TA'LIM FIDOYILARI
GUVOHNOMA № 1170
ISSN:2181-2160
SJIFACTOR: 4.27 RESEARCHBIB(I.F): 6.2 U.I.F: 6.8
WWW.REANDPUB.UZ

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЕ ОПЕРАТОРЫ

Мухтаров Э.К.
Андижанский государственный университет

Аннотация: Квантомеханическая задача – это ситуация, требующая от студентов мыслительных и практических действий на основе законов и методов квантовой механики, направленных на овладение знаниями по квантовой механике и на развитие мышления. Хотя способы решения традиционных задач хорошо известны, но организация деятельности студентов по решению задач является одним из условий обеспечения глубоких и прочных знаний у студентов.
Ключевые слова: Квантовая механика, решение задач, оператор, коммутатор, радиус вектор, Гамильтониан.

Abstract: A quantum mechanical problem is a situation that requires students to engage in mental and practical actions based on the laws and methods of quantum mechanics, aimed at mastering knowledge of quantum mechanics and developing thinking. Although the methods for solving traditional problems are well known, organizing students' problem-solving activities is one of the conditions for ensuring deep and lasting knowledge among students.
Keywords: Quantum mechanics, problem solving, operator, commutator, radius vector, Hamiltonian.

ВВЕДЕНИЕ

Дисциплина «Квантовая механика» представляет собой начальное введение в основной раздел современной теоретической физики.

Квантовая механика принадлежит к числу фундаментальных дисциплин, составляющих основу подготовки современного физика. Ее изучение необходимо для решения фундаментальных проблем физики – описания природы и характеристик химической связи, предсказания реакционной способности, химических и физических свойств веществ, а также круга связанных с ними технологических вопросов.

При изучении курса квантовой механики большое значение имеют практические применения теоретических знаний, главное из которых – умение решать задачи.

Решение задач позволяет лучше усвоить теоретический материал, способствует развитию творческого мышления, а умение решать задачи является одним из основных показателей успешного усвоения дисциплины.

ЛИТЕРАТУРА И МЕТОД

В классической механике работа ведется с такими величинами, как координата, импульс, момент импульса частицы и их функциями. Для краткости их называют динамическими переменными. Каждая динамическая переменная имеет определенное числовое значение в каждый момент времени. Основная проблема состоит в том, чтобы выразить числовые значения одной динамической величины через другую, иными словами, найти между ними функциональную связь.

TA'LIM FIDOYILARI
GUVOHNOMA № 1170
ISSN:2181-2160
SJIFACTOR: 4.27 RESEARCHBIB(I.F): 6.2 U.I.F: 6.8
WWW.REANDPUB.UZ

В квантовой механике ситуация иная, поскольку здесь мы можем говорить о вероятности того, что динамическая переменная будет иметь то или иное значение, и об их среднем значении. Поэтому в квантовой механике динамические переменные выражаются не числовыми значениями, как в классической механике, а операторами. В качестве постулата квантовой механики к каждой динамической переменной выбирается или адаптируется определенный оператор. В квантовой механике для изображения физических величин служат операторы. С математической точки зрения оператор представляет собой некий способ перехода от одной волновой функции к другой. Для обозначения оператора используется буква со шляпкой, например, $\hat{A}$. Запись $\hat{A}\psi(\xi)$ означает действие оператора $\hat{A}$ на функцию $\psi(\xi)$, которое в общем случае не сводится к обычному умножению. Результатом действия оператора на функцию будет функция.

Произведением двух операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ называется оператор $\hat{A}\cdot\hat{B}$, действие которого на функцию сводится к последовательному действию сначала оператора $\hat{B}$, а потом оператора $\hat{A}$ на результат действия $\hat{B}$:

$$(\hat{A}\cdot\hat{B})\cdot\psi = \hat{A}\cdot(\hat{B}\cdot\psi)$$

Суммой двух операторов Â и $\hat{B}$ называется оператор Â $\pm\hat{B}$, который действует на функцию f следующим образом:

$$(\hat{A}\pm\hat{B})\cdot\psi = \hat{A}\psi \pm \hat{B}\psi$$

Если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ равны:

$$(\hat{A}-\hat{B})\,\psi = 0$$

Операторы Â и $\hat{B}$ определены в одной и той же области и одинаково действуют на функцию.

