Otázka 16 – Postuláty kvantové mechaniky a jejich důsledky

Prvním krokem ke vzniku kvantové mechaniky, jako fyzikální disciplína popisující zákonitosti platící pro pohyb v mikrosvětě, byl objev Maxe Plancka z roku 1900, že absolutně černé těleso vyzařuje nikoliv spojitě, ale po kvantech majících energii $E = h \cdot \nu$.

Postupně (především ve 20. letech 20. století zásluhou fyziků jako Erwin Schrödinger, Werrner Heisenberg, Paul Dirac a mnoha dalších) byli zformulovány základní postuláty této fyzikální teorie. Tyto postuláty není možné explicitně odvodit, jejich správnost se testuje shodou důsledků s experimentálními výsledky.

V různých učebnicích se uvádí různý počet postulátů i jejich formulace, závisí na tom, jaký přístup autor k výkladu kvantové mechaniky zvolí.

Základní postuláty:

1) Postulát o vlnové funkci

Tento postulát nám říká, že veškeré informace o stavu částice v kvantové mechanice jsou popsány komplexní vlnovou funkcí ve tvaru:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(\vec{r}, t).$$

Jaký je význam této funkce a jaké vlastnosti musí mít? Ukazuje se, že druhá mocnina této funkce (již jde o reálné hodnoty!) udává pravděpodobnost nalezení částice $\mathrm{d}p$ v elementárním objemu $\mathrm{d}V$ pomocí vztahu:

$$\mathrm{d}p = |\psi(x, y, z, t)|^2 \mathrm{d}V = |\psi(x, y, z, t)|^2 \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z.$$

Integrováním uvedeného vztahu snadno zjistíme, že pravděpodobnost nalezení částice v nějakém objemu V je dána vztahem:

$$p = \int_V |\psi(x, y, z, t)| \mathrm{d}V.$$

Vzhledem k tomu, že někde se daná částice nacházet musí, je uvedený integrál přes celý prostor R^3. Tuto skutečnost vyjadřuje tzv. **normovací podmínka**

$$\int_{R^3} |\psi(x, y, z, t)| \mathrm{d}V = 1.$$

Jedná se o první důležitou vlastnost, kterou musí splňovat každá vlnová funkce. Další požadavek kladený na vlastnosti této funkce dostaneme z faktu, že změny fyzikálních veličin probíhají spojitě. Matematicky je tato skutečnost vyjádřena **spojitostí vlnové funkce.**

Přímo z 1. postulátu vidíme, že vlnová funkce jednoznačně popisuje stav systému. Díky tomu musí být vlnová funkce **jednoznačná** (z matematického úhlu pohledu bychom mohli připustit odlišnosti na množině míry nula, protože to by nijak neovlivnilo výpočty pravděpodobností výskytu v nějakém konečném objemu).

Navíc je třeba, aby vlnová funkce neutíkala se souřadnicí jdoucí nade všechny meze do nekonečna. Tento přirozený požadavek vyjadřujeme **konečností** vlnové funkce (pro souřadnice jdoucí nade všechny meze musí funkce limitovat k nule).

Základními vlastnostmi vlnové funkce tedy jsou:

- **Spojitost**
- **Konečnost**
- **Jednoznačnost**
- **Splnění normovací podmínky**

Pouze funkce splňující uvedené podmínky může být vlnovou funkcí nějaké kvantověmechanické částice.

Na závěr této části uveďme, že pro kvantově mechanický systém o *f* stupních volnosti má vlnová funkce tvar:

$$\psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_f, t).$$

Obecně se tedy jedná o funkci *f* + 1 proměnných. Pravděpodobnost nalezení systému v daném okamžiku v konečné oblasti prostoru je pak vždy udána integrálem přes příslušné souřadnice.

2) Postulát o operátorech

Stav systému je v kvantové mechanice popsán vlnovou funkcí. Nabízí se tak přirozená otázka, jakým způsobem jsou v ní vyjádřeny fyzikální veličiny? Ukazuje se, že **fyzikální veličiny jsou v kvantové mechanice reprezentovány operátory působícími na množině (přesněji Hilbertově prostoru) vlnových funkcí**. Toto je obsahem 2. postulátu této teorie.

Ukazuje se však, že ne všechny operátory mohou reprezentovat fyzikální veličiny. Musíme požadovat, aby tyto operátory byly **lineární** (tzn. že jejich působení na funkci $c_1 \cdot \psi_1 + c_2 \cdot \psi_2$ dává stejný výsledek jako $c_1 -$ násobek působení na ψ_1 sečtený s $c_2 -$ násobkem působení na ψ_2. Matematicky to můžeme při označení operátoru $\hat{A}$ zapsat následovně:

$$\hat{A}(c_1 \cdot \psi_1 + c_2 \cdot \psi_2) = c_1 \cdot \hat{A}(\psi_1) + c_2 \cdot \hat{A}(\psi_2).$$

Požadavek na linearitu souvisí s tím, že v kvantové mechanice platí princip superpozice!

