

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 $Q_1, \dots, Q_n, P_1, \dots, P_n$, 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 $Q_i P_i (= P_i Q_i)$. Podle (90) ovšem odpovídající operátory nekomutují, tj

$$Q_i P_i \neq P_i Q_i$$

Co tedy dosadit za klasický výraz $Q_i P_i$? Postup je takový, že místo $Q_i P_i$ napíšeme symetrický výraz

$$\frac{1}{2} (Q_i P_i + P_i Q_i)$$

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 Q_1, \dots, Q_n přímo souřadnice Q_1, \dots, Q_n a operátory P_1, \dots, P_n určit pak tak, aby byly splněny komutační relace (90). Využijeme-li výsledek (13), je zřejmě možné zobrazit operátory souřadnic a impulsů takto:

Klasická veličina	Operátor	
Q_i	Q_i	$(i=1,2,\dots,n)$ (91)
P_i	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial Q_i}$	

Ostatní operátory pak již hledáme podle návodu, který dává 7. postulát. Volba operátorů (91) vede k tzv souřadnicové reprezentaci kvantové mechaniky. Protože diferenciální operátory mohou působit jen na funkce proměnných Q_1, \dots, Q_n , budou v této reprezentaci stavové vektory reprezentovány vlnovými funkcemi

$$\psi = \psi(Q_1, \dots, Q_n; t) \quad (92)$$

Jestliže volbu obrátíme, tj za operátory impulsů P_1, \dots, P_n zvolíme přímo P_1, \dots, P_n , potom z komutačních relací dostaneme obdobu výrazů (91)

Klasická veličina	Operátor	
P_i	P_i	$(i=1,2,\dots,n)$ (93)
Q_i	$i\hbar \frac{\partial}{\partial P_i}$	

Volba (93) nás přivede k tzv impulsové reprezentaci. Stavové vektory $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ v ní budou reprezentovány funkcemi

$$\psi = \psi(P_1, \dots, P_n; t) \quad (94)$$

Souřadnicová reprezentace

je (především při řešení konkrétních úloh) nejčastěji používanou reprezentací aparátu kvantové mechaniky. Všimneme si jí proto blíže; uvidíme, že nás dovede i ke Schrödingerově rovnici, s níž umíme pracovat již z kap. III.

Pro soustavu tvořenou jednou částicí s polohovým vektorem $\vec{r} = (x, y, z)$ a impulsem $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ (srov. (84)) bude

$$\hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z \quad (95a)$$

takže operátor polohového vektoru

$$\hat{\vec{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \quad \text{bude} \quad \vec{r} = (x, y, z) \quad (95b)$$

Složky vektoru impulsu \vec{p} budou podle (91) reprezentovány operátory

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (96a)$$

a operátor impulsu (vektoru) tudíž bude

$$\hat{\vec{p}} = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (96b)$$

Vzpomeneme-li si na diferenciální operátor ∇ (nabla) (dod.E) , můžeme operátor impulsu (96b) zapsat

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla \quad (96c)$$

Nyní již snadno podle 7.postulátu získáme další operátory v souřadnicové reprezentaci. Tak např

(i) operátor kinetické energie pro jednu částici dostaneme tak, že v (84) nahradíme p_x, p_y, p_z operátory (96):

$$\mathcal{T} = \frac{1}{2m} |\hat{\vec{p}}|^2 = \frac{1}{2m} \hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{p}} = \frac{1}{2m} (-i\hbar)^2 \nabla \cdot \nabla = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (97)$$

kde $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ je tzv Laplaceův operátor (dod.E).