Выражение вида:

$$\hat{A}\cdot\hat{B}-\hat{B}\cdot\hat{A} = [\hat{A},\hat{B}]$$

называется коммутатором операторов Â и $\hat{B}$. Если [Â, $\hat{B}$]=0, то говорят, что операторы коммутируют. В противном случае операторы не коммутируют.

Таблица 1. Основные квант–механические операторы.

Динамическая переменная классической механики	Операторы квантовой механики
Радиус вектор и координаты: $\vec{r} = x\vec{\imath} + y\vec{\jmath} + z\vec{k}$	$\hat{\vec{r}} = \hat{x}\vec{\imath} + \hat{y}\vec{\jmath} + \hat{z}\vec{k}$ $x = \hat{x}, y = \hat{y}, z = \hat{z}$
Импульс $\vec{p} = p_x\vec{\imath} + p_y\vec{\jmath} + p_z\vec{k}$	$\hat{\vec{p}} = \hat{p}_x\vec{\imath} + \hat{p}_y\vec{\jmath} + \hat{p}_z\vec{k}$ $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$
Момент импульса:	$\hat{\vec{M}} = [\hat{\vec{r}},\hat{\vec{p}}]$

$\vec{M} = [\vec{r}, \vec{p}]$ где $M_x = yp_я - zp_y,$ $M_y = zp_x - xp_z,$ $M_z = xp_y - yp_x$	где $\widehat{M}_x = y\hat{p}_x - z\hat{p}_y$ $\widehat{M}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z,$ $\widehat{M}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$
Квадрат момента импульса: $\vec{M}^2 = M_x^2 + M_x^2 + M_x^2$	$\widehat{\vec{M}}^2 = \widehat{M}_x^2 + \widehat{M}_x^2 + \widehat{M}_x^2$
Кинетическая энергия: $T = \dfrac{\vec{p}^2}{2m}$	$\hat{T} = \dfrac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$
Полная энергия: $E = T + U(\vec{r})$ $U(\vec{r})$-потенциальная энергия	Гамильтониан: $H = \dfrac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r}) = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})$ $\Delta = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial z^2}$

РЕЗУЛЬТАТЫ

При решении заданий студент наполняет конкретным содержанием, пока еще не освоенный формализм квантовой механики, знакомится с новыми понятиями, «наводя мосты» от классических понятий к квантовым. Небольшая иллюстрация применения волновой функции для получения наглядных результатов помогает студенту привыкнуть к новым объектам и актуализировать свои математические навыки.

Для понимания квантового оператора рассмотрим некоторые примеры.

Задание 1. Доказать, что если выполняется условие $[\hat{A}\hat{B}] = 1$, то справедливо следующие равенство: $[\hat{A}, \hat{B}^2] = 2\hat{B}$.

Решение:

Учитывая определение коммутатора, можно переформатировать следующим образом: доказать, что

$$[\hat{A}, \hat{B}^2] = \hat{A}\hat{B}^2 - \hat{B}^2\hat{A} = 2\hat{B} \qquad (1)$$

если выполняется

$$[\hat{A}\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 1 \qquad (2)$$

Для доказательство выпишем из условия (2) следующие соотношение для операторного произведения $\hat{A}\hat{B}$:

$$\hat{A}\hat{B} = 1 + \hat{B}\hat{A}$$
$$\underline{\hat{A}\hat{B}}\hat{B}\psi - \hat{B}\hat{B}\hat{A}\psi = (1+\hat{B}\hat{A})\hat{B}\psi - \hat{B}\hat{B}\hat{A}\psi = \hat{B}\psi + \hat{B}\underline{\hat{A}\hat{B}}\psi - \hat{B}\hat{B}\hat{A}\psi =$$
$$= \hat{B}\psi + \hat{B}(1+\hat{B}\hat{A})\psi - \hat{B}\hat{B}\hat{A}\psi =$$
$$= 2\hat{B}\psi + \hat{B}\hat{B}\hat{A}\psi - \hat{B}\hat{B}\hat{A}\psi = 2\hat{B}\psi$$

