Postuláty kvantové mechaniky

(Skála L.: Úvod do kvantové mechaniky - ACADEMIA, Praha, 2005)

1. Postulát o vlnové funkci

Veškeré informace o stavu kvantověmechanického systému (částice) jsou obsaženy ve vlnové funkci $\psi = \psi(x, y, z, t) = \psi(\vec{\boldsymbol{r}}, t)$.

Vlnovou funkci obvykle značíme symbolem řecké abecedy, nejčastěji ψ (psí) nebo ϕ (fí). Je to obecně komplexní funkce tří prostorových souřadnic (např. kartézských) a času.
(V případě systému více částic závisí vlnová funkce na souřadnicích všech částic.)

Podle standardní (kodaňské) interpretace udává kvadrát absolutní hodnoty vlnové funkce hustotu pravděpodobnosti $\rho(\vec{\boldsymbol{r}}, t)$ výskytu částice v místě o polohovém vektoru $\vec{\boldsymbol{r}}$ v čase t

$$\boxed{\rho(\vec{\boldsymbol{r}}, t) = |\psi(\vec{\boldsymbol{r}}, t)|^2 = \psi^*(\vec{\boldsymbol{r}}, t) \cdot \psi(\vec{\boldsymbol{r}}, t)}$$

Elementární pravděpodobnost dp nalezení částice v objemovém elementu dV v okolí bodu $\vec{\boldsymbol{r}}$ v čase t je pak rovna

$$\boxed{\mathrm{d}p(\vec{\boldsymbol{r}}, t) = |\psi(\vec{\boldsymbol{r}}, t)|^2 \,\mathrm{d}V}$$

Výslednou pravděpodobnost nalezení částice v dané oblasti prostoru pak můžeme určit integrací předchozího vztahu přes uvedenou oblast. Odtud vyplývá základní podmínka kladená na vlnovou funkci (*normovací podmínka*)

$$\boxed{\int_V |\psi(\vec{\boldsymbol{r}}, t)|^2 \,\mathrm{d}V = 1},$$

ve které integrujeme přes celý prostor. Pokud tuto podmínku vlnová funkce nesplňuje, je třeba nalézt vhodnou konstantu a tou ji vynásobit (normování vlnové funkce).

S pravděpodobnostní interpretací souvisí další požadavky, které klademe na vlnovou funkci. Předpokládáme, že vlnová funkce je:

- kvadraticky itegrabilní,
- konečná,
- jednoznačná,
- spojitá a
- při konečných změnách potenciálu má spojité první derivace podle jednotlivých proměnných

2. Postulát o operátorech

Každé měřitelné fyzikální veličině je přiřazen operátor, který působí na vlnovou funkci.

Operátory značíme stříškou nad písmenem – např. $\hat{H}$. Předpokládáme, že tyto operátory jsou *lineární* a *hermitovské*. Linearita je nutná pro splnění *principu superpozice*: jsou-li ψ_1 a ψ_2 vlnové funkce daného systému, pak i funkce $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ je vlnovou funkcí tohoto systému (c_1 a c_2 jsou libovolné komplexní konstanty), hermitovské operátory mají reálná vlastní čísla a mohou tedy reprezentovat fyzikální veličiny.

Základními operátory jsou:

kartézské souřadnice

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{x}\psi &= x\psi,\\ \hat{y}\psi &= y\psi,\\ \hat{z}\psi &= z\psi\end{aligned}}$$

složky hybnosti

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{p}_x\psi &= -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x},\\ \hat{p}_y\psi &= -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial y},\\ \hat{p}_z\psi &= -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial z},\end{aligned}} \quad\Rightarrow$$

vektor hybnosti

$$\boxed{\hat{\vec{p}}\psi = -i\hbar\nabla\psi},$$

kde $\hbar$ je redukovaná Planckova konstanta, ∇ je operátor nabla – viz gradient v klasické mechanice.
Operátory veličin, které jsou funkcí souřadnic a hybnosti, získáme dosazením za uvedené operátory souřadnic a hybnosti. Ukažme to na příkladu kinetické energie E_k a momentu hybnosti $\vec{L}$

kinetická energie

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \quad\Rightarrow\quad \hat{E}_k\psi = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi$$

moment hybnosti

$$\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p} \quad\Rightarrow\quad \hat{L}_x\psi = \hat{y}\hat{p}_z\psi - \hat{z}\hat{p}_y\psi = -i\hbar\left(y\frac{\partial\psi}{\partial z} - z\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)$$

a podobně pro $\hat{L}_y$ a $\hat{L}_z$.
Připomeňme, že v kvantové mechanice existují veličiny, které nemají klasickou analogii, typickým představitelem je *spin*.