Pro částici pohybující se jen po přímce (zvolíme ji za osu x ; srov. kap.III)

$$\mathcal{T} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (98)$$

(ii) operátor potenciální energie (87) pro jednu částici bude přímo funkce $V(x,y,z)$, tj

$$\mathcal{U} = V(x,y,z) \quad (99)$$

(iii) operátor celkové energie - hamiltonián - pak je

$$\mathcal{H} = \mathcal{T} + \mathcal{U} = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x,y,z;t) \quad (100)$$

Pro jednorozměrný, stacionární případ se redukuje na

$$\mathcal{H} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (101)$$

Stavové vektory $|\psi(t)\rangle$ jsou reprezentovány vlnovou funkcí

$$\psi = \psi(x,y,z;t) \quad (102)$$

Časový vývoj stavu soustavy je podle 6.postulátu určen řešením Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathcal{H} \psi \quad (103a)$$

nebo v rozepsaném tvaru, po dosazení za \mathcal{H}

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[- \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x,y,z;t) \right] \psi \quad (103b)$$

Vidíme, že skutečně získáváme Schrödingerovu rovnici (na níž byla zbudována Schrödingerova vlnová mechanika; srov. kap. III) pouze jako dílčí výsledek z obecného formalismu kvantové teorie.

Pro úplnost si ještě uveďme hamiltonián pro částici v elektromagnetickém poli. Zde se situace poněkud komplikuje tím, že magnetické pole není potenciální (nelze ho popsat jen skalárním potenciálem U), takže potenciální energie částice nejde zapsat v jednoduchém tvaru (87).

V klasické elektrodynamice se dokazuje, že klasická Hamiltonova funkce pro částici s nábojem q v elektromagnetickém poli je

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{2m} [\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}, t)]^2 + qU(\vec{r}, t) \quad (104)$$

kde $U(\vec{r}, t)$ je skalární potenciál elektrického pole,

$\vec{A}(\vec{r}, t)$ je tzv. vektorový potenciál magnetického pole a

$$\vec{p} = m \frac{d\vec{r}}{dt} + q\vec{A}(\vec{r}, t) = m\vec{v} + q\vec{A}(\vec{r}, t) \quad (105)$$

je zobecněný impuls (kanonicky sdružený s \vec{r}).

Při přechodu ke kvantověmechanickému operátoru musíme nahradit tento zobecněný impuls \vec{p} operátorem impulsu \vec{P} , nikoliv mechanický impuls

$\vec{p} = m d\vec{r}/dt = m\vec{v}$! Skutečnost, že dvojice Q_i, P_i jsou kanonicky sdružené měla být, přesně vzato, uvedena v 7. postulátu, neboť právě těchto dvojic se týkají komutační relace (90).

Kvantověmechanický hamiltonián \mathcal{H} získáme z (104)

$$\mathcal{H}(\vec{R}, \vec{P}) = \frac{1}{2m} [\vec{P} - q\vec{A}(\vec{R}, t)]^2 + V(\vec{R}, t) \quad (105)$$

kde $V(\vec{R}, t) = q U(\vec{R}, t)$,

\vec{R} je operátor polohového vektoru a

\vec{P} je operátor zobecněného impulsu (105).

Pro operátory $\vec{R} = (X, Y, Z)$, $\vec{P} = (P_x, P_y, P_z)$ platí komutační relace (90)

$$[X, P_x] = i\hbar, \quad [Y, P_y] = i\hbar, \quad [Z, P_z] = i\hbar, \quad (106)$$

všechny zbývající komutátory jsou rovny nule. V souřadnicové reprezentaci přejde (105) v

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} [-i\hbar \nabla - q\vec{A}(\vec{r}, t)]^2 + V(\vec{r}, t) \quad (107)$$

a Schrödingerova rovnice je

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - q\vec{A}(\vec{r}, t))^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \quad (108)$$

Na pravé straně této rovnice znamená $(-i\hbar \nabla - q\vec{A})^2 \psi$ toto:

$$(-i\hbar\nabla - q\vec{A})(-i\hbar\nabla - q\vec{A})\psi(\vec{r},t) =$$

$$= -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + iq\hbar \left[A_x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (A_x \psi) \right] + q^2 A_x^2 \psi +$$

+ [další dva výrazy, které se získají z tohoto záměnou x za y a za z].
Musíme totiž brát v úvahu, že složky operátoru ∇ a operátoru $\vec{A}(\vec{r},t)$ obecně nekomutují.

