Operatorji v kvantni mehaniki

Matematična formulacija kvantne mehanike je osnovana na operatorjih, ki so matematična pravila, ki eno funkcijo spremenijo v drugo. Operator odvajanja $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}$ nam funkcijo $\mathrm{f(x)}$ spremeni v drugo funkcijo $\mathrm{f'(x)}$. Drugi postulat kvantne mehanike pravi, da vsaki dinamični količini klasične mehanike v kvantni mehaniki pripada linearni hermitski operator. Omenjeni operatorji morajo imeti realne lastne vrednosti, ker le te dobimo kot rezultate meritev. Matematika sama nam pove, da imajo vsi hermitski operatorji realne tako lastne vrednosti kot tudi povprečja.

Operator položaja. Če se delec giblje v eni dimenziji (po osi x), potem stanje tega delca opiše valovna funkcija $\psi(\mathrm{x})$. Verjetnostna gostota tega delca je enaka

$$\rho(\mathrm{x}) = |\psi(\mathrm{x})|^2$$

Če verjetnostno gostoto pomnožimo še z diferencialom koordinate dx, pa je to kar verjetnost, da delec najdemo v intervalu velikosti dx v okolici koordinate x. Pričakovana vrednost koordinate x je enaka

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{x}\rho(\mathrm{x})\mathrm{dx} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{x}|\psi(\mathrm{x})|^2\mathrm{dx} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\mathrm{x})\mathrm{x}\psi(\mathrm{x})\mathrm{dx}$$

To pa je po četrtem postulatu kvantne mehanike enako pričakovani vrednosti operatorja položaja. Ugotovimo, da je operator položaja enak množenju s koordinato x.

$$\hat{\mathrm{x}} = \mathrm{x}\,\cdot$$

Na analogen način dobimo vrednosti operatorjev za ostale koordinate in krajevni vektor delca.

Operator gibalne količine. Ta operator izpeljemo iz zahteve po invariantnosti na translacije in dobimo, da ima operator za gibalno količino v x smeri naslednjo obliko:

$$\widehat{\mathrm{p}_x} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\mathrm{x}}$$

Operatorji položaja in gibalne količine so osnovni operatorji. Ostale operatorje lahko navadno skonstruiramo tako, da najprej napišemo klasični izraz za fizikalno količino s pomočjo koordinat in gibalne količine ter nato vse količine zamenjamo z operatorji. Vrtilna količina je pomembna količina gibanja, v klasični mehaniki jo izračunamo kot vektorski produkt krajevnega vektorja in vektorja gibalne količine

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{vmatrix} \vec{\imath} & \vec{\jmath} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \mathrm{p}_x & \mathrm{p}_y & \mathrm{p}_z \end{vmatrix}$$

Sedaj v izrazu zamenjamo fizikalne količine z njihovi operatorji in dobimo

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

Za komponente vrtilnih količin dobimo po izračunu vektorskega produkta

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

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

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

Za operator kvadrata vrtilne količine pa dobimo

$$\widehat{\mathrm{L}^2} = \widehat{\mathrm{L}_x}^2 + \widehat{\mathrm{L}_y}^2 + \widehat{\mathrm{L}_z}^2$$

Operator kinetične energije skonstruiramo iz izraza za kinetično energijo

$$\mathrm{T} = \frac{p^2}{2m} \to \widehat{\mathrm{T}} = \frac{\hat{\vec{\mathrm{p}}}^2}{2\mathrm{m}} = \frac{\hat{\vec{\mathrm{p}}}\hat{\vec{\mathrm{p}}}}{2\mathrm{m}} = \frac{-\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2\mathrm{m}} = \frac{-\hbar^2}{2\mathrm{m}} \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathrm{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \mathrm{y}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \mathrm{z}^2} \right)$$

Za potencialno energijo je operator enak kar množenju s potencialno funkcijo

$$\mathrm{V} = \mathrm{V}(\vec{r}) \to \widehat{\mathrm{V}} = \mathrm{V}\left(\hat{\vec{\mathrm{r}}}\right) \cdot = \mathrm{V}(\vec{r}) \cdot$$

in za operator celotne energijo oziroma Hamiltonov operator

$$\widehat{\mathrm{H}} = \widehat{\mathrm{T}} + \widehat{\mathrm{V}} = \frac{-\hbar^2}{2\mathrm{m}} \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathrm{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \mathrm{y}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \mathrm{z}^2} \right) + \mathrm{V}(\vec{r}) \cdot$$

Spodnja tabela ima zbrane operatorje, ki se uporabljajo v kvantni mehaniki:

Operator	Definicija
$\hat{\mathrm{x}}$	$\mathrm{x} \cdot$
$\hat{\mathrm{y}}$	$\mathrm{y} \cdot$
$\hat{z}$	$\mathrm{z} \cdot$
$\hat{\vec{\mathrm{r}}}$	$\vec{r} \cdot$
$\widehat{\mathrm{p}_x}$	$-\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}$
$\widehat{\mathrm{p}_y}$	$-\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}$
$\widehat{\mathrm{p}_z}$	$-\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \mathrm{z}}$
$\hat{\vec{\mathrm{p}}}$	$-\mathrm{i}\hbar \vec{\nabla}$

$\hat{\mathrm{T}}$	$\frac{\hat{\vec{\mathrm{p}}}^2}{2\mathrm{m}} = \frac{-\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2\mathrm{m}}$
$\hat{\mathrm{V}}$	$\mathrm{V}(\vec{r},\mathrm{t})\cdot$
$\hat{H}$	$\hat{\mathrm{T}} + \hat{\mathrm{V}}$
$\widehat{\mathrm{L}_x}$	$-\mathrm{i}\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial \mathrm{z}} - z\frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}\right)$
$\widehat{\mathrm{L}_y}$	$-\mathrm{i}\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}} - x\frac{\partial}{\partial \mathrm{z}}\right)$
$\widehat{\mathrm{L}_z}$	$-\mathrm{i}\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial \mathrm{y}} - y\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}\right)$
$\widehat{\mathrm{L}^2}$	$\widehat{\mathrm{L}_x}^2 + \widehat{\mathrm{L}_y}^2 + \widehat{\mathrm{L}_z}^2$