Operátory obecně nekomutují. To znamená, že záleží na pořadí jejich působení na vlnovou funkci. Snadno to lze ukázat například na dvou základních operátorech, kartézské souřadnici a jí odpovídající složce hybnosti.

$$\hat{x}\hat{p}_x\psi = \hat{x}(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}) = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$\hat{p}_x\hat{x}\psi = \hat{p}_x(x\psi) = -i\hbar\frac{\partial(x\psi)}{\partial x} = -i\hbar(x\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi)$$

Definujeme tzv. komutátor dvou operátorů $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, který je roven nule, pokud operátory komutují, v opačném případě je nenulový. Vidíme, že pro výše uvedené operátory platí $[\hat{x},\hat{p}_x] = (\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}) = i\hbar$.

3. Postulát o kvantování

Jediné hodnoty, které může měřitelná veličina A při jednotlivých měřeních nabývat, jsou vlastní čísla A_n odpovídajícího operátoru $\hat{A}$.

Vlastní čísla jsou dána řešením tzv. *vlastního problému*

$$\boxed{\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n},$$

kde ψ_n je *vlastní funkce* odpovídající danému vlastnímu číslu A_n. Zde předpokládáme operátor s diskrétním spektrem vlastních čísel. Dále předpokládáme, že vlnové funkce ψ_n tvoří ortonormální bázi příslušného prostoru a že tedy můžeme libovolnou funkci z tohoto prostoru vyjádřit rozvojem

$$\psi = \sum_n c_n\psi_n \ .$$

Střední hodnota veličiny A při mnoha opakovaných měřeních na systému popsaném vlnovou funkcí $\psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)$ je dána vztahem

$$\boxed{\overline{A} = \int_V \psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)^* \hat{A}\psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)\mathrm{d}V}$$

Pravděpodobnosti p_n naměření jednotlivých hodnot A_n jsou dány koeficienty rozvoje vlnové funkce ψ do báze ψ_n

$$p_n = |c_n|^2 \ .$$

4. Postulát o redukci vlnové funkce

> Měření fyzikální veličiny A s výsledkem měření A_n převádí měřený systém do stavu s vlnovou funkcí ψ_n, která je vlastní funkcí operátoru $\hat{A}$ s vlastním číslem A_n.

Podle tohoto postulátu má měření v kvantové mechanice zásadní a neredukovatelný vliv na měřený objekt. Díky redukci vlnové funkce $\psi \to \psi_n$, nelze měřením zjistit, v jakém stavu ψ se systém nacházel před měřením. Stav systému se nemění pouze tehdy, byl-li systém již před měřením v některém z vlastních stavů ψ_n operátoru příslušného měřené veličině. To je rozdíl oproti klasické mechanice, kde předpokládáme, že eventuelní vliv měření lze vždy minimalizovat.

Chceme-li současně měřit několik fyzikálních veličin A, B, C, … na systému popsaném vlnovou funkcí ψ_n musí být tato vlnová funkce vlastní funkcí všech uvažovaných operátorů

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n$$
$$\hat{B}\psi_n = B_n\psi_n$$
$$\hat{C}\psi_n = C_n\psi_n$$

Společný systém vlastních funkcí několika operátorů existuje pouze tehdy, pokud spolu tyto operátory navzájem komutují

$$[\hat{A},\hat{B}] = 0, \qquad [\hat{A},\hat{C}] = 0, \qquad [\hat{B},\hat{C}] = 0, \ \ldots$$

Obráceně, pokud operátory spolu nekomutují, nemají společný systém vlastních funkcí a příslušné veličiny nejsou současně měřitelné.

5. Postulát o časové Schrödingerově rovnici

Je-li v čase $t = t_0$ systém popsán vlnovou funkcí $\psi(\vec{\boldsymbol{r}}, t_0)$, pak jeho následný vývoj je popsán časovou Schrödingerovou rovnicí

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{\boldsymbol{r}}, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\vec{\boldsymbol{r}}, t)$$

Zde $\hat{H}$ tzv. *Hamiltonův operátor* (*hamiltonián*) je operátor celkové energie. Pro částici pohybující se v silovém poli, kterému odpovídá potenciální energie E_p, můžeme psát

$$\hat{H} = \hat{E}_k + \hat{E}_p = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{E}_p$$

Řešení Schrödingerovy rovnice a tedy nalezení vlnové funkce $\psi(\vec{\boldsymbol{r}}, t)$ patří k základním úlohám kvantové mechaniky.
Poznamenejme ještě, že uvedená rovnice je rovnicí nerelativistickou (časová proměnná a prostorové proměnné nejsou v rovnici zastoupeny stejným způsobem).