3.2) Střední hodnota

Závěry, které vyplývají z úvodních postulátů, mají pravděpodobnostní charakter. Abychom je ověřili, musíme provést velký počet měření, při naprosto identických podmínkách. Jinak řečeno, měli bychom měřit tutéž veličinu na velkém počtu soustav, které jsou v téže kvantovém stavu (přísluší jim stejný ket-vektor $|\psi\rangle$).

Uvažujme tedy scubor tvořený N identickými soustavami, přičemž všechny jsou v nějakém normalizovaném kvantovém stavu $|\psi\rangle$. Představme si dále, že v téže časovém okamžiku, provedeme na všech těchto soustavách měření nějaké veličiny A (např. celkové energie). Podle 3. postulátu může být výsledkem každého z N provedených měření pouze některá z vlastních hodnot a_1, a_2, \dots operátoru \hat{A} , který zobrazuje měřenou veličinu A . Nechť jsme

N_1 -krát naměřili hodnotu a_1

N_2 -krát " " a_2

\vdots \vdots \vdots \vdots

N_i -krát " " a_i

\vdots \vdots \vdots \vdots

přičemž musí být

$$N_1 + N_2 + \dots + N_i + \dots = N \quad (= \text{celkový počet})$$

Aritmetický střed \bar{A} z výsledků měření vypočteme běžným způsobem

$$\bar{A} = \frac{N_1 a_1 + N_2 a_2 + \dots + N_i a_i + \dots}{N} =$$

$$= \frac{N_1}{N} a_1 + \frac{N_2}{N} a_2 + \dots + \frac{N_i}{N} a_i + \dots \quad (110)$$

Pro velký počet měření ($N \rightarrow \infty$) se poměr N_n/N ($n=1,2,\dots$) blíží pravděpodobnosti naměření hodnoty a_n , tj.

$$P(a_n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_n}{N} \quad (111)$$

Podle 4. postulátu je však tato pravděpodobnost rovna výrazu (73)

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

takže pro $N \rightarrow \infty$ můžeme střední hodnotu $\langle A \rangle$ z měřené veličiny A , zapsat takto

$$\langle A \rangle = \sum_n P(a_n) a_n = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | u_n^{(i)} \rangle \langle u_n^{(i)} | \psi \rangle a_n \quad (112)$$

Protože (a_n je reálné číslo)

$$\langle \psi | u_n^{(i)} \rangle a_n = \langle \psi | a_n | u_n^{(i)} \rangle \quad \text{a podle (72)}$$

$$\mathcal{A} | u_n^{(i)} \rangle = a_n | u_n^{(i)} \rangle \quad (i=1,2,\dots,g_n),$$

můžeme (112) přepsat

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | \mathcal{A} | u_n^{(i)} \rangle \langle u_n^{(i)} | \psi \rangle = \\ &= \langle \psi | \mathcal{A} \left(\sum_n \sum_{i=1}^{g_n} | u_n^{(i)} \rangle \langle u_n^{(i)} | \right) | \psi \rangle \end{aligned}$$

Výraz v závorkách je roven jednotkovému operátoru (viz podmínky úplnosti (50)), takže konečně dostáváme pro střední hodnotu z velkého počtu měření veličiny A výraz

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \mathcal{A} | \psi \rangle \quad (113a)$$

Pro nenormalizovaný stav $|\psi\rangle$ je třeba (113a) ještě dělit normou, takže

$$\boxed{\langle A \rangle = \frac{\langle \psi | \mathcal{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}} \quad (113b)$$

Poznamenejme, že se někdy formule (113), pro střední hodnotu $\langle A \rangle$, postuluje místo námi uvedeného 4. postulátu. Fyzikální interpretace koeficientů rozvoje podle úplného souboru stavových vektorů (která byla obsahem 4. postulátu) se pak naopak získá jako důsledek, který z tohoto postulátu vyplyne.

