2. Základní postuláty kvantové mechaniky

V tomto odstavci uvedeme výčet základních postulátů kvantové mechaniky, doplněný jen několika vysvětlujícími poznámkami. Některé z postulátů byly již uvedeny (i když třeba jen implicitně a kvalitativně) a diskutovány v kap. II,III. Aplikacím zde uvedených postulátů na některé základní úlohy z oblasti mikrosvěta, je pak věnován téměř celý zbytek textu (především pak připravovaný II.díl skripta).

Formulaci postulátů uvedeme pomocí pojmů zavedených v předchozím odst. 1.4 (prostor stavových vektorů $\mathcal{E}$, stavové ket-vektory, atd). Student, kterému tato obecná, na konkrétní reprezentaci kvantové mechaniky nezávislá, terminologie činí ještě potíže, může si při prvním čtení místo termínů : stavový vektor (ket-vektor) a prostor $\mathcal{E}$, dosazovat(snad) důvěrněji známé pojmy : vlnová funkce a prostor vlnových funkcí $\mathcal{F}$; symbolika by přitom neměla činit potíže, neboť jsme Diracův způsob zápisu skalárního součinu a maticových prvků zavedli i pro vlnové funkce.

Postulát o určení stavu kvantové soustavy

1. postulát

V daném čase t_0 je stav fyzikální soustavy určen stavovým vektorem $|\psi(t_0)\rangle$ z prostoru $\mathcal{E}$.

Poznámky:

(a) Protože prostor stavových vektorů dané soustavy je lineárním vektorovým prostorem, je v 1.postulátu implicitně obsažen i princip superpozice.

(b) Kolineární (rovnoběžné) ket-vektory z $\mathcal{E}$,tj vektory $|\psi_1(t_0)\rangle$, $|\psi_2(t_0)\rangle$ pro něž platí $|\psi_2(t_0)\rangle = c\,|\psi_1(t_0)\rangle$, (c je konstanta), reprezentují týž stav soustavy. Aby byl výběr jednoznačný (až na fázi), vybíráme normalizované ket-vektory, pro něž $\langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle = 1$.

Postulát o reprezentaci měřitelných veličin

2. postulát

Každá měřitelná fyzikální veličina A je reprezentována hermitovským operátorem $\mathcal{A}$, který působí v prostoru $\mathcal{E}$.

Dva postuláty o měření fyzikálních veličin

3. postulát

Jediným možným výsledkem měření veličiny A , je některá z vlastních hodnot operátoru $\mathcal{A}$, který tuto veličinu reprezentuje.

Poznámky:

(a) Protože výsledkem měření může být jen reálné číslo, museli jsme se omezit na třídu lineárních operátorů, jejichž vlastní hodnoty jsou reálné; tuto vlastnost mají právě hermitovské operátory.

(b) Rovnice pro vlastní vektory a hodnoty (srov.(14),(38)) je

$$\mathcal{A}|u\rangle = a\,|u\rangle \tag{70}$$

Jejím řešením získáme vlastní vektory a hodnoty (srov.(39))

$$\underbrace{|u_1^{(1)}\rangle,\dots,|u_1^{(g_1)}\rangle}_{a_1},\underbrace{|u_2^{(1)}\rangle,\dots,|u_2^{(g_2)}\rangle}_{a_2},\dots,\underbrace{|u_n^{(1)}\rangle,\dots,|u_n^{(g_n)}\rangle}_{a_n},\dots \tag{71}$$

kde g_n (n=1,2,...) značí stupeň degenerace n-tého stavu (vlastní hodnoty). Vlastní hodnoty a funkce vyhovují rovnici

$$\mathcal{A}\,|u_n^{(i)}\rangle = a_n\,|u_n^{(i)}\rangle \tag{72}$$

($n = 1,2,\dots$; $i = 1,2,\dots,g_n$).

4. postulát

Je-li na soustavě, která je ve stavu určeném normalizovaným stavovým vektorem $|\psi\rangle$, měřena veličina A , potom pravděpodobnost, že výsledkem měření bude vlastní hodnota a_n operátoru $\mathcal{A}$, je

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^{(i)}|\psi\rangle|^2 \quad , \tag{73}$$

kde g_n je stupeň degenerace hodnoty a_n a $|u_n^{(1)}\rangle,\dots,|u_n^{(g_n)}\rangle$ je soubor ortonormálních vlastních vektorů operátoru $\mathcal{A}$, které přísluší vlastní hodnotě a_n .