Druhá podmínka je, aby operátory byly tzv. **hermitovské.** Tento požadavek lze matematicky vystihnout podmínkou:

$$\int_V \varphi^* \cdot \hat{A}\psi \, \mathrm{d}V = \int_V \left(\hat{A}\varphi\right)^* \cdot \psi \, \mathrm{d}V \, .$$

Tato podmínka musí platit pro libovolně zvolené vlnové funkce φ a ψ. Význam této podmínky spočívá v tom, že hermitovské operátory mají jenom reálná **vlastní čísla**, což bude důležité v souvislosti s 3. postulátem.

Základem celé teorie jsou vyjádření pro operátory polohy a hybnosti. Ty lze vyjádřit následujícím způsobem:

$$\hat{x} = x\cdot, \quad \hat{p}_x = -i \cdot h_{\check{s}} \cdot \frac{\partial}{\partial x}.$$

Operátoru polohy tak odpovídá násobení příslušnou souřadnicí, operátoru hybnosti poté (až na konstantu) derivování podle souřadnice. Pro operátor odpovídající vektoru hybnosti pak lze v souladu s definicí nabla operátoru psát:

$$\hat{p} = -i \cdot h_{\check{s}} \cdot \nabla.$$

Operátory dalších fyzikálních veličin poté lze vyjádřit užitím klasických vzorců spojujících tyto veličiny se souřadnicí a hybností (samozřejmě pokud se jedná o klasické veličiny. Třeba pro spin, který je specialitou kvantové fyziky, a v klasickém světě nemá obdoby, musíme zavést speciální operátor!). Třeba pro operátor kinetické energie však můžeme v souladu s klasickým vzorcem $T = \frac{p^2}{2 \cdot m}$ spočítat:

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}}{2 \cdot m} = \frac{(-i \cdot h_{\check{s}} \cdot \nabla)^2}{2 \cdot m} = -\frac{h_{\check{s}}}{2 \cdot m} \cdot \Delta.$$

Využili jsme toho, že druhá mocnina nabla operátoru je Laplaceův operátor. Zcela analogicky můžeme vypočítat třeba složky operátoru momentu hybnosti $\hat{L}$, pro nějž v klasické fyzice platí vzorec $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$.

Velkou roli v kvantové fyzice hraje tzv. **komutátor operátorů**, který je definován vztahem $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Pokud je tento komutátor rovný nule, může odpovídající fyzikální veličiny měřit současně. Pokud však tento komutátor je různý od nuly, není možné stanovit u daného systému současně hodnoty fyzikálních veličin odpovídajících operátorům $\hat{A}$ a $\vec{B}$.

Vzhledem k tomu, že pro operátory polohy a hybnosti platí (v x-ové souřadnici) vztah

$$\left[\hat{x}, \hat{p}_x\right] = -i \cdot h_{\check{s}},$$

není možné u daného systému současně změřit hybnost a polohu. Toto tvrzení je obsahem známých **Heisenbergových relací neurčitosti**!

Na závěr poznamenejme, že operátor si můžeme představit v podstatě jako nekonečně rozměrnou matici. Můžeme tak v podstatě říct, že nemožnost současně v kvantové mechanice stanovit polohu a hybnost je matematicky vyjádřena pomocí nekomutativnosti součinu matic.

3) Postulát o kvantování

Položme si otázku, jakých hodnot může nabývat fyzikální veličina vyjádřená ve formalismu kvantové mechaniky operátorem $\hat{A}$. **Ukazuje se, že může nabýt pouze hodnot udaných tzv. vlastními čísly uvedeného operátoru!** Pro vlastní čísla operátoru pak platí z definice rovnice

$$\hat{A}\psi_n = \lambda \cdot \psi_n .$$

Vlnová funkce ψ_n se nazývá **vlastní vlnovou funkcí** odpovídající vlastnímu číslu λ_n. Může se stát, že jednomu vlastnímu číslu odpovídá více vlastních funkcí, poté mluvíme o **degeneraci spektra** (např. degenerace energetických hladin). Později uvidíme, že tyto vlastní funkce mají celou řadu zajímavých vlastností. Již nyní je však jasné, proč jsme u 2. postulátu požadovali, aby operátory byly hermitovské! V opačném případě bychom dostávali imaginární vlastní čísla, což je vzhledem k tomu, že jde o hodnotu fyzikální veličiny nesmysl.

Vlastní čísla operátoru jsou diskrétní (jsou to třeba hodnoty 2,4,6…nevyplňují celý interval), což má za následek, že veličiny v mikrosvětě mohou velmi často nabývat pouze určitých konkrétních hodnot - jsou kvantovány! V makrosvětě nic podobného neexsistuje, jedinou tam kvantovanou veličinou je podle Raunera pivo, a to po půlliterch☺. Jde o jeden ze zásadních rozdílů klasické a kvantové fyziky.

Množina všech vlastních čísel se nazývá spektrum operátoru. Třeba k určení energetického spektra operátoru musíme najít čísla tzv. **hamiltoniánu** $\hat{H}$. (hamiltonova operátoru, jde o operátor celkové energie). Musí tedy platit vztah

$$\hat{H}\psi_n = E_n \cdot \psi_n .$$

Hodnoty E_n udávají možné energetické hladiny, hodnoty ψ_n jim odpovídající vlnové funkce. Později uvidíme, že výše uvedený vztah je vlastně jedním z tvarů dobře známé **Schrödingerovy rovnice**.

4) Postulát o střední hodnotě

Je-li systém ve stavu popsaném vlnovou funkcí ψ, měli bychom být podle 1. postulátu schopni stanovit střední hodnotu (tj. hodnotu, kterou dostaneme průměrováním výsledků z obrovského množství měření) pro libovolnou fyzikální veličinu reprezentovanou lineárním a hermitovským operátorem $\hat{A}$.

Návod, jak to reálně provést, nám dává tento postulát: Střední hodnotu veličiny reprezentované operátorem $\hat{A}$. určíme pomocí vzorce:

$$A_{st} = \int_V \psi^* \hat{A} \psi \, \mathrm{d}V .$$

Díky vlastnostem vlnové funkce a operátoru tato střední hodnota vždy existuje a je konečná. Hvězdička pak udává komplexně sdruženou funkci.

Nyní se dostáváme zpět k vlastnostem systému vlastních funkcí. Ukazuje se, že systém těchto funkcí je vždy ortogonální, což znamená, že platí:

$$\int_V \psi_m^* \cdot \psi_n = 0 \text{ pro m} \neq \text{n.}$$

Libovolnou vlnovou funkci ψ pak lze vyjádřit jako lineární kombinaci těchto vlastních funkcí ψ_i pomocí vztahu:

$$\psi = \sum_i a_i \cdot \psi_i .$$

Pravděpodobnost nalezení hodnoty λ_i ve stavu popsaném vlastní funkcí ψ_i se pak dá stanovit následujícím vzorcem:

$$p(\lambda_i) = \left| a_i^2 \right|.$$

Uvedené vztahy nám umožňují spočítat pravděpodobnost nalezení libovolné hodnoty libovolné fyzikální veličiny pro systém popsaný vlnovou funkcí ψ. To je v souladu s tvrzením 1. postulátu, že vlnová funkce nám poskytuje veškeré možné informace o systému.

5) Postulát o redukci vlnové funkce

Z konce uvedeného odstavce je patrné, že u systému popsaného vlnovou funkcí ψ, která není žádnou z vlastních vlnových funkcí ψ_n daného operátoru, nemůžeme jednoznačně stanovit, jakou hodnotu fyzikální veličiny odpovídající tomuto operátoru (podle 2. postulátu odpovídá každé fyzikální veličině nějaký lineární a hermitovský operátor!): Můžeme určit pouze pravděpodobnost, jaká hodnota bude nalezena.

V okamžiku, kdy provedeme měření, však získáme jednu jedinou konkrétní hodnotu λ_i, jíž odpovídá (alespoň v případě nedegenerovaného spektra) jediná vlastní funkce ψ_i **Znamená to, že provedením měření se stav systému změnil ze stavu popsaného vlnovou funkcí ψ do stavu vyjádřeného odlišnou vlnovou funkcí ψ_i!** Pro tento proces se používá výraz **redukce vlnové funkce**!

V klasické fyzice něco podobného nemá obdoby, protože předpokládáme, že můžeme provést měření na systému bez toho, aby došlo ke změně jeho stavu. V kvantové mechanice je toto principiálně nemožné. Blíže o této rozdílnosti v otázce 19.

6) Postulát o časové Schrödingerově rovnici

Stejně jako v klasické fyzice, i v kvantové mechanice potřebujeme **pohybovou rovnici** určující vývoj systému v čase. Tuto rovnici nám poskytuje následující postulát:

Je-li systém v čase $t = 0$ popsán vlnovou funkcí $\psi(\vec{r},0)$, pak je jeho následný vývoj dán časovou Schrödingerovou rovnicí

$$i \cdot h_{\check{s}} \cdot \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\vec{r},t).$$

Operátor $\hat{H}$ je hamiltoniánem systému, jedná se tedy o operátor celkové energie.

Uvedená rovnice je parciální diferenciální rovnicí prvního řádu v čase. K správnému určení jejího řešení je proto třeba zadat počáteční podmínku, jíž je právě vlnová funkce v čase $t = 0$.

Z vlastností této rovnice a předchozích postulátů plyne zajímavá skutečnost, že při jednoznačném určení stavu systému v počátečním čase nejsme schopni stanovit jednoznačně hodnotu fyzikálních veličin v jakémkoliv nadcházejícím okamžiku. Můžeme pouze určit pravděpodobnost toho, že se dostaneme k těm či oněm hodnotám.

Kvantová mechanika je tedy na rozdíl od klasické mechaniky nedeterministickou teorií, což bylo trnem v oku celé řadě významných fyziků (např. Albert Einstein). Podrobněji o tom v otázce 19.

7) Postulát o nerozlišitelnosti částic

V klasické fyzice platí, že dvě stejné částice (tj. částice se stejnými fyzikálními charakteristikami) můžeme rozlišit podle jejich trajektorie. Ve fyzice kvantové tuto možnost nemáme. Je to proto, že samotný pojem trajektorie zde nemá jednoznačný smysl kvůli existenci Heisenbergových relací neurčitosti.

Dvě částice s přesně stejnými charakteristikami jsou tedy v kvantové mechanice zásadně navzájem nerozlišitelné. Tomuto tvrzení se říká **princip neurčitosti.**

Uvedený princip má poměrně zajímavé fyzikální důsledky. Uvažujme systém složený ze dvou částic 1 a 2. Stav tohoto systému je popsán vlnovou funkcí $\psi_{1,2}$. Pokud nyní uvedené částice prohodíme, získáme stav popsaný vlnovou funkcí $\psi_{2,1}$. Vzhledem k tomu, že částice jsou nerozlišitelné, musí být pravděpodobnost výskytu udaná kvadrátem vlnové funkce v obou případech stejná. Tzn. že platí:

$$\left|\psi_{1,2}\right|^2 = \left|\psi_{2,1}\right|^2.$$

Toho lze docílit dvěma způsoby:

a) platí $\psi_{1,2} = \psi_{2,1}$. V takovém případě je vlnová funkce **symetrická,** příslušné částice se nazývají **bosony** a platí pro ně statistické **Boseho-Einsteinovo rozdělení.** V jednom stavu může být mnoho částic tohoto typu. Mezi tyto částice patř například proton či foton. Jejich spin je celočíselný.

b) platí $\psi_{1,2} = -\psi_{2,1}$. Vlnová funkce je **antisymetrická,** částice tohoto typu se nazývají **fermiony** a platí pro ně statistické **Fermiho-Diracovo rozdělení.** Pro fermiony platí tzv. **Pauliho vylučovací princip** zaručující, že v každém stavu se může nacházet nejvýše jedna částice. Spin je u fermionů poločíselný. Typickým příkladem tohoto druhu částic je elektron.

8) Postulát o existenci spinu

Ve 20. letech 20. století se ukázalo, že elementární částice mají vlastní magnetický moment a moment hybnosti. Tuto skutečnost prokázal například známý Sternův – Gerlachův experiment, při němž se svazek vodíkových atomů v magnetickém poli rozštěpil na dva svazky.

Nerelativistická kvantová mechanika nebyla schopna tuto experimentálně prokázanou skutečnost vysvětlit na základě předchozích postulátů, proto bylo třeba přidat postulát další:

Elementární částice mají vlastní magnetický moment a vlastní moment hybnosti – tzv. spin.

Je třeba zdůraznit, že spin nepochází od rotace kolem vlastní osy! Jde o zcela specifickou záležitost kvantové mechaniky, která nemá v klasické fyzice obdoby a nelze ji proto v jejím rámci nijak interpretovat. Později se ukázalo, že existence spinu přirozeně vyplývá z relativistického zobecnění kvantové mechaniky, jež je udáno tzv. **Diracovou rovnicí.**

Použitá literatura:

[1] Lubomír Skála: Úvod do kvantové mechaniky, Academia, 2005
[2] Jarmila Dlouhá: Kvantová mechanika pro posluchače učitelství fyziky, SPN Praha, 1979
[3] Radomír Kuchta: Kvantová teorie, přednášky pro studenty ZČU