Základní postuláty kvantové mechaniky

Kvantovou mechaniku je možné vybudovat na základě těchto **základních postulátů**:

1. Každý stav fyzikálního systému je možné popsat tzv. vlnovou funkcí.
2. Každé pozorované veličině je přiřazen její lineární operátor.

Operátor je vlastně jakási operace, která dává návod, jak příslušnou veličinu v kvantové fyzice určit.

3. Jediné možné hodnoty, které lze naměřit při měření pozorovatelné veličiny *D* jsou její charakteristické hodnoty (vlastní hodnoty), které získáme řešením charakteristické rovnice operátoru $\hat{D}$ přiřazeného měřené veličině *D*.

Charakteristické hodnoty (vlastní hodnoty) při házení mincí jsou panna nebo orel; charakteristické hodnoty při házení krychlovou symetrickou (tj. neošvindlovanou) kostkou jsou hodnoty 1, 2, 3, 4, 5 a 6; hodnoty připadající v úvahu při měření délky desky stolu jsou hodnoty z určitého intervalu daného přesností měření; ...

4. Jestliže je systém ve stavu popsaném vlnovou funkcí Ψ, je kvantová střední hodnota pozorovatelné veličiny *D* při jistém sledu měření rovna $\langle D \rangle = \dfrac{\int_{t_0}^{t_k} \psi \hat{D} \overline{\psi} \mathrm{d}t}{\int_{t_0}^{t_k} \psi \overline{\psi} \mathrm{d}t}$.

Jinými slovy: Změřením fyzikální veličiny *D*, které je přeřazen operátor $\hat{D}$, s výsledkem souboru vlastních čísel veličiny *D*, převedeme systém do stavu, který je popsán vlastní funkcí (vlastním vektorem) naměřené hodnoty rovné vlastním číslům veličiny *D*.

5. Operátor časové změny má tvar $\hat{L} = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}$.

Jinými slovy: Vývoj stavu daného systému v čase je popsán Schrödingerovou rovnicí.

Nyní se pokusíme jednotlivé postuláty okomentovat.

První postulát je plně vysvětlen vlnovou funkcí.

Druhý postulát hovoří o operátorech. Pro dva operátory $\hat{P}$ a $\hat{Q}$ aplikované na funkci $f(x)$ mohou nastat dva případy:

1. $\hat{P}\hat{Q}f(x) \neq \hat{Q}\hat{P}f(x)$ - o takových dvojicích operátorů říkáme, že **nejsou komutativní** (**operátory nekomutují**)
2. $\hat{P}\hat{Q}f(x) = \hat{Q}\hat{P}f(x)$ - o takových operátorech říkáme, že **jsou komutativní** (**operátory komutují**).

Operátory se obecně značí „písmenkem se stříškou“ (např. $\hat{x}$, $\widehat{p_x}$, $\hat{H}$, ...). Operátor je „něco“ co můžeme aplikovat na nějakou funkci. Příkladem mohou být operátory: $\hat{P} = -x^2$ a $\hat{Q} = |\,|$ (absolutní hodnota). Pokud nyní vytvoříme operátor $\hat{P}\hat{Q}$ resp. $\hat{Q}\hat{P}$, který aplikujeme na funkci $f(x)$, dostaneme: $\hat{P}\hat{Q}f(x) = -x^2\left|f(x)\right|$ resp. $\hat{Q}\hat{P}f(x) = \left|-x^2 f(x)\right| = \left|-x^2\right|\left|f(x)\right| = x^2 f(x)$. Tyto operátory tedy nekomutují.

Na základě druhého postulátu je možné vytvořit návod, jak veličinu z klasické fyziky převést do fyziky kvantové:

1. uvažovanou veličinu vyjádříme pomocí souřadnice polohy *x* a pomocí hybnosti $\vec{p}$;

2. tyto veličiny nahradíme jejich operátory.

Přitom ale je třeba vzít v úvahu komutativnost (resp. nekomutativnost) uvažovaných operátorů.

Poloha a hybnost se vybírají proto, že v klasické mechanice to jsou právě poloha a rychlost, které udávají charakter pohybu a je z nich možné určit další charakteristiky pohybu (dráhu, působící sílu, ...).

Známe-li rychlost dané částice, známe (na základě znalosti její hmotnosti) i hybnost. Samotná rychlost by nepostačovala - je nutné vzít v úvahu i hybnost (právě kvůli hmotnosti).

