

Раздел V. Атомная и ядерная физика.

Глава 4. Операторы в квантовой механике, собственные значения операторов.

1. Операторы физических величин.

Каждой физической величине $F(\vec{r}, \vec{p})$ в квантовой механике соответствует оператор

$$\hat{F} = F(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}})$$

Оператор радиуса – вектора:

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$$

Оператор импульса:

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

Оператор момента количества движения:

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} & -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} & -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}$$

$$\hat{L}_x = i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$\hat{L}_y = i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$\hat{L}_z = i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

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

Оператор энергии-гамильтониан:

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

С помощью гамильтониана уравнение Шредингера можно переписать в компактной форме:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

2. Средние значения физических величин.

Если известна волновая функция частицы $\Psi(\vec{r}, t)$, то среднее значение измеряемой физической величины вычисляется по правилу:

$$\langle F \rangle = \int_V \Psi^* \hat{F} \Psi dV$$

При этом волновая функция должна быть нормирована:

$$\int_V |\Psi|^2 dV = 1.$$

Пример. Найдем среднее значение импульса для свободной частицы. Волновая функция свободной

частицы – это волна де Бройля $\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$,

нормированная на достаточно большой объем V .

$$\langle \vec{p} \rangle = \frac{1}{V} \int_V e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)} (-i\hbar \nabla) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)} dV = \vec{p}$$

Результат почти очевидный, так как волна де Бройля описывает свободную частицу с импульсом $\vec{p}$ и энергией E .

3. Возможные значения физических величин.

Многие физические величины в квантовой механике не могут иметь произвольные значения, а только дискретные из определенного набора значений.

К таким величинам относятся проекция момента импульса, величина момента импульса, очень часто энергия (например, энергия частицы в потенциальной яме, рассмотренная в главе 3). С другой стороны такие величины как координата, импульс, имеют непрерывный спектр значений.

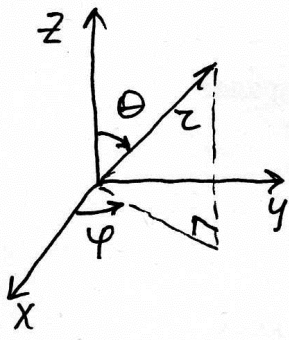
Чтобы найти возможные значения физической величины, необходимо решить задачу на собственные функции и собственные значения соответствующего квантового оператора: $\hat{F}\Psi_n = F_n \Psi_n$

Ψ_n – собственная функция,

F_n – соответствующее собственное значение оператора $\hat{F}$.

Возможные значения величин F – это набор собственных значений F_n .

а) Проекция момента импульса L_z



В сферической системе координат

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

Уравнение на собственные значения:

$$\hat{L}_z \Psi = L_z \Psi$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} = L_z \Psi$$

Решение ищут в виде:

$$\Psi(\varphi) = ce^{\lambda \varphi} \Rightarrow -i\hbar \lambda = L_z \Rightarrow \lambda = \frac{iL_z}{\hbar}$$

$$\Psi(\varphi) = ce^{\frac{iL_z \varphi}{\hbar}}$$

Из условия однозначности:

$$\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi)$$

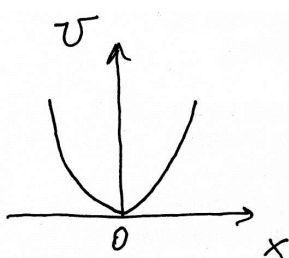
$$e^{\frac{iL_z \varphi}{\hbar}} = e^{\frac{iL_z (\varphi + 2\pi)}{\hbar}}$$

$$e^{\frac{iL_z 2\pi}{\hbar}} = 1 \Rightarrow \boxed{L_{zm} = \hbar m} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

б) Величины момента импульса

$$\hat{L}^2 \Psi_\ell = L_\ell^2 \Psi_\ell \Rightarrow \boxed{L_\ell = \hbar \sqrt{\ell(\ell + 1)}} \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

в) Энергии гармонического осциллятора



$$U(x) = \frac{kx^2}{2} \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{kx^2}{2}$$

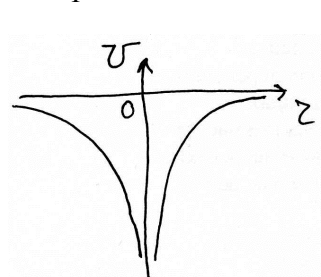
$$\hat{H} \Psi_n = E_n \Psi_n$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\boxed{E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)}$$

г) Энергии электрона в

водородоподобных атомах



$$U(r) = -\frac{ze^2}{r}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{ze^2}{r}$$

$$\hat{H} \Psi_n = E_n \Psi_n$$

Формула Бора!

$$\boxed{E_n = -Ry \frac{z^2}{n^2}} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13,6 \text{ эВ}$$

Следует отметить, что уравнение на собственные значения энергии есть не что иное, как стационарное уравнение Шредингера: $\hat{H}\psi = E\psi$

4. Спин. Принцип запрета Паули.

При применении приборов с большой разрешающей силой оказалось, что некоторые линии атомов представляют дублеты. Например, желтая линия

натрия $5890 \text{ \AA}$ и $5896 \text{ \AA}$. Для объяснения было предположено, что электрон обладает собственным моментом импульса - спином (аналогия с Землей: с движением вокруг Солнца связан орбитальный момент импульса, с вращением вокруг оси - собственный).

Оказалось, что спин электрона L_s , определяется

квантовым числом $S = \frac{1}{2}$:

$$L_s = \hbar\sqrt{S(S+1)},$$

$$S = \frac{1}{2} \Rightarrow L_s = \frac{\hbar\sqrt{3}}{2}$$

Проекция спина электрона на ось равна:

$$L_{sz} = \hbar m_s, \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

Таким же спином обладают протоны и нейтроны.

Спин фотона определяется квантовым числом $S=1$:

$$S = 1 \Rightarrow L_s = \hbar\sqrt{2}$$

Все частицы, у которых спиновое число полуцелое

$S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$, получили название фермионы (электроны,

протоны, нейтроны...). Частицы, у которых спиновое число целое $S = 0, 1, 2, \dots$ являются бозонами (фотоны, мезоны...).

На фермионы действует принцип запрета Паули:

в ансамбле тождественных фермионов не может быть двух фермионов, находящихся в одном и том же квантовом состоянии.

Со спином связано наличие у частиц собственного магнитного момента. Собственный магнитный момент электрона:

$$\mu_e = -\sqrt{3}\mu_B, \quad \mu_{ez} = \pm\mu_B$$

где $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} = 0,9 \cdot 10^{-20} \frac{\text{эрг}}{\text{гс}}$ - магнетон Бора

Знак « - » означает, что собственный магнитный момент и спин противоположно направлены.

Вопросы.

- 1.**Как построить квантовый оператор физической величины.
- 2.**Как вычислить среднее значение физической величины.
- 3.**Как вычислить возможные значения физической величины.
- 4.**Возможные значения проекции момента импульса.
- 5.**Возможные значения величины момента импульса.
- 6.**Возможные значения энергии гармонического осциллятора.
- 7.**Возможные значения энергии электрона в водородоподобных атомах.
- 8.**Возможные значения энергии частицы в потенциальной яме.
- 9.**Что такое спин.
- 10.**Что такое фермионы и бозоны.
- 11.**Принцип запрета Паули.
- 12.**Что такое собственный магнитный момент электрона.