Задание 2. Оператор $\hat{A}$ дано в виде
$$\hat{A} = \frac{d}{dx}\frac{1}{x} + \frac{1}{x^2}$$

Определить представление оператора $\hat{A}^2$.
Решение:
Подействуем на функцию ψ данным оператором:
$$\hat{A}\psi = \frac{d}{dx}\frac{\psi}{x} + \frac{\psi}{x^2} = \frac{1}{x}\frac{d\psi}{dx}$$
Видно, что оператор $\hat{A}$
$$\hat{A} = \frac{1}{x}\frac{d}{dx}$$
Далее находим $\hat{A}^2$:
$$\hat{A}^2\psi = \hat{A}(\hat{A}\psi) = \frac{1}{x}\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{x}\frac{d\psi}{dx}\right) = \frac{1}{x^2}\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{1}{x^3}\frac{d\psi}{dx}$$
ответ:
$$\hat{A}^2 = \frac{1}{x^2}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{x^3}\frac{d}{dx}$$

Задание 3. Дано оператор $\hat{A}^2 = \hat{A}_1^2 + \hat{A}_2^2$. Операторы $\hat{A}_1$ и $\hat{A}_2$ являются коммутаторами с оператором $\hat{B}$. Вычислить коммутатор $[\hat{B}, \hat{A}^2]$.
Решение:
По условию задачи:
$$[\hat{A}_1, \hat{B}] = [\hat{A}_2, \hat{B}] = 0$$
Тогда
$$[\hat{B}, \hat{A}_1^2] = \hat{B}\hat{A}_1^2 - \hat{A}_1^2\hat{B} = (\hat{B}\hat{A}_1)\hat{A}_1 - \hat{A}_1(\hat{A}_1\hat{B}) = (\hat{A}_1\hat{B})\hat{A}_1 - \hat{A}_1(\hat{B}\hat{A}_1) = 0$$
Та же
$$[\hat{B}, \hat{A}_2^2] = \hat{B}\hat{A}_2^2 - \hat{A}_2^2\hat{B} = (\hat{B}\hat{A}_2)\hat{A}_2 - \hat{A}_2(\hat{A}_2\hat{B}) =$$
$$= (\hat{A}_2\hat{B})\hat{A}_2 - \hat{A}_2(\hat{B}\hat{A}_2) = 0$$
Тогда
$$[\hat{B}, \hat{A}^2] = [\hat{B}, \hat{A}_1^2] + [\hat{B}, \hat{A}_2^2] = 0$$

Для подкрепления знание о операторах можно решить следующие задачи:

1. $[\hat{x},\hat{p}_x] = i\hbar,\ [\hat{x}^2,\hat{p}_x] = 2i\hbar\hat{x}$
2. $[f(x),\hat{p}_x] = i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x}$
3. $[\hat{x},\Delta] = \frac{2i}{\hbar}\hat{p}_x$
4. $[x,\hat{H}] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x$, здесь $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \hat{U}(x)$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Каждой физической величине соответствует определенный оператор этой физической величины. Соотношения между операторами в квантовой механике аналогичны соотношениям между соответствующими физическими величинами в классической механике.

Рассмотренное в качестве примера практическое занятие дает возможность систематизировать полученный на лекциях объем знаний (по данному разделу), увидеть, что «абстрактные» конструкции и вероятностный подход согласованы с эмпирическими данными и позволяют определить параметры квантовых объектов, усвоить алгоритм решения практических задач. Разъяснение основных понятий теоретического материала облегчит студентам бакалавриата адаптацию к новой для них концепции, позволит на начальном этапе изучения квантовой механики от абстрактных формул прийти к вполне конкретным физическим результатам.

Литература

1. Блохинцев Д.И. *Основы квантовой механики.* –М.: Изд. стереотип, 2019.

2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Курс теоретической физики: Учеб. пособ.:для вузов. В 10 т. Т. III. Квантовая механика. – М.: ФИЗМАТ ЛИТ, 2004.
3. *Савельев И.В.* Основы теоретической физики. т.2. Квантовая механика. –М.: Наука, 2005.

4. Гольдман И.И., Кривченко В.Д. Сборник задач по квантовой механике. –М.: Наука, 2001. –С.280.
5. Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике –М.: Наука, 2001, –С.301.