Poznámky:

(a) Soubor vlastních vektorů operátoru $\mathcal{A}$ (71) můžeme použít jako bázi v níž rozložíme $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = c_1^{(1)}|u_1^{(1)}\rangle + \dots + c_1^{(g_1)}|u_1^{(g_1)}\rangle + \dots + c_n^{(1)}|u_n^{(1)}\rangle + \dots + c_n^{(g_n)}|u_n^{(g_n)}\rangle + \dots \tag{74}$$

Je-li báze ortonormální, tj platí

$$\langle u_n^{(i)}|u_m^{(j)}\rangle = \delta_{nm}\delta_{ij} \quad ,$$

potom

$$c_n^{(i)} = \langle u_n^{(i)}|\psi\rangle \tag{75}$$

Výraz (73) je tedy součtem kvadrátů modulů koeficientů u vlastních vektorů, které přísluší g_n-násobně degenerované vlastní hodnotě a_n.

Postulát vlastně vyjadřuje náš závěr o významu koeficientů v rozvoji, k němuž jsme došli v odst. II.4.3.

$|c_n^{(i)}|^2$ udává pravděpodobnost, že soustava je ve stavu $|u_n^{(i)}\rangle$ ($i = 1,2,\dots,g_n$). Protože ale měříme veličinu A a pro všechny stavy $|u_n^{(1)}\rangle,\dots,|u_n^{(g_n)}\rangle$ naměříme hodnotu a_n, je výsledná pravděpodobnost naměření a_n rovna součtu

$$P(a_n) = |c_n^{(1)}|^2 + \dots + |c_n^{(g_n)}|^2 \tag{76}$$

(b) Pro spojité spektrum (nedegenerované) je pravděpodobnost, že bude naměřena hodnota v intervalu $a(k),a(k+dk)$ rovna

$$dP(a(k)) = |\langle v(k)|\psi\rangle|^2\, dk \tag{77}$$

kde $|v(k)\rangle$ je vlastní vektor $\mathcal{A}$, vyhovující rovnici

$$\mathcal{A}|v(k)\rangle = a(k)|v(k)\rangle \tag{78}$$

Zde se k mění spojitě a podmínka ortonormality vlastních vektorů je

$$\langle v(k')|v(k)\rangle = \delta(k-k') \tag{79}$$

kde $\delta(k-k')$ je δ-funkce (dod.C).

Postulát o redukci vlnového klubka

Předpokládejme, že chceme v daném čase změřit veličinu A. Jestliže známe stavový vektor $|\psi\rangle$, který reprezentuje stav soustavy těsně před měřením , potom pravděpodobnost naměření hodnot $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$ je dána 4.postulátem. Provedeme-li však měření, potom výsledkem měření je již jen jediná z těchto hodnot. Bezprostředně po měření již nemá smysl říkat "pravděpodobnost, že naměříme...", neboť už naměřenou hodnotu známe. Máme tedy doplňující informaci a je proto pochopitelné, že po měření musí být soustava ve stavu odlišném od $|\psi\rangle$. V jakém stavu bude, říká:

5. postulát

Jestliže měření veličiny A na soustavě ve stavu $|\psi\rangle$ dá výsledek a_n, potom stav soustavy bezprostředně po měření je

$$\frac{\mathcal{P}_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\mathcal{P}_n|\psi\rangle}} \tag{80}$$

kde

$$\mathcal{P}_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^{(i)}\rangle\langle u_n^{(i)}| \tag{81}$$

je projekční operátor na podprostor $\mathcal{E}_n$ v $\mathcal{E}$, spojený s vlastní hodnotou a_n .

