= -y\hbar^2 \frac{\partial \Psi}{\partial x} - yz\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z \partial x} + yx\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + z^2\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y \partial x} - zx\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y \partial z} + zy\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial z} - zz\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial y} - xy\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \end{aligned}$$

$$+x\hbar^2 \frac{\partial \Psi}{\partial y} + zx\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z \partial y} = y \frac{\hbar}{i} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y} = \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right) = \frac{\hbar}{i} (\hat{y}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_y)(\Psi) = -\frac{\hbar}{i} \hat{L}_z(\Psi)$$

Т.е. проекции импульса на разные оси не могут быть измерены одновременно с произвольной точностью.

Запишем оператор проекции момента импульса на ось  $z$ , т.е.  $\hat{L}_z$ , в цилиндрической системе координат  $(r, \varphi, z)$ :  $x = r \cos \varphi$ ,  $y = r \sin \varphi$ . Откуда  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ ,  $\varphi = \arctg \frac{y}{x}$ .

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} = \cos \varphi, \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} = \sin \varphi,$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{1}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} \frac{y}{x^2} = -\frac{\sin \varphi}{r}, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{1}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} \frac{1}{x} = \frac{\cos \varphi}{r}.$$

Выразим производные

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{\partial \Psi}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \cos \varphi \frac{\partial \Psi}{\partial r} - \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi}, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial y} = \frac{\partial \Psi}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \sin \varphi \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi}.$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_z(\Psi) &= \hat{x}(\hat{p}_y(\Psi)) - \hat{y}(\hat{p}_x(\Psi)) = x \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right) - y \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = \\ &= \frac{\hbar}{i} \left\{ r \cos \varphi \left( \sin \varphi \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \right) - r \sin \varphi \left( \cos \varphi \frac{\partial \Psi}{\partial r} - \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \right) \right\} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

Собственные значения оператора проекции импульса на ось  $z$  – это величины проекции момента импульса  $\hat{L}_z(\Psi) = L_z \cdot \Psi$ . Найдем вид собственных функций, отвечающих этим собственным значениям:  $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} = L_z \cdot \Psi$ , откуда  $\Psi = C \cdot e^{i \frac{L_z}{\hbar} \varphi}$  (где  $C$  – функция, не зависящая от  $\varphi$ ).

Учитывая, что при повороте вокруг оси  $z$  на угол  $2\pi m$  ( $m$  – целое число) вид функции не меняется, получаем равенство  $\frac{L_z}{\hbar} = m$ , т.е. проекция момента импульса на ось  $z$  может принимать значения, кратные приведенной постоянной Планка  $\hbar$ :  $L_z = m \cdot \hbar$ . В этом смысле постоянную Планка иногда называют *квантом действия*.

#### 4. Оператор потенциальной энергии

В классической механике потенциальная энергия зависит от взаимного положения тел.

Выражение для потенциальной энергии квазиупругой силы (вдоль оси  $X$ )  $U = \frac{kx^2}{2}$  в операторном виде будет выглядеть так же  $\hat{U}(\Psi) = \frac{k\hat{x}^2}{2}(\Psi) = \frac{k}{2} \hat{x}(\hat{x}(\Psi)) = \frac{k}{2} x \cdot x \cdot \Psi = \frac{kx^2}{2} \cdot \Psi$ .

Выражение для потенциальной энергии кулоновского взаимодействия двух точечных зарядов  $U = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 \cdot q_2}{R}$  перейдет в оператор такого же вида  $\hat{U}(\Psi) = \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{\hat{1}}{R} \right)(\Psi)$ , где оператор

$\left( \frac{\hat{1}}{R} \right)$  является обратным к оператору  $\hat{R}(\Psi) = R \cdot \Psi$ . Очевидно, что  $\left( \frac{\hat{1}}{R} \right)(\Psi) = \frac{1}{R} \cdot \Psi$ , поэтому

$$\hat{U}(\Psi) = \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0 R} \cdot \Psi$$