3.3) Současná měřitelnost a úplný soubor kvantových čísel

Položme si nyní otázku, která se nikdy neobjevila v klasické mechanice, ale podle toho co již víme, má zřejmě zásadní význam v kvantové mechanice: za jakých podmínek je možné současně stanovit přesné numerické hodnoty dvou různých měřitelných veličin? Vyjádřeno z hlediska realizace experimentu: měření 1. veličiny, řekněme A , převede podle

5. postulátu soustavu do určitého stavu, v němž má A hodnotu, řekněme, a_i (jedna z vlastních hodnot \mathcal{A}). Jestliže nyní provedeme na soustavě měření druhé veličiny B , bude soustava ve stavu, v němž má B naměřenou hodnotu, kterou označíme b_j (jedna z vlastních hodnot \mathcal{B}). Otázka nyní zní: když budeme nyní na soustavě měřit znovu veličinu A , dostaneme opět hodnotu a_i ? Jestliže ano, budeme říkat, že veličiny A, B jsou současně měřitelné.

Podívejme se nyní na tento problém z hlediska matematického formalismu kvantové mechaniky. Nechť operátory \mathcal{A}, \mathcal{B} (zobrazující veličiny A, B) mají ve stavu, který vedl k naměřením hodnot a_i, b_j společný vlastní stavový vektor $|a_i, b_j\rangle$, takže platí

$$\mathcal{A}|a_i, b_j\rangle = a_i|a_i, b_j\rangle, \quad \mathcal{B}|a_i, b_j\rangle = b_j|a_i, b_j\rangle \quad (114)$$

Rozlišování vlastních vektorů pomocí odpovídajících vlastních hodnot, které jsme zde použili, je v kvantové mechanice běžné. Zpravidla se ovšem nevypisují celé vlastní hodnoty, ale opět jen nějaké veličiny - kvantová čísla - které je rozlišují. Tak místo $|a_i, b_j\rangle$ by se mohlo psát $|i, j\rangle$ s tím, že kvantové číslo na 1. pozici (zde "i") přísluší vlastní hodnotě \mathcal{A} a číslo na 2. pozici (zde "j") pak vlastní hodnotě \mathcal{B} .

Fyzikální smysl rovnic (114) je následující: jestliže se soustava v daném časovém okamžiku nachází ve stavu $|a_i, b_j\rangle$, potom měření veličin A, B dá určitě hodnoty a_i, b_j . Nutnou podmínkou pro současnou platnost obou rovnic (114) je

$$(\mathcal{A}\mathcal{B} - \mathcal{B}\mathcal{A})|a_i, b_j\rangle = [\mathcal{A}, \mathcal{B}]|a_i, b_j\rangle = 0 \quad (115)$$

což znamená, že $|a_i, b_j\rangle$ je vlastním vektorem operátoru $[\mathcal{A}, \mathcal{B}]$ a přísluší mu vlastní hodnota 0.

Z druhé strany, rovnice (115) je automaticky splněna, jestliže operátory \mathcal{A}, \mathcal{B} komutují. V tomto případě platí důležitá věta:

Jestliže dva operátory komutují, potom lze pro ně najít společný úplný soubor ortonormálních vlastních vektorů.

Platí i věta obrácená:

Mají-li dva operátory společný úplný soubor vlastních vektorů, potom komutují.

Obě věty lze poměrně snadno dokázat, jestliže všechny vlastní hodnoty obou operátorů jsou nedegenerované; v opačném případě je rozbor a důkaz komplikovanější. Nebudeme důkazy provádět (viz např. [11], [13]), ale všimneme si fyzikálních důsledků, které z vět plynou.

Mějme operátor \mathcal{A} , zobrazující nějakou veličinu, kterou je možné na dané soustavě změřit. Víme již, že množina jeho vlastních vektorů tvoří úplný soubor, který můžeme použít za bázi v prostoru stavových vektorů \mathcal{E} . Obecně však výběr vlastních vektorů není jednoznačný;

vzpomeňme si, že výběr ortonormálních vektorů v podprostoru \mathcal{E}_n , spojeném s degenerovanou vlastní hodnotou a_n (obr.45), nebyl jednoznačně určen.

