Операторы

Каждой физической величине F в квантовой теории сопоставляется линейный оператор $\hat{F}$, действующий на волновую функцию Ψ(r,t). Под оператором $\hat{F}$ понимается правило, по которому одной функции Ψ(r,t) переменных r,t сопоставляется другая функция U(r,t) тех же переменных.

$$U(r,t) = \hat{F}\,\Psi(r,t).$$

Спектр собственных значений оператора $\hat{F}$ представляет собой спектр возможных (измеряемых) значений этой величины. С результатами экспериментов сопоставляются средние значения физических величин, которые вычисляются по формуле

$$\overline{F} = \int \psi^* \hat{F}\psi dv.$$

Например: оператор $\hat{F}$ может означать дифференцирование по какой-либо переменной.

$$U(r,t) = \hat{F}\,\Psi(r,t) = \partial\Psi(r,t)/\partial r.$$

$$\hat{F} = \partial/\partial r.$$

Правила построения операторов в координатном представлении заключаются в следующем.

Оператор координаты $\hat{x}$ равен самой координате x

$$\hat{x} = x.$$

Операторами проекций импульсов являются операторы

$$\hat{p}x = -i\hbar\partial/\partial x,\ \hat{p}y = -i\hbar\partial/\partial y,\ \hat{p}z = -i\hbar\partial/\partial z,$$

Остальные операторы могут быть построены с использованием операторов координаты и импульса

Оператор кинетической энергии $\hat{T}$

$$\hat{T} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

Оператор Гамильтона - оператор полной энергии $\hat{H}$. Если частица движется в потенциальном поле U(x,y,z).

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x,y,z).$$

Оператор момента количества движения $\hat{l}$

$$\hat{l}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = (\hbar/i)(y\partial/\partial z - z\partial/\partial y),$$

$$\hat{l}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = (\hbar/i)(z\partial/\partial x - x\partial/\partial z),$$

$$\hat{l}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = (\hbar/i)(x\partial/\partial y - y\partial/\partial x).$$

Оператор квадрата момента количества движения.

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2.$$