### 5. Оператор кинетической энергии.

В классической механике кинетическая энергия тела определяется выражением

$$E_K = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}. \text{ Поэтому оператор кинетической энергии имеет вид}$$

$$\hat{E}_K(\Psi) = \frac{\hat{p}^2}{2m}(\Psi) = \frac{1}{2m} \hat{p}(\hat{p}(\Psi)) = \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}(\Psi) \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2(\Psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi.$$

Найдём собственные значения оператора кинетической энергии для одномерного случая

$$\hat{E}_K(\Psi) = E_K \cdot \Psi \text{ или } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E_K \cdot \Psi. \text{ Получаем уравнение, с которым уже встречались в за-}$$

даче об одномерной яме с непроницаемыми стенками  $\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_K \cdot \Psi = 0.$

$$\text{Откуда } \Psi = C \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_K}}{\hbar} x + \alpha\right).$$

### 6. Оператор Гамильтона.

В классической механике механическая энергия тела, записанная как функция импульса и координат, называется *функцией Гамильтона*  $H = E_K + U = \frac{p^2}{2m} + U.$

В квантовой механике соответствующий оператор называется оператором Гамильтона (или *гамильтонианом*)

$$\hat{H}(\Psi) = \frac{\hat{p}^2}{2m}(\Psi) + \hat{U}(\Psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi + U \cdot \Psi.$$

Уравнение Шрёдингера.

Если рассматривать *нерелятивистские* частицы, то их полную энергию можно определить формулой  $H = E_K + U = \frac{p^2}{2m} + U.$  Поэтому оператор полной энергии в нерелятивистском

случае совпадает с оператором Гамильтона  $\hat{E}(\Psi) = \hat{H}(\Psi).$  Поставляя это равенство в уравне-

ние *эволюции волновой функции*  $i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{E}(\Psi),$  получаем временное уравнение Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi + U \cdot \Psi.$$

Таким образом, временное уравнение Шрёдингера описывает *нерелятивистские частицы.*

*Замечание.* Если рассматривать релятивистские частицы, то их полная энергия связана с импульсом соотношением  $E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4.$  Поэтому соответствующее операторное равенство

$$\text{примет вид } \hat{E}^2(\Psi) = c^2 \hat{p}^2(\Psi) + m_0^2 c^4 \cdot \Psi. \text{ Но } \hat{E}^2(\Psi) = \hat{E}(\hat{E}(\Psi)) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left( i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} \right) = -\hbar^2 \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2},$$

$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta\Psi.$  В итоге получается уравнение  $\hbar^2 \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = c^2 \hbar^2 \Delta\Psi - m_0^2 c^4 \cdot \Psi,$  которое описывает свободные релятивистские частицы (с целым спином) и носит название *уравнения Гордона-Фока.*

Если попытаться записать *линейную* связь между энергией и импульсом для релятивистского случая в виде  $E = c\sigma_x p_x + c\sigma_y p_y + c\sigma_z p_z + \sigma_0 m_0 c^2,$  так, чтобы выполнялось равенство

$$\left( c\sigma_x p_x + c\sigma_y p_y + c\sigma_z p_z + \sigma_0 m_0 c^2 \right)^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4, \text{ то после подстановки в уравнение эволюции волновой функции получится уравнение Дирака}$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \sigma_x c \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \sigma_y c \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \sigma_z c \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial z} + \sigma_0 m_0 c^2 \Psi.$$

В этом уравнении  $\sigma_0, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  – специальные матричные операторы (4x4), а  $\Psi = (\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \Psi_4)$  – вектор-функция.

**Пример.** В момент времени  $t=0$  волновая функция частицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками имеет вид

$$\psi(x) = A \cdot \cos\left(\frac{3\pi x}{2a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{2a}\right).$$

Считая, что масса частицы равна  $m_0$ , найдите среднюю кинетическую энергию частицы в данном состоянии. Укажите, суперпозицией каких состояний частицы в потенциальной яме является данное состояние. Найдите волновую функцию  $\Psi(x, t)$ .