Mějme nyní druhou měřitelnou veličinu B , zobrazenou operátorem \mathcal{B} , který komutuje s \mathcal{A} . Může se nyní stát, že společný soubor vlastních vektorů (jehož existence plyne z výše uvedené věty) už bude jediný. Ne každý vlastní vektor $|a_n\rangle$ z těch, které patřily k degenerované vlastní hodnotě a_n , musí být též vlastním vektorem \mathcal{B} . Z uvedené věty však plyne, že v podprostoru \mathcal{E}_n lze vždy vybrat takové ortonormální vektory, které budou též vlastními vektory \mathcal{B} . Sestrojujeme-li tedy společný systém ortonormálních vlastních vektorů pro komutující operátory \mathcal{A}, \mathcal{B} - rozlišujeme je nyní dvěma vlastními hodnotami: a_i, b_j - může přiřazení operátoru \mathcal{B} omezit možnosti výběru těchto vektorů v podprostorech, které příslušely k degenerovaným vlastním hodnotám operátoru \mathcal{A} .

Jestliže je soubor vlastních vektorů dvou komutujících operátorů \mathcal{A}, \mathcal{B} již určen jednoznačně, potom říkáme, že operátory \mathcal{A}, \mathcal{B} tvoří úplný soubor komutujících operátorů.

Jestliže \mathcal{A}, \mathcal{B} ještě nemají jednoznačně určený společný úplný soubor ortonormálních vlastních vektorů, musíme přibrat další operátor \mathcal{C} , který komutuje s \mathcal{A} i \mathcal{B} a znovu konstruovat společný soubor vlastních vektorů $|a_i, b_j, c_k\rangle$ pro trojici $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}$. Tuto proceduru (přibírání dalších komutujících operátorů) budeme opakovat tak dlouho, až společný soubor vlastních vektorů bude určen jednoznačně.

Obecně se říká, že

hermitovské operátory $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}, \dots, \mathcal{L}$ tvoří úplný soubor komutujících operátorů, jestliže mají společný soubor ortonormálních vlastních vektorů a tento soubor je jediný.

Měřitelné veličiny reprezentované úplným souborem komutujících operátorů tvoří úplný soubor současně měřitelných veličin.

Provedeme-li současně změření těchto veličin, potom stav soustavy bude jednoznačně určen stavovým vektorem $|a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle$, kde $a_i, b_j, c_k, \dots, l_m$ jsou naměřené vlastní hodnoty operátorů $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}, \dots, \mathcal{L}$ (tj naměřené hodnoty veličin A, B, C, \dots, L). Pro tento vektor platí

$$\begin{aligned} \mathcal{A} |a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle &= a_i |a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle \\ \mathcal{B} |a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle &= b_j |a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle \\ \mathcal{C} |a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle &= c_k |a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle \\ &\vdots \\ \mathcal{L} |a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle &= l_m |a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle \end{aligned} \quad (115)$$

Protože v tomto případě existuje jediný stavový vektor, který má tuto vlastnost, je stav soustavy plně určen kvantovými čísly $a_i, b_j, c_k, \dots, l_m$; říká se, že kvantová čísla tvoří úplný soubor kvantových čísel. Tak např. při řešení problému elektronu v atomu vodíku uvidíme, že existují 4 veličiny, které lze u elektronu současně naměřit: celková energie E , velikost momentu hybnosti $|\vec{L}|$, průmět tohoto momentu hybnosti do nějaké osy (zpravidla se bere osa Oz) L_z a průmět spinu (vlastního momentu hybnosti) do zvolené osy S_z . Odpovídající operátory \mathcal{H} (hamiltonián), $|\mathcal{L}|$, \mathcal{L}_z , \mathcal{S}_z skutečně komutují a jejich vlastní hodnoty - E_n, l, m_l, m_s - plně určují stavové vektory $|n, l, m_l, m_s\rangle$ pro elektron v atomu vodíku (všimněte si, že místo E_n používáme při rozlišování vektorů jen "hlavní" kvantové číslo n , které ovšem jednoznačně určuje E_n).

Problém určení úplného souboru současně měřitelných veličin pro danou kvantovou soustavu, má principiální význam: určuje totiž maximální informaci, kterou o nějaké fyzikální soustavě v mikrosvětě můžeme získat.