Něco málo z kvantové mechaniky

Káťa Fišerová

V úvodu přednášky si připomeneme historické pozadí vzniku kvantové teorie. Které experimentálně zjištěné skutečnosti nebylo možné na konci 19. a na začátku 20. st. vysvětlit pomocí znalostí klasické fyziky? Co s ní bylo dokonce v přímém rozporu? Kteří pánové přispěli při budování nové teorie svou troškou do mlýna a jak? Pak si povíme, co to je **operátor**[1]. Co to znamená, když dva operátory komutují a když naopak nekomutují. (*Dvě fyzikální veličiny je možné současně přesně změřit právě tehdy, když spolu operátory těchto veličin komutují*[2].) Jak se v měření projevují charakteristické rozměry přístrojů a zkoumaných částic? Jaké přesnosti lze dosáhnout? Jaká je v případě nesouměřitelných veličin (tzn. není možné je obě zároveň přesně změřit) nejmenší možná chyba? Zjednodušeně si odvodíme tzv. **relaci neurčitosti**[3].

Nelekejte se, že v tomto sborníčkovém textu narážíte na mnoho zcela neznámých slov či značek. Většinou neznamenají nic extrémně složitého. Podle složení účastníků přednášky se budu více či méně snažit vyvarovat se používání nástrojů integrálního a diferenciálního počtu. Spousta věcí se dá říct bez toho nebo prostě fikaně obejít ...

Následující **přehled základních postulátů QM** uvádím v kompromisní formě tak, aby vás moc nevyděsil a aby tam zároveň byla ta nejpodstatnější fakta (kromě Schrödingerovy rovnice) řečena. Nebojte se, všechno si vysvětlíme a něco třeba přeskočíme. V krajním případě, pokud budete chtít, mohou informace zde sepsané zůstat pěkně zavřené ve sborníčku a můžeme si spíš tak povídat a složité matematice se úplně vyhnout.

Postulát o vlnové funkci

Veškeré informace o stavu částice jsou popsány vlnovou funkcí, což je komplexní funkce reálných proměnných x, y, z a t (prostorové souřadnice a čas). Kvadrát absolutní hodnoty vlnové funkce udává hustotu pravděpodobnosti výskytu částice v místě r a čase t. Díky této interpretaci musí být vlnová funkce normovaná a kvadraticky integrabilní, navíc také spojitá a při konečných změnách potenciálu spojitě derivovatelná.

---

[1] Operátor je jakousi analogií k funkci. Do funkce „hodíte“ nějaké číslo a „vypadne“ zas nějaké číslo. Do operátoru (značí se obvykle velkým tiskacím písmenem se stříškou) „hodíte“ nějakou funkci a „vypadne“ zas nějaká funkce. Říkáme například, že operátor $\hat{A}$ působí na funkci f, zapisujeme $\hat{A}f$.

[2] Dva operátory komutují, pokud $\hat{A}\hat{B}f = \hat{B}\hat{A}f$, zkráceně často jen $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, tj. $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$. Tento rozdíl označujeme jako **komutátor** operátorů $\hat{A}$ a $\hat{B}$, zapisujeme $[\hat{A}, \hat{B}]$.

[3] $\delta F \cdot \delta G \geq \frac{1}{2} | \langle \hat{K} \rangle |$, kde $i\hat{K} = [\Delta\hat{F}, \Delta\hat{G}]$ je tzv. **komutátor**.

Postulát o operátorech
Každé fyzikální veličině, kterou můžeme pro danou částici naměřit, je přiřazen operátor, který působí na vlnovou funkci. Tyto operátory jsou lineární a hermitovské[4]. Lineárnost souvisí s principem superpozice. Hermitovské operátory se vyznačují tím, že mají reálná vlastní čísla, což je významné z hlediska měření fyzikálních veličin.

Postulát o kvantování
Jediné hodnoty, které může měřená fyzikální veličina A při jednotlivých měření nabývat, jsou vlastní čísla A_n odpovídajícího operátoru $\hat{A}$. Je-li systém popsán v okamžiku měření normovanou vlnovou funkcí ψ , pak je výsledkem měření střední hodnota veličiny A daná vztahem $\bar{A} = \langle\psi|\bar{A}\psi\rangle$.

Postulát o redukci vlnové funkce
Měření fyzikální veličiny A s výsledkem měření A_n, kde A_n je vlastní číslo odpovídající operátoru $\hat{A}$, převádí měřený systém do stavu s vlnovou funkcí ψ_n, která je vlastní funkcí operátoru $\hat{A}$ s vlastním číslem A_n[5]. Při měření tedy nedochází ke změně vlnové funkce pouze tehdy, je-li systém v některém z vlastních stavů operátoru $\hat{A}$.

Úlohy k zamyšlení

Příklad. Nechť φ a ψ jsou normované vlnové funkce. Jaké vlastnosti musí splňovat koeficienty $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$, aby $c_1\varphi + c_2\psi$ byla normovaná vlnová funkce?

Příklad. V jedné dimenzi mějme operátor souřadnice $\hat{x} = x$ a operátor hybnosti $\hat{p} = -ih\frac{d}{dx}$. Spočtěte komutátor $[\hat{x}, \hat{p}]$. Co z něj vyplývá pro souměřitelnost polohy a hybnosti částice? (Pozn.: Na tu konstantu ih můžete na chvíli zapomenout, na nulovost či nenulovost komutátoru nebude mít vliv, stačí spočítat $[\hat{x}, \frac{x}{dx}]$.)

Příklad. Které z následujících operátorů jsou lineární?

(a) $\hat{A}f = af$, $a \in \mathbb{C}$

(b) $\hat{B}f = f^2$

(c) $\hat{C}f = f^*$ (komplexní sdružení)

Příklad. Předpokládejme, že máme dva systémy, které se nacházejí ve stavu popsaném stejnou vlnovou funkcí. Na každém systému jednou změříme veličinu A a získáme různé hodnoty. Je to možné? Co můžeme říci o stavu obou systému před a po měření?

[4] Operátor $\hat{L}$ je lineární, jestliže pro něj platí: $\forall\, a \in \mathbb{C}: \ \hat{L}(af) = a\hat{L}(f)$ a $\hat{L}(f_1 + f_2) = = \hat{L}(f_1) + \hat{L}(f_2)$. Hermitovskost operátoru souvisí s jeho chováním ve skalárním součinu, který je v QM definován pomocí integrálu. Víc si zatím raději netroufám odtajnit :-)

[5] Vlastní čísla A_n a vlastní funkce ψ_n operátoru $\hat{A}$ jsou dány netriviálním řešením *vlastního problému* $\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n$.