**Решение.** В одномерной яме с непроницаемыми стенками как стационарной задаче, волновые функции частицы имеет вид

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}, \text{ где } E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2.$$

При  $t=0$  получаем, соответственно,  $\Psi_n(x, 0) = \psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$

Воспользуемся формулой Эйлера  $e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$ , откуда  $\cos \alpha = \frac{e^{i\alpha} + e^{-i\alpha}}{2}$ ,

$\sin \alpha = \frac{e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}}{2i}$ . Тогда

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A \cdot \cos\left(\frac{3\pi x}{2a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{2a}\right) = A \cdot \frac{e^{i\frac{3\pi x}{2a}} + e^{-i\frac{3\pi x}{2a}}}{2} \cdot \frac{e^{i\frac{\pi x}{2a}} - e^{-i\frac{\pi x}{2a}}}{2i} = \frac{A}{2} \cdot \frac{e^{i\frac{2\pi x}{a}} - e^{-i\frac{2\pi x}{a}} - \left(e^{i\frac{\pi x}{a}} - e^{-i\frac{\pi x}{a}}\right)}{2i} = \\ &= \frac{A}{2} \cdot \left( \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) - \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right) \end{aligned}$$

Нормируем функцию  $\psi$  на единицу

$$\begin{aligned} \int_0^a |\psi(x)|^2 dx &= \frac{|A|^2}{4} \cdot \int_0^a \left( \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) - \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right)^2 dx = \\ &= \frac{|A|^2}{4} \cdot \left\{ \int_0^a \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx - 2 \int_0^a \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx + \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \right\} = 1 \end{aligned}$$

Теперь воспользуемся тем, что  $\int_0^a \sin\left(\frac{k\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{s\pi x}{a}\right) dx = 0$  при  $k \neq s$  и  $\int_0^a \sin^2\left(\frac{k\pi x}{a}\right) dx = \frac{a}{2}$

для  $k > 0$ . Поэтому  $\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = \frac{|A|^2}{4} \cdot \left\{ \frac{a}{2} + \frac{a}{2} \right\} = 1$ , откуда  $|A| = \frac{2}{\sqrt{a}}$ , т.е. множитель можно взять

в виде  $A = \frac{2}{\sqrt{a}}$ . В итоге получаем

$$\psi(x) = A \cdot \cos\left(\frac{3\pi x}{2a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{2a}\right) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cdot \left( \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) - \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right)$$

Т.к. система функций  $\psi_n$  ортонормированная и функция  $\psi$  нормирована на единицу, то ищем коэффициенты разложения

$$c_n = (\Psi, \Psi_n) = \int_0^a \Psi_n^* \Psi dx = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \frac{1}{\sqrt{a}} \cdot \left( \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) - \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right) dx$$

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{1}{\sqrt{a}} \left\{ \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cdot \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx - \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \right\}$$

$$\text{откуда } c_1 = \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{a}{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}, c_2 = -\sqrt{\frac{2}{a}} \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{a}{2} = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \text{ остальные } c_n = 0.$$

Т.е. вероятность обнаружения частицы в основном состоянии ( $n=1$ ) равна  $p_1 = |c_1|^2 = \frac{1}{2}$  и в первом возбуждённом состоянии  $p_2 = |c_2|^2 = \frac{1}{2}$ .

$$\text{Поэтому } \Psi(x, t) = \Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} - \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t},$$

где

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, E_2 = \frac{2\hbar^2 \pi^2}{ma^2}.$$

Т.к. энергия частицы в этом состоянии не определена однозначно, то данное состояние не является стационарным.

Найдём среднюю кинетическую энергию

$$\langle E_k \rangle = p_1 E_1 + p_2 E_2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{2\hbar^2 \pi^2}{ma^2} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{4ma^2}.$$

Найдём среднее значение кинетической энергии другим способом – прямым вычислением по формуле

$$\begin{aligned} \langle E_k \rangle &= \int_V \Psi^* \hat{E}_k (\Psi) dV = \int_0^a \Psi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} \right) dx = \\ &= \int_0^a \left( \frac{1}{\sqrt{a}} \cdot \left( \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) - \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right) \right) \left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{a}} \cdot \left( \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) - \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right) \right) dx = \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{a} \frac{a}{2} \left( \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 - \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \right) = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{4ma^2} \end{aligned}$$