Komutatorji – simultane meritve fizikalnih različnih količin

V klasični mehaniki lahko istočasno določimo različne lastnosti sistema kot so hitrost, položaj, gibalna količina, vrtilna količina, kinetična energija, potencialna energija itd. Nedoločenost oziroma napaka omenjene količine je omejena samo z natančnostjo inštrumenta, ki ga imamo na voljo.
V kvantni mehaniki je drugače. Zamislimo si, da bi radi določili nekaj lastnosti sistema, ki ga opiše valovna funkcija. Lastnosti moramo seveda določiti eksperimentalno. Eksperiment pa pomeni, da deluje operator na valovno funkcijo našega sistema, rezultati meritve pa so lastne vrednosti tega operatorja. Valovna funkcija je lahko lastna funkcija operatorja ali pa linearna kombinacija lastnih funkcij. Če želimo določiti dve količini istočasno, mora biti valovna funkcija lastna valovna funkcija obeh operatorjev, ki pripadata določenima dvema količinama, ki bi ju radi določili istočasno.
Imejmo operatorja $\widehat{\mathrm{A}}$ in $\widehat{\mathrm{B}}$, ki opišeta merjeni količini. Oba operatorja naj imata svoje lastne funkcije in lastne vrednosti

$$\widehat{\mathrm{A}}\psi_a = \mathrm{a}\psi_a$$

$$\widehat{\mathrm{B}}\psi_b = \mathrm{b}\psi_b$$

Če obstaja lastna funkcija, ki je lastna funkcija obeh operatorjev, velja

$$\widehat{\mathrm{A}}\psi_{a,b} = \mathrm{a}\psi_{a,b}$$

$$\widehat{\mathrm{B}}\psi_{a,b} = \mathrm{b}\psi_{a,b}$$

Sedaj izračunajmo še naslednje

$$\widehat{\mathrm{A}}\widehat{\mathrm{B}}\psi_{a,b} = \mathrm{b}\widehat{\mathrm{A}}\psi_{a,b} = a\mathrm{b}\psi_{a,b}$$

$$\widehat{\mathrm{B}}\widehat{\mathrm{A}}\psi_{a,b} = \mathrm{a}\widehat{\mathrm{B}}\psi_{a,b} = \mathrm{ab}\psi_{a,b}$$

Če sedaj odštejemo ti dve enačbi dobimo

$$\widehat{\mathrm{A}}\widehat{\mathrm{B}}\psi_{a,b} - \widehat{\mathrm{B}}\widehat{\mathrm{A}}\psi_{a,b} = [\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{B}}]\psi_{a,b} = 0$$

Ta izraz je enak nič, če je komutator operatorjev $\widehat{\mathrm{A}}$ in $\widehat{\mathrm{B}}$ enak nič $\left([\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{B}}] = 0\right)$ ali pa če je valovna funkcija enaka 0. Fizikalno smiselna rešitev je prva. Se pravi, da lahko istočasno določimo vrednosti dveh količin, ko komutatorja njunih operatorjev komutirata (njun komutator je enak 0). V tem primeru pa imata oba operatorja tudi iste lastne funkcije. Za komutatorje veljajo naslednje zveze

$$[\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{A}}^{\mathrm{n}}] = 0$$
$$[\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{B}}] = -[\widehat{\mathrm{B}}, \widehat{\mathrm{A}}]$$
$$[\mathrm{k}\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{B}}] = [\widehat{\mathrm{A}}, \mathrm{k}\widehat{\mathrm{B}}] = \mathrm{k}[\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{B}}]$$
$$[\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{B}} + \widehat{\mathrm{C}}] = [\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{B}}] + [\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{C}}]$$
$$[\widehat{\mathrm{A}} + \widehat{\mathrm{B}}, \widehat{\mathrm{C}}] = [\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{C}}] + [\widehat{\mathrm{B}}, \widehat{\mathrm{C}}]$$
$$[\widehat{\mathrm{A}} + \widehat{\mathrm{B}}, \widehat{\mathrm{C}} + \widehat{\mathrm{D}}] = [\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{C}}] + [\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{D}}] + [\widehat{\mathrm{B}}, \widehat{\mathrm{C}}] + [\widehat{\mathrm{B}}, \widehat{\mathrm{D}}]$$
$$[\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{B}}\widehat{\mathrm{C}}] = [\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{B}}]\widehat{\mathrm{C}} + \widehat{\mathrm{B}}[\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{C}}]$$
$$[\widehat{\mathrm{A}}\widehat{\mathrm{B}}, \widehat{\mathrm{C}}] = [\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{C}}]\widehat{\mathrm{B}} + \widehat{\mathrm{A}}[\widehat{\mathrm{B}}, \widehat{\mathrm{C}}]$$

Poglejmo si sedaj vrednosti komutatorjev položaja in gibalnih količin. Izračunajmo najprej komutator dveh operatorjev koordinat

$$[\hat{\mathrm{x}}, \hat{y}]\psi = \hat{\mathrm{x}}\hat{\mathrm{y}}\psi - \hat{\mathrm{y}}\hat{\mathrm{x}}\psi = \mathrm{xy}\psi - \mathrm{yx}\psi = 0$$

Na isti način lahko pokažemo, da veljajo naslednje zveze

$$[\hat{x},\hat{y}] = [\hat{x},\hat{z}] = [\hat{y},z] = 0$$

To pomeni, da lahko istočasno poznamo vrednosti vseh treh koordinat položaja delca. Sedaj določimo komutator dveh operatorjev gibalne količine

$$\left[\widehat{p_x},\widehat{p_y}\right]\psi = \widehat{p_x}\widehat{p_y}\psi - \widehat{p_y}\widehat{p_x}\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\right) = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x\,\partial y} + \hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial y\,\partial x} = 0$$

Mešani odvodi so enaki, zato je komutator dveh operatorjev gibalnih količin enak 0. Pokažemo lahko, da veljajo naslednje zveze

$$\left[\widehat{p_x},\widehat{p_y}\right] = [\widehat{p_x},\widehat{p_z}] = \left[\widehat{p_y},\widehat{p_z}\right] = 0$$

Vidimo, da lahko tudi za vektor gibalne količine, tako kot za krajevni vektor poznamo vrednosti vseh komponent istočasno. Poglejmo si sedaj še komutacijske relacije med operatorji položaja in operatorji gibalne količine

$$[\hat{x},\widehat{p_x}]\psi = \hat{x}\widehat{p_x}\psi - \widehat{p_x}\hat{x}\psi = x\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\right) = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar\left(\psi + x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = i\hbar\psi$$

$$\left[\hat{x},\widehat{p_y}\right]\psi = \hat{x}\widehat{p_y}\psi - \widehat{p_y}\hat{x}\psi = x\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}(x\psi)\right) = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar\left(x\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) = 0$$

Za vse kombinacije dobimo

$$[\hat{x},\widehat{p_x}] = \left[\hat{y},\widehat{p_y}\right] = [\hat{z},\widehat{p_z}] = i\hbar$$

$$\left[\hat{x},\widehat{p_y}\right] = [\hat{x},\widehat{p_z}] = [\hat{y},\widehat{p_x}] = [\hat{y},\widehat{p_z}] = [\hat{z},\widehat{p_x}] = \left[\hat{z},\widehat{p_y}\right] = 0$$

To pomeni, da istočasno ne moremo s poljubno natančnostjo poznati koordinate delca in pripadajoče komponente gibalne količine.