8 KVANTOVĚMECHANICKÉ OPERÁTORY

Při popisu stavu částic potřebujeme zjistit dvě veličiny - jejich souřadnice a rychlosti (častěji hybnosti). Další charakteristické veličiny můžeme pomocí těchto dvou veličin vypočítat na základě známých vztahů, např. kinetickou energii vztahem $W_k = p^2/2m$, moment hybnosti vztahem $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$, atd. Stačí tedy zjistit dva základní operátory - pro souřadnici a hybnost (definice 8.1 a 8.2). Další operátory, charakterizující jiné fyzikální veličiny můžeme jednoduše dostat tak, že se v příslušných vztazích nahradí souřadnice a hybnosti jejich operátory. Na rozdíl od operátorů pole kvantověmechanické operátory charakterizují vždy konkrétní fyzikální veličinu, proto je budeme označovat znakem příslušné veličiny se stříškou, např.

8.1
Operátor souřadnice (polohového vektoru) a jakékoli funkce souřadnic je totožný s příslušnou souřadnicí (polohovým vektorem a funkcí souřadnic), neboli

$$\hat{x} \equiv x, \quad \hat{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{r}, \quad \hat{W}_p\,(x,y,z) \equiv W_p\,(x,y,z) \tag{8.1}$$

atd.
Při aplikaci těchto operátorů na určitou funkci je příslušnou funkcí jednoduše vynásobíme.

8.2
Operátor hybnosti v kvantové mechanice je definován vztahem

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla, \tag{8.2}$$

kde $i=\sqrt{-1}$, $\hbar=h/2\pi$, kde h je Planckova konstanta a ∇ je Hamiltonův operátor.

8.3
Operátor celkové energie, tj. operátor $\hat{H}=\hat{W}_k+\hat{W}_p$ se nazývá hamiltonián a je definován vztahem

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta + \hat{W}_p. \tag{8.3}$$

Definice operátorů souřadnic a hybnosti (8.1) a (8.2) zdůvodníme v kapitole 31 o kvantové mechanice. Operátor potenciální energie $\hat{W}_p(x,y,z)$ je přímo potenciální energie $W_p(x,y,z)$ a operátor kinetické energie $\hat{W}_k=p^2/2m$ bude podle definice 8.2 určen vztahem

$$\hat{W}_k = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right) = \\ = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\delta^2}{\delta x^2} + \frac{\delta^2}{\delta y^2} + \frac{\delta^2}{\delta z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta, \tag{8.4}$$

kde ∇ je Laplaceův operátor. Pro operátor celkové energie dostaneme potom vyjádření (8.3).

Operátory vystupující v kvantové mechanice jsou tzv Hermiteovy operátory, protože se vyznačují dvěma vlastnostmi:
1. lineárností a 2. samosdruženosti. Operátor L je lineární, jestliže pro libovolné dvě funkce u_1 a u_2 platí

$$\hat{L}(u_1 + u_2) = \hat{L}u_1 + \hat{L}u_2. \tag{8.5}$$

Operátor L je samosdružený, jestliže pro libovolné dvě kvadraticky integrovatelné funkce u_1 a u_2 platí

$$\int u_1^* \hat{L} u_2\, d\tau = \int u_2 \hat{L}^* u_1^*\, d\tau. \tag{8.6}$$

Hvězdičkou označené veličiny (operátory) se nazývají konjugované a z původních veličin (operátorů) se získají záměnou i→-i.

Význačnou vlastností dvou operátorů je, že vzájemně komutují, nebo nekomutují. Dva operátory L_1 a L_2 vzájemně komutují, jestliže platí

$$\hat{L}_1 \hat{L}_2 - \hat{L}_2 \hat{L}_1 = 0, \tag{8.7}$$

Dva operátory L_1 a L_2 vzájemně, jestliže platí

$$\hat{L}_1 \hat{L}_2 - \hat{L}_2 \hat{L}_1 \neq 0, \tag{8.8}$$

Komutativnost, resp. nekomutativnost dvou operátorů má velký význam v souvislosti s tzv. Heisenbergovým principem neurčitosti. Bez důkazu uvedeme tvrzení, že fyzikální veličiny, kterým odpovídá navzájem komutující operátory jsou současně měřitelné.