Poznámky:

(a) V postulátu nám vystupuje nový pojem , který je v kvantové mechanice běžný: projekční operátor. Jeho působení si můžeme opět znázornit v trojrozměrném prostoru. Vraťme se např. k obr.44 a uvažme, jak působí operátor

$$\mathcal{P}_1 = |u_1\rangle\langle u_1|$$

na vektor $|\psi\rangle$; platí

$$\mathcal{P}_1|\psi\rangle = |u_1\rangle\langle u_1|\psi\rangle = \langle u_1|\psi\rangle|u_1\rangle = c_1|u_1\rangle \quad ,$$

což je skutečně vektor, který dostaneme ortogonální projekcí $|\psi\rangle$ na osu určenou vektorem $|u_1\rangle$.

Projekční operátor má charakteristickou vlastnost: aplikujeme-li ho dvakrát, dostaneme

$$\mathcal{P}_1\mathcal{P}_1|\psi\rangle = \mathcal{P}_1^2|\psi\rangle = c_1|u_1\rangle\langle u_1|u_1\rangle = c_1|u_1\rangle$$

takže

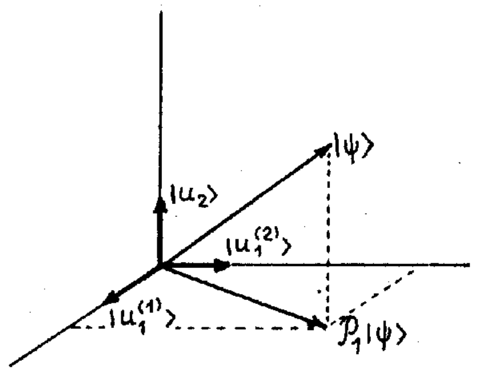
$$\mathcal{P}_1^2 = \mathcal{P}_1 \tag{82}$$

Tento výsledek, který platí pro libovolný projekční operátor, je z geometrického hlediska snadno pochopitelný; druhé působení projekčního operátoru už "dělá jen projekci vektoru $\mathcal{P}_1|\psi\rangle$ na sebe sama", takže nemůže již nic změnit.

Obdobně operátor (viz obr.45)

$$\mathcal{P}_1 = |v_1^{(1)}\rangle\langle v_1^{(1)}| + |v_1^{(2)}\rangle\langle v_1^{(2)}|$$

provádí projekci libovolného vektoru $|\psi\rangle$ do roviny (podprostoru) určené vektory $|v_1^{(1)}\rangle$, $|v_1^{(2)}\rangle$ (pro vektory $|u_1^{(1)}\rangle$, $|u_1^{(2)}\rangle$ příslušející téže vlastní hodnotě a_1 je situace v obr. 49).



Obr. 49.
Projekce $|\psi\rangle$ do podprostoru $\mathcal{E}_1$, který je tvořen všemi vektory v rovině určené $|u_1^{(1)}\rangle$, $|u_1^{(2)}\rangle$. Platí

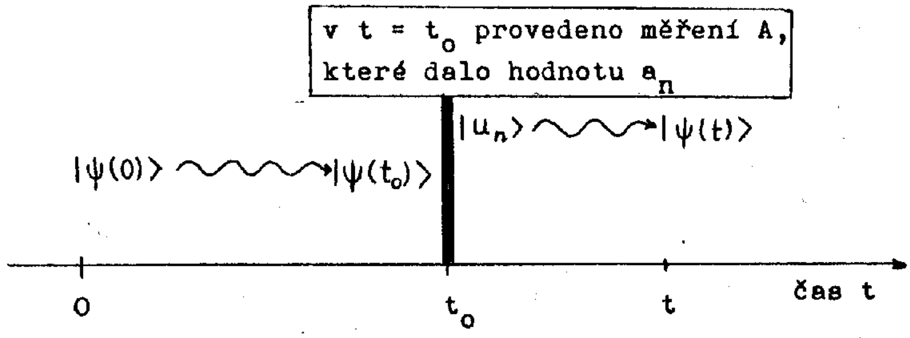
$$\mathcal{A}|u_1^{(i)}\rangle = a_1|u_1^{(i)}\rangle \quad (i=1,2)$$

$$\mathcal{A}|u_2\rangle = a_2|u_2\rangle$$

a $$\mathcal{P}_1 = \sum_{i=1}^{2}|u_1^{(i)}\rangle\langle u_1^{(i)}|$$

(b) Stav soustavy je tedy bezprostředně po měření A , které dalo výsledek a_n , určen vektorem, který je projekcí $|\psi\rangle$ do podprostoru tvořeného všemi vektory, jimž přísluší vlastní hodnota a_n .

