

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 $\langle D \rangle = \frac{\int_{t_0}^{t_1} \psi \hat{D} \bar{\psi} dt}{\int_{t_0}^{t_1} \psi \bar{\psi} dt}$.

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 $\hat{I} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}$.

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} , \hat{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: $\hat{P}\hat{Q}f(x) = -x^2 |f(x)|$ resp. $\hat{Q}\hat{P}f(x) = |-x^2 f(x)| = |-x^2| |f(x)| = x^2 f(x)$. 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 \mathcal{D} , které můžeme při měření dané veličiny reprezentované operátorem \hat{D} naměřit. Je možné je nalézt řešením charakteristické rovnice $\hat{D}f = \mathcal{D}f$.

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 spojitě 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: $\bar{D} = \frac{1}{N}(D_1 + D_2 + \dots + D_N)$, kde D_1, D_2, \dots, 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 $(x_1; x_2)$. 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.

© Encyklopedie Fyziky (<http://fyzika.jreichl.com>); Jaroslav Reichl, Martin Všeticka

Licence <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/3.0/> zakazuje úpravy a komerční distribuci.