V kvantové fyzice tyto dvě veličiny ale nekomutují, tj. nelze naměřit obě dvě současně a dostatečně přesně (ve shodě s Heisenbergovými relacemi neurčitosti).

Uvedeným způsobem je celkové energii dané soustavy přiřazen operátor $\hat{H}$, který se nazývá **Hamiltonův operátor** nebo zkráceně **hamiltonián**.

Třetí postulát hovoří o nalezení vlastních hodnot $\mathfrak{D}$, které můžeme při měření dané veličiny reprezentované operátorem $\hat{D}$ naměřit. Je možné je nalézt řešením charakteristické rovnice $\hat{D}f = \mathfrak{D}f$.

V tomto zápisu by se mohlo zdát, že je možné rovnici vydělit funkcí *f* a výrazně si uvedenou rovnici zjednodušit. To ale není možné, neboť výraz $\hat{D}f$ představuje aplikaci určitého operátoru na funkci (např. f^2, $\frac{df}{dx}$, ...).

Vlastních hodnot dané veličiny může být více a v závislosti na příslušné veličině dostáváme buď spojité nebo diskrétní spektrum (množinu) vlastních hodnot.

Většinou se ale postupuje obráceně, tj. na základě vlastních hodnot se hledá příslušná funkce *f*.

Vlastní hodnota může být:

1. degenerovaná - k dané vlastní hodnotě existuje více vlastních funkcí *f*;
2. nedegenerovaná - k dané vlastní hodnotě existuje jedna jediná funkce *f*.

Pro vlastní hodnoty energie se řeší Schrödingerova rovnice ve tvaru $\hat{H}\psi = E\psi$.

Čtvrtý postulát umožňuje vypočítat střední hodnotu měřené veličiny *D*. Vzhledem k tomu, že během měření získáme velké množství vlastních hodnot (měříme na systému mnoha částic), je třeba ze získaných vlastních hodnot vypočítat střední hodnotu. V rámci klasické fyziky je možné střední (průměrnou) hodnotu $\bar{D}$ měřené veličiny *D* určit takto: $\bar{D} = \frac{1}{N}(D_1 + D_2 + \ldots + D_N)$, kde $D_1, D_2, \ldots, D_N$ jsou vlastní hodnoty veličiny *D* naměřené během experimentu.

V rámci kvantové fyziky se postupuje podle vztahu $\langle D \rangle = \frac{\int_{x_1}^{x_2} \psi \hat{D} \bar{\psi} \, dx}{\int_{x_1}^{x_2} \psi \bar{\psi} \, dx}$. Výraz $\int_{x_1}^{x_2} \psi \bar{\psi} \, dx$ udává pravděpodobnost naměření dané veličiny v intervalu $\langle x_1; x_2 \rangle$. Při výpočtech se snažíme o normování vlnové funkce $\psi(x)$, tak aby $\int_{-\infty}^{\infty} \psi \bar{\psi} \, dx = 1$, tzn. že uvedený integrál skutečně odpovídá pravděpodobnosti.

Integrál vlastně nahrazuje součet nekonečně velkého počtu sčítanců.

Vypočtená střední hodnota nemusí vůbec nic vypovídat o naměřených hodnotách.

Např. při házení mincí jsou dvě možné vlastní hodnoty: panna a orel a přesto střední hodnota neexistuje.

Stav odpovídající vlnové funkci ψ se většinou označuje symbolem $|\psi\rangle$ (tento symbol pochází z Diracovy „ket-bra notace“ a nazývá se *vektor ket*). Někdy se též vyznačuje v jaké reprezentaci se počítá - tj. jestli jsou veličiny vyjádřené pomocí souřadnice *x* (zápis $\langle x|\psi\rangle$) nebo pomocí hybnosti $\vec{p}$

(zápis $\langle p|\psi\rangle$).

Pátý postulát kvantové mechaniky zavádí operátor časové změny ve tvaru $\hat{L} = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}$, kde *i* je imaginární jednotka (pro kterou platí $i^2 = -1$) a $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ redukovaná Planckova konstanta. Jedná se o speciální operátor, který se aplikuje na funkci, která se mění v čase, a tím tuto časovou změnu matematicky popíšeme v rámci kvantové fyziky. Důležitý je tento operátor při řešení Schrödingerovy rovnice.