Schematicky je to znázorněno na obr. 50.



Obr. 50. Jestliže měření A v $t=t_o$ dalo hodnotu a_n, potom stav soustavy $|\psi(t_o)\rangle$ se skokem změnil na $|u_n\rangle$ a tento nový stav se s časem dále vyvíjí (jak určuje následující postulát).

Postulát o časovém vývoji stavu soustavy

V kap.III jsme již postulovali Schrödingerovu rovnici. Nyní ji v obecnějším tvaru uvádíme jako

6. postulát

Časový vývoj stavového vektoru $|\psi(t)\rangle$ je určován Schrödingerovou rovnicí

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \mathcal{H}(t)|\psi(t)\rangle \tag{83}$$

kde $\mathcal{H}(t)$ je operátor, který reprezentuje celkovou energii soustavy.

Poznámka.

Operátor $\mathcal{H}(t)$ se nazývá Hamiltonův operátor, nebo kratčeji, hamiltonián.

Postulát, který poskytuje návod ke konstrukci kvantověmechanických operátorů aneb
Kvantové podmínky

Soustava částic je v klasické mechanice charakterizována kartézskými souřadnicemi $Q_1, Q_2, \dots, Q_n$ a jim odpovídajícími impulsy $P_1, P_2 \dots, P_n$. Ostatní měřitelné veličiny se pak dají vyjádřit pomocí těchto souřadnic a impulsů. Tak např. pro jednu částici s hmotností m je kinetická energie

$$T = \frac{P_1^2 + P_2^2 + P_3^2}{2\,m} = \frac{|\vec{p}|^2}{2m} \tag{84}$$

kde $P_1 = p_x$, $P_2 = p_y$, $P_3 = p_z$ a $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$

nebo moment hybnosti

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \tag{85a}$$

kde $\vec{r} = (x,y,z)$ ($Q_1 = x$, $Q_2 = y$, $Q_3 = z$) je polohový vektor částice a $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ je opět její impuls (srov.(84)).

Kartézské složky $\vec{L}$ jsou

$$L_x = yp_z - zp_y \quad ; \quad L_y = zp_x - xp_z \quad ; \quad L_z = xp_y - yp_x \tag{85b}$$

Kinetická energie souboru r částic je

$$T = \sum_{i=1}^{r} \frac{|\vec{p}_i|^2}{2m_i} = \sum_{i=1}^{r} \frac{p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2}{2m_i} \tag{86}$$

kde $\vec{p}_i = (p_{ix}, p_{iy}, p_{iz})$ je impuls a m_i hmotnost i-té částice.

Potenciální energie této soustavy nechť je funkcí pouze prostorových souřadnic, takže

$$V = V(x_1,y_1,z_1,\ldots,x_i,y_i,z_i,\ldots,x_r,y_r,z_r;t) \tag{87}$$

kde t je čas. Pro stacionární stavy nezávisí V explicitně na t.

Proměnná t vystupuje ve vztazích jako parametr , nikoli jako dynamická proměnná a nenahrazuje se proto operátorem !

Celková energie (Hamiltonova funkce) je

$$H(x_1,\ldots,z_r,p_{1x},\ldots,p_{rz};t) =$$

$$= \sum_{i=1}^{r} \frac{|\vec{p}_i|^2}{2\,m_i} + V(x_1,\ldots,z_r;t) \tag{88}$$

Ve vztazích (86)-(88) je logické přiřadit

$$x_1 = Q_1 \;,\; y_1 = Q_2 \;,\; z_1 = Q_3 \;,\ldots,\; x_r = Q_{3r-2} \;,\; y_r = Q_{3r-1} \;,\; z_r = Q_{3r}$$

$$p_{1x} = P_1 \;,\; p_{1y} = P_2 \;,\; p_{1z} = P_3 \;,\ldots,\; p_{rx} = P_{3r-2} \;,\; p_{ry} = P_{3r-1} \;,\; p_{rz} = P_{3r} \;.$$

