Otázka 19 – Vztah kvantové a klasické mechaniky

(shodnosti, rozdíly, souvislosti)

1) Rozdíly

Mezi klasickou mechanikou, popisující dostatečně přesně pohyb v makrosvětě, a mechanikou kvantovou, která se uplatní v mikrosvětě, existuje celá řada zásadních rozdílů. Jsou to především:

a) Určení stavu systému

V klasické mechanice je stav systému s konečně mnoha stupni volnosti jednoznačně zadán v okamžiku, kdy uvedeme **časový vývoj** jednotlivých jeho souřadnic. Potřebujeme tedy znát funkce $x_1(t), x_2(t),..., x_n(t)$.

Naopak v mechanice kvantové zadáváme stav systému pomocí tzv. **vlnové funkce**, která závisí na všech souřadnicích a na čase. Tato funkce ve tvaru $\psi(x_1, x_2,..., x_n, t)$ nám o daném systému dává veškeré možné informace, které lze vůbec získat. Vlastnosti vlnové funkce jsou uvedeny u otázky 16. Její interpretace je pravděpodobnostní!

b) Energie systému

Zatímco v případě klasické mechaniky je energie systému vždy **spojitá,** u kvantové mechaniky je energetické spektrum velice často **diskrétní**. Konkrétní případy diskrétního energetického spektra je možné nají u otázky 17 (potenciálová jáma, harmonický oscilátor apod.).

Volná částice má i v kvantové mechanice spojité spektrum, jak jsme se přesvědčili u otázky 18.

c) Existence trajektorií (lokalizace částice)

V klasické mechanice lze bez problému stanovit u dané částice zároveň její polohu a hybnost. Není tudíž problém určit trajektorii částice v příslušném fázové prostoru.

V mechanice kvantové toto není principiálně možné! Nelze totiž, podle tzv. **Heisenbergerových relací** neurčitosti, stanovit zároveň hybnost a polohu!

Matematicky tato skutečnost vyplývá z nekomutativnosti operátorů polohy a hybnosti (viz otázka 16). Relace neurčitosti udává, jaká minimální nejasnost musí nastat u součinu nepřesnosti v určení polohy Δx a hybnosti Δp_x. Musí platit, že

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{h_s}{2}.$$

Přesné určení polohy tak má za následek nekonečnou nejasnost v určení hybnosti a naopak. V makrosvětě se uvedené relace nemohou projevit z důvodu extrémně malé hodnoty redukované Planckovy konstanty h_s. Nemožnost současného určení polohy a hybnosti má za následek „rozmázání“ trajektorií ve fázovém prostoru. V důsledku toho ztrácí pojem trajektorie v kvantové mechanice v podstatě svůj význam.

Nemožnost určit zároveň zcela přesně hodnoty dvou fyzikálních veličin A a B se projeví vždy, když pro komutátor odpovídajících lineárních a hermitovských operátorů $\hat{A}$ a $\hat{B}$ (fyzikální veličině odpovídá ve formalismu kvantové mechaniky právě tento typ operátoru) platí relace $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] \neq 0$ (tzv. operátory nekomutují!). Pro případ, že platí $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = i \cdot \hat{C}$, je možné odvodit tzv. zobecněné Heisenbergovy relace neurčitosti ve tvaru:

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{C}{2}.$$

Množina všech operátorů, jež navzájem komutují , se nazývá **úplná množina komutujících operátorů.** Jim odpovídá **úplná množina pozorovatelných.** To je množina fyzikálních veličin, které můžeme u daného systému naměřit zároveň bez toho, aby se uplatnila nějaká nejasnost v důsledku relací neurčitosti. Pro daný systém je možné najít více úplných množin pozorovatelných.

d) Rozlišitelnost částic

V klasické mechanice platí, že dvě částice se stejnými fyzikálními charakteristikami jsou vždy rozlišitelné podle svých trajektorií. V mechanice kvantové není toto rozlišení vzhledem k existenci relací neurčitosti možné provést. Částice s naprosto stejnými charakteristikami je tak třeba chápat jako nerozlišitelné. To zaručuje přímo jeden ze základních postulátů kvantové mechaniky, tzv. **princip nerozlišitelnosti částic** (viz otázka 16).

Tato skutečnost má celou řadu zajímavých důsledků: Třeba ve statistické fyzice je třeba partiční funkci vydělit faktorem $N!$, v opačném případě vyjde entropie neaditivní (tzv. Gibbsův paradox). Princip nerozlišitelnosti rovněž hraje zásadní roli při rozdělení mikročástic na fermiony a bosony (viz otázka 16).

e) Vlnově-částicový dualismus

Klasická mechanika jednoznačně odlišuje pojmy částice a vlna. Nepřipouští, aby se nějaký objekt mohl chovat někdy jedním a jindy druhým způsobem.

Naopak u kvantové mechaniky je toto možné. Ukazuje se, že mikročástice jako třeba elektrony mohou za určitých okolnostech v konkrétních experimentech projevovat vlastnosti vln (interference, ohyb). Tuto skutečnost prokázal např. **Davissonův-Germerův experiment**. První, kdo přišel s hypotézou o vlnových vlastnostech klasických částic, byl francouzský fyzik de Broglie. Podle něho je každé částici přiřazena tzv. **Broglieho vlnová délka** daná vztahem:

$$\lambda = \frac{h}{p},$$

kde p je hybnost částice a h Planckova konstanta.

Naopak elektromagnetické vlnění se při **fotoelektrickém jevu** chová jako proud částic – tzv. **fotonů**. Skutečnost, že každý objekt se, v závislosti na provedeném experimentu, může v mikrosvětě chovat buď jako částice, nebo jako vlna, patří k nejzákladnějším principům kvantové mechaniky.

f) existence tunelového jevu

V klasické fyzice nemůže překonat částice potenciálovou bariéru v případě, že na to nemá dostatečnou energii. Naopak ve fyzice kvantové existuje nenulová pravděpodobnost průchodu i v případě, že energie částice není dostatečná! Obrazně řečeno, pokud se v kvantové mechanice miliardkrát rozběhneme hlavou proti zdi, máme naději, že se nám ji jednou podaří prorazit. Této skutečnosti, která nemá v klasické mechanice obdoby, se říká **tunelový jev.**

Pravděpodobnost průchodu bariérou je možné stanovit poměrně složitým kvantověmechanickým výpočtem. Při pravoúhlé bariéře je pravděpodobnost úspěchu dána vzorcem

$$p = \frac{1}{1 + \frac{{U_0}^2}{4 \cdot E \cdot (U_0 - E)} \cdot \sinh^2\left(\sqrt{\frac{2m}{{h_s}^2} \cdot (U_0 - E)} \cdot a\right)},$$

kde a je šířka bariéry, U_0 její výška (tj. energie potřebná v klasickém případě k překonání), m hmotnost částice a E její energie. Je vidět, že pravděpodobnost úspěchu velmi rychle klesá při zvětšující se šířce bariéry.

Tunelový jev vysvětluje například existenci alfa rozpadu v jaderné fyzice, značnou roli hraje také v elektronice u některých typů Zenerových diod (u většiny se však uplatňuje spíše jev lavinový).

g) nedeterminismus kvantové mechaniky

Klasická mechanika je jednoznačně **deterministickou teorií**. Při přesně daném počátečním stavu systému a znalosti zákonů, jimiž se tento systém řídí, je možné (alespoň teoreticky, v praxi to samozřejmě zpravidla není reálné) jednoznačně určit stav systému v libovolném okamžiku v budoucnosti.

V kvantové mechanice jsme schopni pouze stanovit časový vývoj vlnové funkce (je jednoznačně dán řešením časové Schrödingerovy rovnice), ale vzhledem k její pravděpodobnostní interpretaci nejsme schopni určit časový vývoj fyzikálních veličin. Můžeme pouze stanovit pravděpodobnost, že v daném okamžiku bude naměřena ta, či ona, hodnota dané fyzikální veličiny. Kvantová mechanika je tak teorií nedeterministickou, neboť nám ani při dokonalé znalosti počáteční stavu neumožní jednoznačně určit hodnoty fyzikálních veličin v budoucnosti.

To bylo trnem v oku například Albertu Einsteinovi, který se snažil prokázat, že tato její vlastnosti. je dána existencí **skrytých parametrů**, které jsme zatím neodhalili. Nedeterministickou povahu teorie se pokusil mimo jiné zpochybnit pomocí tzv. **EPR – paradoxu (Einstein-Podolsky-Rosen paradox).** Ten měl z předpokladů lokality a reality

ukázat, že kvantová mechanika je nekompletní teorií. Zásluhou Johna Bella se později ukázalo, že tento myšlenkový experiment neúplnost kvantové mechaniky nedokazuje.

h) měření v klasické a kvantové mechanice

V klasické mechanice předpokládáme, že na systému můžeme provést měření bez toho, abychom nějakým způsobem ovlivnili jeho stav. V mechanice kvantové to však z principu nemůže platit. Vyplývá to z **postulátu o redukci vlnové funkce**, k níž dojde právě v okamžiku měření. Měřící přístroj tak musí bez jakýchkoliv pochybností ovlivňovat stav systému.

Otázka měření v kvantové mechanice je velmi často diskutována z různých úhlů pohledu. Různé interpretace kvantové teorie se v pohledu na samotný proces měření značně liší.

2) Souvislosti

Kvantová mechanika se v řadě věcí od klasické mechaniky výrazně odlišuje. Přesto existuje mezi oběma teoriemi úzká souvislost. Svědčí o tom třeba skutečnost, že bezčasovou Schrödingerovu rovnici lze „vyvodit“ z Hamiltonova-Jacobiho rovnice klasické mechaniky. Rovněž při tzv. 1.kvantování se vychází z vlastností Poissonových závorek, které hrají velkou roli v hamiltonovském formalismu klasické mechaniky.

Ukazuje se, že klasickou mechaniku lze chápat jako speciální případ kvantové mechaniky projevující se v oblasti dostatečně velkých rozměrů a hmotností. Při přechodu od kvantové ke klasické mechanice musí vymizet (díky tomu, že je zanedbatelně malá!) Planckova konstanta h_s. Není možné říct, při jaké hmotnosti či rozměru systému je již možné použít klasickou mechaniku, to se odvíjí od konkrétního případu.

Matematicky je souvislost klasické a kvantové mechaniky vyjádřena pomocí tzv. **Ehrenfestových rovnic.**. Tyto rovnice jsou celkem dvě a říkají nám, že střední hodnoty operátorů se řídí zákony platnými v klasické fyzice. Konkrétně, **1. Ehrenfestovu rovnici** lze zapsat ve tvaru:

$$\frac{\mathrm{d}\langle \hat{x} \rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\langle \hat{p}_x \rangle}{m}.$$

Zvedený vztah nám v podstatě říká, že střední hodnota časové derivace operátoru souřadnice je rovna střední hodnotě operátoru hybnosti dělené hmotností částice. Jedná se o analogii klasického vztahu:

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = v_x = \frac{p_x}{m}.$$

2. Ehrenfestova rovnice je pak přímo analogií **2. Newtonova pohybového zákona**. Podle této rovnice platí:

$$\frac{\mathrm{d}\langle \hat{p}_x \rangle}{\mathrm{d}t} = \langle \hat{F}_x \rangle.$$

Časová derivace střední hodnoty operátoru hybnosti je tak rovna časové derivaci střední hodnoty operátoru síly. To je kvantová analogie klasického vztahu

$$\frac{\mathrm{d}p_x}{\mathrm{d}t} = F_x \Rightarrow m \cdot a_x = F_x .$$

Střední hodnoty veličin v kvantové mechanice se tak v podstatě chovají podle zákonů mechaniky klasické.

3) **Shodnosti**

??? – zajdu se poptat Raunera, co by si tam jako přál slyšet…

Použitá literatura:
[1] Lubomír Skála: Úvod do kvantové mechaniky, Academia, 2005
[2] Radomír Kuchta: Kvantová teorie, přednášky pro studenty ZČU
[3] Karel Rauner: Atomová a jaderná fyzika, přednášky pro studenty FPE ZČU