3.6. Операторы координаты и импульса, других физических величин

Уравнение на собственные значения для оператора координаты $\hat{x}$:

$$\hat{x}\psi_{x'}(x) = x'\psi_{x'}(x). \quad (80)$$

Собственные значения x', дающие величину измеряемой координаты x', меняются непрерывно, образуя непрерывный спектр собственных значений.

Если частица (например, электрон) находится в точке x', то $\psi_{x'}(x)$ – состояние, в котором частица локализована в точке x':

$$\psi_{x'}(x) = \begin{cases} 0, x \neq x' \\ \infty, x = x' \end{cases}, \text{ т. е. } \psi_{x'}(x) = c\,\delta(x - x').$$

Положим $c = 1$, так что

$$\psi_{x'}(x) = \delta(x - x'). \quad (81)$$

Подставляем (81) в (80): $\hat{x}\,\delta(x - x') = x'\,\delta(x - x') \Rightarrow$

$$\hat{x} = x, \quad (82)$$

оператор координаты сводится к умножению на координату x.

Уравнение на собственные значения для оператора импульса $\hat{p}_x$ –

$$\hat{p}_x\,\psi_{p_x}(x) = p_x\,\psi_{p_x}(x). \quad (83)$$

Как и в случае координаты, значения импульса p_x образуют непрерывный спектр. Собственные функции оператора $\hat{p}_x$ – плоская волна де Бройля $\psi_{p_x}(x) = c\,e^{i/\hbar\, p_x \cdot x}$, состояние с определённым значением импульса. Из вида собственной функции и уравнения (83) можно определить вид оператора $\hat{p}_x$, $\hat{p}_x\,e^{i/\hbar\, p_x \cdot x} = p_x\,e^{i/\hbar\, p_x \cdot x}$.

Очевидно, действие оператора $\hat{p}_x$ сводится к дифференцированию по координате x: $\dfrac{\partial}{\partial x}e^{i/\hbar\, p_x \cdot x} = \dfrac{i}{\hbar}p_x\,e^{i/\hbar\, p_x \cdot x} \Rightarrow -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}e^{i/\hbar\, p_x \cdot x} = p_x\,e^{i/\hbar\, p_x \cdot x}$ и, окончательно, операторы всех трёх компонент вектора импульса:

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}. \quad (84)$$

Вводя вектор оператора импульса, можем записать, объединяя (84):

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\left(\vec{i}\,\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\,\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\,\frac{\partial}{\partial z}\right), \quad (85)$$

или,

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}. \quad (85')$$

Ясно, что все компоненты (84) оператора $\hat{\vec{p}}$ коммутируют.

Операторы координаты и импульса являются основными операторами в квантовой механике, из которых строятся все другие операторы физических величин.

Величина $\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}]$ определяет в классической механике момент импульса. В квантовой механике этой величине соответствует оператор момента импульса:

$$\hat{\vec{L}} = [\hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}], \quad (86)$$

компоненты которого определяются аналогично классическим,

$$\hat{\mathrm{L}}_x = \hat{y}\hat{\mathrm{p}}_z - \hat{z}\hat{\mathrm{p}}_y,\ \hat{\mathrm{L}}_y = \hat{z}\hat{\mathrm{p}}_x - \hat{x}\hat{\mathrm{p}}_z,\ \hat{\mathrm{L}}_z = \hat{x}\hat{\mathrm{p}}_y - \hat{y}\hat{\mathrm{p}}_x. \qquad (87)$$

Подставляя значение оператора импульса (84), получаем:

$$\hat{\mathrm{L}}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),\ \hat{\mathrm{L}}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right),\ \hat{\mathrm{L}}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \qquad (88)$$

Учитывая эрмитовость операторов координаты и импульса, $\hat{\vec{\mathrm{r}}} = \hat{\vec{\mathrm{r}}}^{+}, \hat{\vec{\mathrm{p}}} = \hat{\vec{\mathrm{p}}}^{+}$, можно сделать вывод, что $\hat{\vec{\mathrm{L}}} = \hat{\vec{\mathrm{L}}}^{+}$, в компонентах $\hat{\mathrm{L}}_x = \hat{\mathrm{L}}_x^{+},\ \hat{\mathrm{L}}_y = \hat{\mathrm{L}}_y^{+},\ \hat{\mathrm{L}}_z = \hat{\mathrm{L}}_z^{+}$ или $\hat{\mathrm{L}}_i = \hat{\mathrm{L}}_i^{+}$, $i = 1,2,3$, номера компонент 1,2,3 соответствуют координатам *x, y, z*. Однако в отличие от различных компонент координаты и импульса, компоненты момента импульса не коммутируют между собой:

$$\left[\hat{\mathrm{L}}_x, \hat{\mathrm{L}}_y\right] = i\hbar\,\hat{\mathrm{L}}_z,\ \left[\hat{\mathrm{L}}_z, \hat{\mathrm{L}}_x\right] = i\hbar\,\hat{\mathrm{L}}_y,\ \left[\hat{\mathrm{L}}_y, \hat{\mathrm{L}}_z\right] = i\hbar\,\hat{\mathrm{L}}_x. \qquad (89)$$

Однако с оператором квадрата момента импульса каждая из компонент коммутирует:

$$\left[\hat{\mathrm{L}}_i, \hat{\vec{\mathrm{L}}}^2\right] = 0,\ i = 1,2,3 \text{ (то есть } i \text{ принимает значения } x, y, z\text{)}. \qquad (90)$$

Важнейшим оператором в квантовой механике является оператор Гамильтона $\hat{\mathrm{H}}$, складывающийся, подобно гамильтониану в классической механике, из операторов кинетической и потенциальной энергии:

$$\hat{\mathrm{H}} = \hat{\mathrm{T}} + \hat{\mathrm{U}} = \frac{\hat{\vec{\mathrm{p}}}^2}{2m} + \hat{\mathrm{U}}. \qquad (91)$$

Запишем оператор кинетической энергии $\hat{\mathrm{T}}$ подробнее:

$$\hat{\mathrm{T}} = \frac{\hat{\vec{\mathrm{p}}}^2}{2m} \overset{(85')}{=} -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta, \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \qquad (92)$$

так что

$$\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{\mathrm{U}}(\vec{r}). \qquad (91')$$

Оператор Гамильтона не коммутирует с операторами координаты и импульса. Рассмотрим для примера коммутатор оператора координаты и оператора Гамильтона:

$$[\hat{\mathrm{x}}, \hat{\mathrm{H}}] \overset{(91')}{=} [\hat{\mathrm{x}}, -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{\mathrm{U}}(\vec{r})] = -\frac{\hbar^2}{2m}[\hat{\mathrm{x}}, \Delta] \overset{(92)}{=} -\frac{\hbar^2}{2m}[\hat{\mathrm{x}}, \frac{\partial^2}{\partial x^2}] = \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}.$$

В классической механике существует правило для написания функции Гамильтона любой системы частиц, которая (функция Гамильтона) будет зависеть от природы частиц и их взаимодействия между собой и с внешним полем. В квантовой механике существуют аналогичные правила. Правила сопоставления физическим величинам соответствующих операторов было введено Вейлем, оно основано на формуле фурье-разложения функции двух переменных в фурье-интеграл.

Пусть есть функция $A(x,p)$, тогда соответствующий ей оператор – $\hat{\mathrm{A}}(\hat{\mathrm{x}}, \hat{\mathrm{p}}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, d\omega'\, A(\omega, \omega')\, exp(i\omega\hat{\mathrm{x}} + i\omega'\hat{\mathrm{p}})$.