Nyní je snad jasné, co se rozumí výrokem, že každá veličina A je funkcí $Q_1,\ldots,Q_n$ a $P_1,\ldots,P_n$,tj

$$A = A(Q_1,\ldots,Q_n,P_1,\ldots,P_n) \tag{89}$$

7.postulát

Operátor $\mathcal{A}$, reprezentující klasicky definovanou veličinu

$$A = A(Q_1,\ldots,Q_n,P_1,\ldots,P_n) \;,$$

se získá tak, že za zobecněné souřadnice a impulsy $Q_1,\ldots,Q_n,P_1,\ldots,P_n$ se do výrazu pro A dosadí operátory $\mathcal{Q}_1,\ldots,\mathcal{Q}_n,\mathcal{P}_1,\ldots,\mathcal{P}_n$, které splňují komutační relace

$$[\mathcal{Q}_i \,,\, \mathcal{Q}_j] = 0 \;,\; [\mathcal{P}_i \,,\, \mathcal{P}_j] = 0 \;,\; [\mathcal{Q}_i \,,\, \mathcal{P}_j] = i\hbar\,\delta_{ij} \tag{90}$$

$(i,j = 1,2,\ldots,n)$

Poznámky:

(a) Komutační relace (90) v 7.postulátu, odrážejí nám již známou skutečnost, že některé veličiny nelze současně změřit (tím se rozumí změřit jednu a nezměnit tímto měřením druhou). Nebo jinak: komutační relace (90) jsou jinou formou vyjádření Heisenbergových relací neurčitosti. Veličiny zobrazené komutujícími operátory lze současně změřit. K této otázce se ještě vrátíme v odst.3.3.

(b) V první části 7.postulátu se předpokládá, že operátory pro souřadnice a impulsy, tj $\mathcal{Q}_1,\dots,\mathcal{Q}_n$, $\mathcal{P}_1,\dots,\mathcal{P}_n$, známe. K jejich nalezení nám mohou posloužit opět komutační relace (90); jak, uvidíme v odst.3.1.

(c) Postulát pochopitelně dává jen návod, jak získat operátory zobrazující veličiny definované v klasické mechanice. Jsou však i veličiny, které nemají klasickou analogii. Potom je třeba definovat přímo odpovídající operátor tak, aby výsledky získané s jeho pomocí byly v souladu s experimentem. Na příkladu spinu to uvidíme v následující kapitole.

(d) Symetrizace výrazů

Někdy se může stát, že klasický definiční vztah pro A obsahuje členy, které by vedly k nejednoznačnému určení operátoru. Důvod je v tom, že zatímco klasické souřadnice a impulsy komutují, odpovídající operátory komutovat nemusí. Tak se např. v klasickém výrazu může vyskytovat součin Q_iP_i ($= P_iQ_i$). Podle (90) ovšem odpovídající operátory nekomutují, tj

$$\mathcal{Q}_i \mathcal{P}_i \neq \mathcal{P}_i \mathcal{Q}_i$$

Co tedy dosadit za klasický výraz Q_iP_i ? Postup je takový, že místo Q_iP_i napíšeme symetrický výraz

$$\frac{1}{2} (Q_iP_i + P_iQ_i)$$

a v něm teprve provedeme náhradu za operátory. V klasickém výrazu pro A se provedením symetrizace nic nezměnilo a kvantové operátory jsou již určeny jednoznačně.

3. Některé závěry plynoucí z postulátů

3.1) Souřadnicová a impulsová reprezentace

V poznámce (b) k 7.postulátu jsme se již zmínili, že postulované komutační relace (90) nám mohou pomoci při stanovení základních operátorů pro souřadnice $Q_1,\dots,Q_n$ a impulsy $P_1,\dots P_n$. Jedna z možností je, zvolit za operátory souřadnic $\mathcal{Q}_1,\dots,\mathcal{Q}_n$ přímo souřadnice $Q_1,\dots,Q_n$ a operátory $\mathcal{P}_1,\dots,\mathcal{P}_n$ určit pak tak, aby byly splněny komutační relace (90). Využijeme-li výsledek (13), je zřejmě možné zobrazit operátory souřadnic a impulsů takto: