

Kapitola 2

Základní postuláty kvantové mechaniky

Interpretace experimentálních poznatků, které v první čtvrtině 20. století přispěly ke vzniku kvantové teorie, vyústily v poznání, že formulace nové teorie pro popis vlastností a chování mikroskopických částic se neobejde bez matematického aparátu podstatně odlišného od aparátu klasické mechaniky. Tato skutečnost se dotýká již tak základních otázek, jakými jsou popis stavů studovaných systémů či reprezentace jednotlivých fyzikálních veličin.

V zájmu snadnějšího porozumění zvláštnostem aparátu kvantové mechaniky se nejprve omezíme na **popis chování jediné částice** a později (v kapitole 8) zobecníme výklad i na vícečásticové systémy.

Při budování matematického aparátu kvantové mechaniky se nebudeme držet historického vývoje, ale ani nebudeme postupovat fenomenologicky, tedy vyvozovat závěry na základě experimentálních poznatků, jak se to obvykle dělá např. v elektřině či termodynamice. Kvantovou mechaniku si představíme jako logickou strukturu vycházející z několika málo postulátů, ze kterých lze dále odvozovat experimentálně ověřitelné důsledky. Protože tyto důsledky byly často velmi překvapivé a odlišné od chování objektů běžných rozměrů, stala se kvantová fyzika jednou z nejdůkladněji experimentálně prověřených částí fyziky a dalším a dalším testům neustále odolává.

2.1 Popis stavu částice

2.2 Popis stavu částice

Jak již bylo řečeno, naším systémem bude prozatím jen **jedna částice** nacházející se v prostoru (nebo nějaké jeho části). Na tuto částici mohou působit různé síly, přičemž toto působení budeme popisovat podobně jako v teoretické mechanice pomocí potenciálu, resp. potenciální energie, kterou částice v jednotlivých částech prostoru má.

Úkol 2.1 V klasické fyzice jsme částici se zanedbatelnými rozměry nazvali hmotným bodem. Jaké údaje musíme znát/zadat, aby byl jednoznačně popsán stav jednoho hmotného bodu, který se pohybuje v našem běžném prostoru, kde na něj mohou působit síly? Předpokládejte, že působení sil známe, tj. není součástí popisu stavu hmotného bodu.

Jak by se situace změnila, pokud bychom uvažovali pouze jednorozměrný nebo dvou-
rozměrný pohyb hmotného bodu?

2.2.1 Vlnová funkce

Při vzniku kvantové mechaniky se ukázalo, že klasický způsob popisu stavu nelze převzít ani za předpokladu, že by pohyb částice určovaly odlišné pohybové zákony pro určení časových závislostí $\vec{r}(t)$ a $\vec{p}(t)$. Překážkou se stal překvapivý fakt, že polohu \vec{r} a hybnost \vec{p} částice nelze současně přesně určit (viz podkapitola Relace neurčitosti 2.4.2). Poznatky o nezvyklých charakteristikách mikrosvěta – kvantování fyzikálních veličin, statistické povaze některých výroků či vlnové povaze částic – nakonec vyústily do nového způsobu popisu stavu částice pomocí „speciální“, tzv. vlnové funkce:

Postulát o popisu kvantového stavu (1. část)

Stav částice v časovém okamžiku t je v kvantové mechanice *úplně* popsán *komplexní* funkcí $\psi(\vec{r}, t)$, která má reálné proměnné: souřadnice \vec{r} a čas t . Tato funkce musí být *spojitá* a musí mít *spojité první parciální derivace* podle všech prostorových souřadnic. Funkce $\psi(\vec{r}, t)$ se nazývá **vlnová funkce**.

Úkol 2.2 Kolik je tedy nutné zadat „čísel“, aby byl v kvantové mechanice úplně popsán stav jedné částice v daném okamžiku?

Okomentujme ještě některá konkrétní slova ve znění uvedeného postulátu, abychom vyjasnili, co přesně znamenají a proč je nelze vynechat:

1. Tvrzení, že ψ **úplně** popisuje stav částice znamená, že z vlnové funkce ψ je možné pomocí jednoznačného algoritmu vypočítat libovolnou, v daném stavu experimentálně určitelnou fyzikální veličinu. Jinými slovy, pokud znám ψ v daném čase, vím o částici úplně v tomto okamžiku vše.¹
2. Vlnová funkce ψ je obecně **komplexní** funkcí. To znamená, že i když má reálné proměnné \vec{r} a t , sama nabývá komplexních hodnot.² To neznamená, že nemůže být reálná, v mnoha úlohách si „vystačíme“ s reálnými funkcemi. V podkapitole 2.5.3 ale uvidíme, že komplexní čísla jsou v kvantové fyzice, na rozdíl od jiných částí fyziky, nezbytná a omezení se na reálné vlnové funkce by nám neumožnilo popsat vývoj v čase.

Možná namítáte, že jste komplexní čísla používali již v elektřině či optice. To je pravda, ale zde se používají jen jako „pomůcka pro zjednodušení výpočtů“. Je jednodušší pracovat s komplexními exponenciálami, než s goniometrickými funkcemi. Vše, co jste v elektřině či optice dělali, se dá odvodit i bez komplexních čísel, jen trochu pracněji. Případně vás napadlo, že by se dalo komplexním číslům vyhnout tak, že místo jedné komplexní vlnové funkce budeme pracovat se dvěma reálnými funkcemi odpovídajícími její reálné a imaginární části a veškeré rovnice přepíšeme pomocí nich. To je možné, ale rovnice budou výrazně komplikovanější, protože kromě samotných funkcí jsou komplexní i koeficienty jejich kombinací. Nebo je možné při formulaci postulátů místo vlnové funkce použít reálnou hustotu pravděpodobnosti, se kterou se seznámíme v následující části. Ve všech těchto přístupech ale neplatí princip superpozice (viz podkapitola 2.2.3), což je považováno za „příliš velkou daň“ za odstranění komplexních čísel.

3. Požadavky na **spojitost funkce ψ a spojitost jejich prvních parciálních derivací** podle prostorových souřadnic jsou neoddelitelnou součástí postulátu a nelze je vynechat. V konkrétních úlohách (viz kapitola 3) uvidíme, že právě tyto dva požadavky zapříčiňují, že některé fyzikální veličiny jsou v určitých případech kvantovány, tj. nemohou nabývat libovolných hodnot (příkladem je třeba energie elektronu v atomu).

¹V kapitole 2.5 uvidíme, že je jednoznačně určen i budoucí vývoj systému, pokud nebude systém nijak ovlivňován, např. měřením.

²Na komplexní funkci ψ lze také nahlížet jako na dvě samostatné reálné funkce – funkci ψ_{Re} pro reálnou část a funkci ψ_{Im} pro imaginární část – pro které platí $\psi = \psi_{\text{Re}} + i\psi_{\text{Im}}$.

Úkol 2.3 Podle výše uvedené první verze postulátu o popisu stavu rozhodněte, které z následujících funkcí mohou být vlnovými funkcemi. Uvažujme pouze pouze částici, která se „pohybuje“ podél přímky (tj. jednorozměrný případ, na intervalu $(-\infty, +\infty)$) a funkce jsou zapsány v nějakém konkrétním čase, např. $t = 0$:

- | | | |
|---------------------------|--|-------------------------|
| a) $\psi_1 = Ax,$ | b) $\psi_2 = Ax^2,$ | c) $\psi_3 = Ae^{-x},$ |
| d) $\psi_4 = Ae^{- x },$ | e) $\psi_5 = Ae^{-x^2},$ | f) $\psi_6 = A \cos x,$ |
| g) $\psi_7 = A \sin x ,$ | h) $\psi_8 = A(a^2 - x^2)$ pro $ x < a$ a jinak $\psi_8 = 0.$ | |

2.2.2 Statistická interpretace vlnové funkce

Jak jsme se dozvěděli v předchozím oddíle, vlnová funkce ψ slouží k úplnému popisu stavu částice. Ukazuje se ale, že hodnoty ψ **nemají konkrétní fyzikální význam**, podobně jako je tomu například v případě Lagrangeovy funkce v teoretické mechanice. Protože ale nějaké napojení na „realitu“ potřebujeme, zavedeme tzv. Bohrovu kodaňskou interpretaci (nazývanou také statistická interpretace), která byla odvozena z experimentálních pozorování.

Bornova (statistická) interpretace: Pokud si vezmeme nějakou část prostoru, kterou označíme jako V , potom pravděpodobnost P_V nalezení částice v této části prostoru lze spočítat jako

$$P_V = \int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV. \quad (2.1)$$

Odtud je vidět, že z vlnové funkce odvozená veličina

$$\rho(\vec{r}, t) \stackrel{\text{def.}}{=} |\psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (2.2)$$

má význam *hustoty pravděpodobnosti nalezení částice* v daném místě a čase. Výraz

$$dP = \rho(\vec{r}, t) dV = |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV \quad (2.3)$$

je pravděpodobnost, že by částice byla měřením zjištěna ve velmi malém objemu dV v okolí bodu \vec{r} . V souvislosti s (2.2) se vlnové funkci též někdy říká *amplituda pravděpodobnosti*³.

³Porovnejte názvosloví s optikou, kdy námi vnímaná intenzita světla I je úměrná druhé mocnině amplitudy elektrické intenzity daného pole.

Terminologická poznámka: Funkce $\rho(\vec{r}, t)$ se také někdy nazývá *hustota pravděpodobnosti výskytu částice*, což není úplně přesné, protože kvantová mechanika neumí odpovědět na otázku, kde částice v daném okamžiku je. Dokáže říci jen s jakou pravděpodobností (v daném časovém okamžiku) najdeme částici, pokud ji budeme hledat (měřit její polohu) v námi vymezené části prostoru. Podobně je to i s ostatními fyzikálními veličinami. Z výpočtu dostaneme možné výsledky měření a ke každému z nich pravděpodobnost, že bude naměřen zrovna on.

Na základě předchozích vzorců je přirozené požadovat, aby pravděpodobnost, že se částice nachází kdekoliv v prostoru, byla rovna jedné, tj. že máme jistotu, že částici někde v prostoru najdu. To lze matematicky zapsat jako podmínku

$$\int_{c.p.} |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1, \quad (2.4)$$

kde zkratka *c.p.* u integračního symbolu znamená integraci přes celý prostor. Vztahu (2.4) se říká *normovací podmínka* a vlnové funkce, které ji splňují, nazýváme *normované vlnové funkce*.

Úkol 2.4 Z normovací podmínky 2.4 lze zjistit fyzikální rozměr vlnové funkce ψ . Zkuste to.

Úkol 2.5 Zkuste formulovat nějaké jednoduše ověřitelné vlastnosti funkce ψ , které budou jasně ukazovat, že daná funkce určitě normovat nepůjde. Pomoci vám může, pokud se vrátíte k úkolu 2.3 a rozhodnete, pro které funkce vhodná normovací konstanta A bude existovat.

Výpočtová úloha 2.1

Nalezněte konstanty $A, B \in \mathbb{C}$ tak, aby byly následující vlnové funkce normované:

1. $\psi_A = Ae^{-\alpha x^2}$ pro $x, \alpha \in \mathbb{R}$
2. $\psi_B = B(a^2 - x^2)$ pro $|x| < a$, jinak $\psi_B = 0$

Řešení:

1. Zadanou vlnovou funkci dosadíme do normovací podmínky:

$$\int_{c.p.} |\psi_A|^2 dV = \int_{c.p.} \psi_A^* \psi_A dV = \int_{-\infty}^{\infty} A^* e^{-\alpha x^2} A e^{-\alpha x^2} dx = 1.$$

Konstantu A i její komplexní sdružení můžeme vytknout před integrál, čímž zde získáme druhou mocninu velikosti komplexního čísla A :

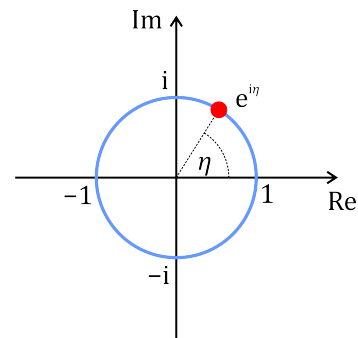
$$|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = 1.$$

Integrál, který jsme dostali, se označuje jako *Gaussův-Poissonův integrál* a platí pro něj $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-cx^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{c}}$, kde $c \in \mathbb{R}$. V našem případě je $c = 2\alpha$, čímž dostáváme:

$$|A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} = 1 \quad \Rightarrow \quad |A| = \sqrt[4]{\frac{2\alpha}{\pi}}.$$

Protože A je obecně komplexní číslo, je právě odvozená podmínka pro $|A|$ splněna pro všechna komplexní čísla, která leží v Gaussově rovině na kružnici s tímto poloměrem. Tato čísla můžeme zapsat v exponenciálním tvaru jako:

$$A = \sqrt[4]{\frac{2\alpha}{\pi}} e^{i\eta}, \eta \in \mathbb{R}.$$



2. Zcela analogicky budeme postupovat v případě vlnové funkce ψ_B . Musíme si dát pozor na to, že tato funkce je definována různými vztahy ve třech intervalech. Normovací podmínka proto vypadá následovně:

$$\begin{aligned} \int_{c.p.} |\psi_B|^2 dV &= \int_{c.p.} \psi_B^* \psi_B dV = \\ &= \int_{-\infty}^{-a} 0 \cdot 0 dx + \int_{-a}^a B^*(a^2 - x^2) B(a^2 - x^2) dx + \int_a^{\infty} 0 \cdot 0 dx = 1. \end{aligned}$$

I zde získáme vytknutím B a B^* před integrál druhou mocninu velikosti komplexního čísla B :

$$|B|^2 \int_{-a}^a (a^2 - x^2)^2 dx = 1.$$

Roznásobením a jednoduchou integrací získáváme:

$$|B|^2 \left[xa^4 - \frac{2}{3} a^2 x^3 + \frac{1}{5} x^5 \right]_{-a}^a = 1.$$

Následnými úpravami pak dostáváme:

$$|B|^2 \left(a^5 - \frac{2}{3}a^5 + \frac{1}{5}a^5 + a^5 - \frac{2}{3}a^5 + \frac{1}{5}a^5 \right) = 1.$$

$$|B|^2 \frac{16}{15}a^5 = 1 \Rightarrow |B| = \sqrt{\frac{15}{16a^5}}.$$

Stejně jako v předcházejícím případě je řešením množina komplexních čísel, jež v Gaussově rovině leží na kružnici a mají tvar:

$$B = \sqrt{\frac{15}{16a^5}} e^{i\eta}, \eta \in \mathbb{R}.$$

Výsledky předchozí úlohy můžeme zobecnit – normovací konstanta není určena jednoznačně, protože normovací podmínka nám dává vztah jen pro její velikost. Vlnovou funkci tedy můžeme vynásobit libovolným komplexním číslem o velikosti 1, tj. číslem ve tvaru $e^{i\varphi}$, kde $\varphi \in \mathbb{R}$; tomuto číslu se říká fáze. Na druhou stranu, pokud k tomu nejsou nějaké speciální důvody, volí se normovací konstanta co nejjednodušší, tj. reálná kladná.

2.2.3 Princip superpozice stavů

Úkol 2.6 Co se vám vybaví, když se řekne princip superpozice?

V kvantové mechanice se ukázalo (především rozбором experimentů dokládajících vlnovou povahu částic), že je třeba skládat vlnové funkce (amplitudy pravděpodobnosti), nikoliv hustoty pravděpodobnosti nalezení částice. Toto je obsahem tzv. *principu superpozice stavů*:

Princip superpozice stavů

Jestliže se kvantový systém může nacházet ve stavu popsaném vlnovou funkcí ψ_1 a jestliže se také může nacházet ve stavu popsaném vlnovou funkcí ψ_2 , potom je principiálně realizovatelný i každý stav, jehož vlnová funkce ψ má tvar

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2, \quad (2.5)$$

kde c_1 a c_2 jsou libovolná komplexní čísla.

Princip superpozice velmi podstatně ovlivňuje základní rysy matematického aparátu kvantové mechaniky, protože nám naznačuje, že množina všech možných vlnových funkcí ψ

popisujících všechny stavy zvoleného kvantového systému by mohla být z matematického hlediska lineárním (vektorovým) prostorem. K tomu je ale zapotřebí ještě vyjasnit dvě věci.

1. Každý lineární prostor musí obsahovat nulový prvek, který v našem případě odpovídá konstantně nulové funkci $\psi(\vec{r}, t) \equiv 0$. Pokud vezmeme v úvahu pravděpodobnostní interpretaci, tak této vlnové funkci neodpovídá žádný reálný stav – pravděpodobnost nalezení částice v libovolném podprostoru, ale i v celém prostoru je nulová. Přesto si tuto funkci do množiny vlnových funkcí přidáme, abychom mohli používat matematický aparát lineárních prostorů, a budeme mít na paměti, že pokud bude výsledkem řešené úlohy pouze tato funkce, znamená to, že úloha žádné fyzikálně realizovatelné řešení nemá.
2. Lineární kombinace vlnových funkcí tak, jak je uvedena ve vztahu 2.5, nemusí splňovat normovací podmínku. Také se na to můžeme dívat tak, že lineární prostor musí obsahovat všechny násobky každého svého prvku, tedy i ty, které normovací podmínku nesplňují. Protože celá teorie, kterou budujeme, je lineární, „přizveme“ do množiny všech vlnových funkcí i funkce, které normovací podmínku 2.4 nesplňují, s tím, že:
 - Vlnová funkce ψ a její libovolný násobek $\lambda\psi$, kde λ je libovolné nenulové komplexní číslo, popisují tentýž stav. V analogii s vektorovými prostory lze říci, že konkrétní stav je popsán celým „paprskem“ vlnových funkcí.
 - Mezi všemi funkcemi tvaru $\lambda\psi$ popisujícími tentýž stav musí být možné (stanovením vhodné hodnoty parametru λ) vybrat normovanou vlnovou funkci. Požadavek na normovanost vlnové funkce tedy zmírňujeme na požadavek **normovatelnosti**.
3. Je třeba ale mít na paměti, že pokud chceme z výpočtů dělat nějaké závěry o pravděpodobnostech, měřených veličinách, jejich středních hodnotách apod., je třeba pracovat s normovanými vlnovými funkcemi, nebo výsledek dodatečně „donormovat“.

Pokud tedy přijmeme výše uvedené návrhy, pak všechny vlnové funkce popisující přípustné fyzikální stavy částice společně s konstantně nulovou funkcí tvoří lineární (vektorový) prostor.

2.2.4 Skalární součin vlnových funkcí

Výraz na levé straně normovací podmínky (2.4) lze chápat tak, že určuje nejenom, zda je funkce normovaná („jednotková“), ale i jako výraz určující „velikost“ vlnové funkce, tj. normu prvku lineárního prostoru. Tato norma je odvozena od skalárního součinu $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$

funkcí ψ_1 a ψ_2 definovaného předpisem

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int_{c.p.} \psi_1^* \psi_2 \, dV. \quad (2.6)$$

Úkol 2.7 Ověřte, že skalární součin definovaný vztahem 2.6 splňuje všechny vlastnosti uvedené v obecné definici skalárního součinu, kterou znáte z lineární algebry. Podle ní je skalární součin definován jako symetrická pozitivně definitní bilineární forma.

Úkol 2.8 Pomocí vlastností skalárního součinu zjednodušte $\langle c_1\psi_1 + c_2\psi_2 | \psi \rangle$.

Předchozí dva úkoly nám ukázaly, že skutečnost, že pracujeme v lineárním prostoru nad tělesem komplexních čísel (a nikoli nad tělesem reálných čísel), s sebou přináší dvě drobné změny.

- Pokud je nějakým číslem vynásobena **první složka**, potom „před skalární součin vytýkáme“ toto **číslo komplexně sdružené**

$$\langle c\psi_1 | \psi_2 \rangle = c^* \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle.$$

- **Symetrie skalárního součinu** znamená, že můžeme napsat jeho složky i v obráceném pořadí, ale tentokrát nedostaneme úplně stejný výsledek, jako v případě práce nad tělesem reálných čísel \mathbb{R} , ale výsledek **komplexně sdružený**

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^*.$$

Vraťme se znovu k otázce normování vlnových funkcí. Pomocí skalárního součinu lze zapsat **normovací podmínku** (2.4) ve tvaru

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (2.7)$$

a chápat ji jako podmínku „jednotkovosti“ funkce. V dalším výkladu se přesvědčíme, že většina rovnic kvantové mechaniky určuje své řešení až na libovolný násobek, tj. jedná se obvykle o homogenní rovnice či jejich soustavy. Jestliže je funkce ψ řešením, potom i funkce $\lambda\psi$, kde $\lambda \neq 0$, je také řešením. Z úvah týkajících se principu superpozice ale vyplynulo, že všechna tato řešení odpovídají témuž stavu, takže uvedená nejednoznačnost řešení rovnic není podstatná.

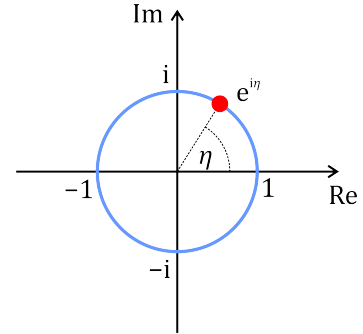
Jestliže tedy získáme výpočtem pro popis určitého stavu částice nenormovanou vlnovou funkci ψ_{nenorm} , je třeba najít takovou konstantu λ (tzv. *normovací konstanta*), aby funkce $\psi_{norm} = \lambda\psi_{nenorm}$ popisující tentýž stav normovací podmínku splňovala

$$1 = \langle \psi_{norm} | \psi_{norm} \rangle = \lambda^* \lambda \langle \psi_{nenorm} | \psi_{nenorm} \rangle,$$

takže pro λ platí:

$$|\lambda|^2 = \frac{1}{\langle \psi_{nenorm} | \psi_{nenorm} \rangle}$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{1}{\sqrt{\langle \psi_{nenorm} | \psi_{nenorm} \rangle}} e^{i\eta}, \text{ kde } \eta \in \mathbb{R}.$$



S touto nejednoznačností jsme se již potkali při řešení úlohy 2.1, takže již víme, že výraz $e^{i\eta}$ představuje komplexní jedničku⁴ a je fyzikálně nepodstatný (např. se nijak neprojeví v hustotě pravděpodobnosti nalezení částice – viz vztah 2.2). Díky tomu se (bez újmy na obecnost) většinou volí η tak, aby λ byla kladné reálné číslo:

$$\lambda = \left| \frac{1}{\langle \psi_{nenorm} | \psi_{nenorm} \rangle^{1/2}} \right|.$$

Právě popsaná procedura vedoucí od ψ_{nenorm} k ψ_{norm} se nazývá *normování vlnové funkce*.

Skalární součin lze také využít k definici ortogonalit (kolmosti) dvou vlnových funkcí. *Ortogonalními* (navzájem kolnými⁵) nazveme vlnové funkce ψ_1, ψ_2 takové, že:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0. \quad (2.8)$$

Ortogonalní vlnové funkce ψ_1 a ψ_2 , které jsou navíc obě normované, tj. pro něž platí $\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = 1$, nazýváme *ortonormálními funkcemi*.

Výpočtová úloha 2.2

Určete, za jakých podmínek je lineární kombinace $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ dvou normovaných vlnových funkcí ψ_1 a ψ_2 také normovaná ($c_1, c_2 \in \mathbb{C}$).

⁴Komplexní jedničky $e^{i\eta}$ leží v Gaussově rovině na kružnici o poloměru 1, mají velikost 1 a hodnota η určuje úhel (v radiánech) měřený od reálné osy.

⁵Pokud máte problém s tím, že si neumíte představit dvě funkce na sebe navzájem kolmé, je asi nevhodnější zaujmout pragmatický postoj s tím, že jsou to takové funkce, pro které platí rovnice 2.8, a to pojmenování brát jenom jako analogii k vektorům. Funkce jsou zde prvky vektorového prostoru a tak pro ně lze použít vše, co v těchto prostorech platí.

Získaný výsledek se pokuste zobecnit pro lineární kombinaci více než dvou funkcí.

Řešení:

Zadanou funkci dosadíme do normovací podmínky 2.7, upravíme

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \psi | \psi \rangle = \langle c_1\psi_1 + c_2\psi_2 | c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \rangle = \\ &= c_1^*c_1 \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle + c_2^*c_2 \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle + c_1^*c_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + c_1c_2^* \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \end{aligned}$$

a využijeme normovaností funkcí ψ_1 a ψ_2

$$1 = |c_1|^2 + |c_2|^2 + c_1^*c_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + c_1c_2^* \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle^* .$$

Z posledního výrazu je vidět, že by bylo ještě velmi výhodné, aby obě funkce byly vzájemně ortogonální, tj. aby platilo $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$. Toto bude velmi často splněno, protože budeme pracovat zejména s lineárními kombinacemi funkcí báze daného prostoru a volba ortogonální báze je výhodná. Po dosažení výše uvedeného předpokladu vyjde podmínka

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1.$$

Uvedený postup není obtížné zobecnit na lineární kombinaci více vlnových funkcí

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n. \quad (2.9)$$

Jestliže vlnové funkce ψ_n jsou všechny normované a navzájem ortogonální, potom funkce ψ je normovaná, jestliže platí

$$\sum_n |c_n|^2 = 1. \quad (2.10)$$

Význam koeficientů c_n se ukáže později při diskuzi měření a výpočtu střední hodnoty fyzikální veličiny (podkapitola 2.4).

2.2.5 Hilbertův prostor

Z předchozího textu vyplynulo, že vlnové funkce popisující fyzikálně přípustné stavy (společně s konstantně nulovou funkcí) tvoří vektorový (někdy nazývaný též lineární) prostor. Na tomto prostoru jsme zavedli skalární součin. Dále bez důkazu konstatujeme, že tento prostor je i separabilní a úplný.⁶ Prostor s těmito vlastnostmi se nazývá Hilbertův prostor \mathcal{H} a my tak budeme označovat prostor všech přípustných vlnových funkcí pro daný systém.

⁶Nebudeme se zde pouštět do matematických detailů, jen ve stručnosti připomeneme

Ještě se zmiňme o rozdílu mezi stavem a vlnovou funkcí. Správně by se mělo vždy říkat, že částice je v nějakém stavu (to odráží fyzikální realitu) a tento stav je popsán nějakou konkrétní vlnovou funkcí (obraz dané reality v matematickém modelu = reprezentaci). Již bylo řečeno, že vlnové funkce nejsou ke stavu přiřazeny jednoznačně, ale mohou se lišit o násobek. Velmi často se ale můžete setkat s tím, že se tyto dva pojmy používají nepřesně a zaměňují se. Podobně se i o Hilbertově prostoru \mathcal{H} mluví jako o prostoru stavů.

Hilbertův prostor může být různě „velký“, tj. mít různou dimenzi. Budeme pracovat se systémy, kde budeme mít \mathcal{H} s konečnou dimenzí i bází (viz kapitola 5.2 či 6.3), systémy se spočetnou bází (příkladem je třeba lineární harmonický oscilátor, viz kapitola 3.7) a pro volnou částici (viz kapitola 3.10) dokonce i nespočetnou.

Pokud bude možné v Hilbertově prostoru \mathcal{H} zvolit konečnou bázi, potom díky tomu, že se jedná o lineární (vektorový) prostor, budeme moci jeho prvky vyjádřit jako kombinací funkcí z báze a pracovat s nimi jako s „běžnými vektory“.

2.3 Reprezentace fyzikálních veličin

V předchozím oddíle jsme zjistili, že popis stavu částice vyžaduje v rámci kvantové mechaniky zásadní revizi oproti klasické mechanice (vlnové funkce místo souřadnic a hybností, statistická interpretace vlnové funkce, princip superpozice stavů částic). Nyní se budeme zabývat tím, jak jsou v námi budované matematické reprezentaci kvantové mechaniky zachyceny fyzikální veličiny.

Úkol 2.9 Napište si nějaké fyzikální veličiny. Jak jsou různé veličiny reprezentovány v klasické fyzice? Jak jsou složitější veličiny „odvozeny“ z veličin popisujících stav částice? Jak určíme hodnotu, kterou při měření nějaké veličiny naměříme?

V kvantové mechanice se ukázalo, že pro práci s fyzikálními veličinami je nezbytné rovněž sáhnout po komplikovanějších matematických objektech, jako jsme se s tím setkali u popisu stavu. Fyzikální veličiny zde vystupují jako *operátory* definované na prostoru \mathcal{H} . Než se budeme zabývat operátory konkrétních fyzikálních veličin, se alespoň stručně zmíníme, co to operátor vlastně je, a seznámíme se s jeho vlastnostmi, které budeme potřebovat v dalším výkladu.

- skalární součin nám umožňuje zavést metriku = měření „vzdálenosti dvou prvků“
- separabilní prostor je takový, ve kterém existuje spočetná hustá podmnožina
- pokud udělám konvergentní posloupnost prvků úplného prostoru, tak mám zaručeno, že v tomto prostoru je i limita této posloupnosti

2.3.1 Co je to operátor?

Definice: Pod *operátorem* \hat{O} definovaným na prostoru \mathcal{H} rozumíme matematický objekt, který každému prvku ψ z \mathcal{H} jednoznačně přiřadí prvek φ z \mathcal{H} . Tuto operaci budeme zapisovat takto:

$$\varphi = \hat{O}\psi, \quad \psi \in \mathcal{H}, \varphi \in \mathcal{H}.$$

Úkol 2.10 Zkuste výše uvedenou definici říci vlastními slovy. Porovnejte funkci, funkcionál a operátor.

Uveďme několik konkrétních případů operátorů

$$\begin{aligned} \text{a) } \hat{M}\psi &= 3\psi, & \text{b) } \hat{Q}\psi &= \psi^2, & \text{c) } \hat{D}_{x_1}\psi &= \frac{\partial\psi}{\partial x_1}, & \text{d) } \hat{K}\psi &= \psi^*, \\ \text{e) } \hat{X}_1\psi &= x_1\psi, & \text{f) } \hat{L}\psi &= \frac{\partial^2\psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial x_3^2} \equiv \Delta\psi. \end{aligned}$$

Úkol 2.11

1. Přečtěte výše uvedené operátory slovně tak, aby vyniklo, co operátor vlastně s funkcí dělá.
2. Jako jeden z příkladů je uvedena derivace. Rozhodněte, za jakých podmínek je integrál také operátor.
3. Vymyslete dalších několik příkladů operátorů, které znáte z matematiky či fyziky.
4. Speciálně rozhodněte, zda „operátory“ gradient, divergence, rotace a Laplaceův operátor jsou operátory ve smyslu výše uvedené definice.
5. Lze i funkci v nějakém smyslu chápat jako operátor? A co funkcionál?
6. Vymyslete nějaké příklady „operátorů“ z reálného života.

Sčítání a skládání (násobení) operátorů

Podobně jako s funkcemi, i s operátory lze provádět různé operace. *Součtem operátorů* budeme rozumět součet jejich výsledků, tj.

$$(\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi.$$

Protože výsledkem působení operátoru na funkci je opět funkce ze stejného prostoru, je možné na funkci aplikovat postupně dva i více operátorů. Je-li

$$\hat{A}\psi = \varphi, \quad \hat{B}\varphi = \chi \quad \Rightarrow \quad \hat{B}(\hat{A}\psi) = \chi$$

podobně jako v případě složené funkce. O operátorovém výrazu $\hat{B}\hat{A}$ mluvíme často jako o součinu⁷ operátorů \hat{B} a \hat{A}

$$(\hat{B}\hat{A})\psi = \hat{B}(\hat{A}\psi) = \hat{B}\hat{A}\psi.$$

Při této operaci je podstatné, v jakém pořadí byly operátory aplikovány. Násobení operátorů není komutativní (zaměnitelné) jako násobení komplexních čísel či funkcí. Pro řadu dvojic operátorů platí, že $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$, a o takových operátorech potom říkáme, že nekomutují.

Matematika nám nabízí širokou škálu operátorů s různými vlastnostmi. Pro použití v kvantové mechanice jsou významné operátory, kterým říkáme lineární a hermitovské.

2.3.2 Lineární operátory

Omezení na lineární operátory souvisí s tím, že chceme zachovat v platnosti princip superpozice. Definice lineárního operátoru není nijak překvapivá:

Definice: Operátor \hat{O} definovaný na prostoru \mathcal{H} je *lineární*, jestliže pro libovolná dvě komplexní čísla c_1 a c_2 a libovolné dvě funkce ψ_1 a ψ_2 z \mathcal{H} splňuje rovnost

$$\hat{O}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{O}\psi_1 + c_2\hat{O}\psi_2. \quad (2.11)$$

V definici jsme uvedli jedinou vlastnost. Někdy se ale rozepisuje jako dvě jednodušší podmínky: Operátor je lineární, pokud splňuje

1. pro libovolnou vlnovou funkci ψ a všechna $c \in \mathbb{C}$ platí $\hat{O}(c\psi) = c\hat{O}\psi$ (tj. „číslo můžeme vytknout před operátor“),
2. pro libovolné vlnové funkce ψ_1, ψ_2 platí rovnost $\hat{O}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{O}\psi_1 + \hat{O}\psi_2$ (tj. „je jedno, zda nejprve sečteme funkce a potom provedeme operátor, nebo nejprve na obě funkce necháme působit operátor a sečteme výsledky“).

⁷Na rozdíl od funkcí, které umíme násobit i skládat, operátory umíme pouze skládat. Proto veškeré součiny operátorů musíme chápat jako skládání. Tento pohled na skládání/násobení operátorů je převzat nejspíše z názvosloví lineárních zobrazení na prostorech s konečnou dimenzí. Takové zobrazení zde může být reprezentováno maticí. Pokud máme dvě taková zobrazení, matici jejich složení dostaneme jako součin matic obou zobrazení.

Výpočtová úloha 2.3

Rozhodněte, zda jsou následující operátory lineární:

a) $\hat{A}\psi = x\psi$ ($x \in \mathbb{R}$),

b) $\hat{B}\psi = \psi^*$,

c) $\hat{C}\psi = \frac{1}{\psi}$,

d) $\hat{D}\psi = \frac{d\psi}{dx}$.

Řešení:

Protože je to výpočtově snadnější, budeme ve všech případech ověřovat dvě dílčí podmínky linearity uvedené pod definicí. Vždy si rozepíšeme obě strany požadované rovnosti, abychom viděli, zda se sobě rovnají, či nikoli.

a) Operátor $\hat{A}\psi = x\psi$ ($x \in \mathbb{R}$) je operátor „vynásob souřadnicí“.

- *Podmínka 1:*

$$\text{Levá strana: } \hat{A}(c\psi) = xc\psi \quad \text{Pravá strana: } c\hat{A}(\psi) = cx\psi = xc\psi$$

Protože násobení (reálných a komplexních) čísel je komutativní, můžeme v předcházejícím řádku x a c prohodit; podmínka 1 je tedy splněna.

- *Podmínka 2:*

$$\text{L.s.: } \hat{A}(\psi_1 + \psi_2) = x(\psi_1 + \psi_2) = x\psi_1 + x\psi_2 \quad \text{P.s.: } \hat{A}\psi_1 + \hat{A}\psi_2 = x\psi_1 + x\psi_2$$

Při násobení funkcí a čísel na levé straně lze roznásobit závorky, díky tomu je požadovaná podmínka splněna.

Obě podmínky jsou splněny. Operátor „vynásob souřadnicí x “ je tedy lineárním operátorem.

b) Operátor $\hat{B}\psi = \psi^*$... „komplexně sdruž“

- *Podmínka 1:* L.s.: $\hat{B}(c\psi) = (c\psi)^* = c^*\psi^*$ P.s.: $c\hat{B}(\psi) = c\psi^*$

Podmínka je splněna pouze tehdy, pokud platí $c^* = c$. Tato rovnost platí ale pouze pro $c \in \mathbb{R}$, nikoliv ovšem pro námi obecně uvažované $c \in \mathbb{C}$. Anž bychom museli ověřovat druhou podmínku, je zřejmé, že operátor \hat{B} lineárním operátorem není.

c) $\hat{C}\psi = \frac{1}{\psi}$... „udělej převrácenou hodnotu“

- *Podmínka 1:* L.s.: $\hat{C}(c\psi) = \frac{1}{c\psi}$ P.s.: $c\hat{C}(\psi) = c\frac{1}{\psi} = \frac{c}{\psi}$

Podmínka není splněna pro všechna $c \in \mathbb{C}$, takže již nemusíme pokračovat ověřováním druhé podmínky, ani operátor „převrácená hodnota“ zjevně není lineární.

d) $\hat{D}\psi = \frac{d\psi}{dx}$... operátor „zderivuj podle souřadnice x “ – o operátoru zderivuj víme, že je lineární, přesto si zde rozepíšme obě podmínky

- $P1$: L.s.: $\hat{D}(c\psi) = \frac{d(c\psi)}{dx} = c\frac{d\psi}{dx}$ P.s.: $c\hat{D}(\psi) = c\frac{d\psi}{dx}$
- $P2$: L.s.: $\hat{D}(\psi_1 + \psi_2) = \frac{d(\psi_1 + \psi_2)}{dx} = \frac{d\psi_1}{dx} + \frac{d\psi_2}{dx}$ P.s.: $\hat{D}(\psi_1) + \hat{D}(\psi_2) = \frac{d\psi_1}{dx} + \frac{d\psi_2}{dx}$

Vidíme, že se jedná o známá pravidla o tom, jak při derivování pracovat s konstantou a jak se derivuje součet funkcí. Operátor „zderivuj podle souřadnice x “ je tedy lineárním operátorem.

2.3.3 Hermitovské sdružení a hermitovský operátor

Operátor \hat{O}^\dagger je **hermitovsky sdružený** s operátorem \hat{O} , jestliže pro *libovolné dvě* vlnové funkce φ, ψ z \mathcal{H} platí:

$$\langle \varphi | \hat{O}\psi \rangle = \langle \hat{O}^\dagger\varphi | \psi \rangle. \quad (2.12)$$

Asi nás nepřekvapí, že je-li operátor roven svému hermitovskému sdružení, tj. $\hat{O}^\dagger = \hat{O}$, nazveme operátor \hat{O} operátorem hermitovským. Zformulujme definici hermitovského operátoru i explicitně.

Operátor \hat{O} je **hermitovský**, pokud pro *libovolné dvě* vlnové funkce φ a ψ z \mathcal{H} platí

$$\langle \varphi | \hat{O}\psi \rangle = \langle \hat{O}\varphi | \psi \rangle. \quad (2.13)$$

Hermitovské sdružení je tedy jakési „přemístění operátoru z jedné složky skalárního součinu do druhé“. I když je to v obou definicích zvýrazněno, upozorníme ještě jednou, že požadovaná rovnost musí nastat pro libovolnou dvojici funkcí z \mathcal{H} . Další věcí, která je v definici tak trochu ukryta, je, že pokud se dva operátory sobě mají rovnat, musí se rovnat i jejich definiční obory.

Pojďme najít k několika operátorům jejich hermitovská sdružení.

Výpočtová úloha 2.4

Uvažujme operátory definované na prostoru vlnových funkcí s reálnou proměnnou x . Nalezněte k nim hermitovsky sdružené operátory.

- a) $\hat{C}\psi(x) = c\psi(x)$, kde $c \in \mathbb{C}$, b) $\hat{X}\psi(x) = x\psi(x)$,
 c) $\hat{V}\psi(x) = V(x)\psi(x)$, kde $V(x)$ je reálná funkce souřadnice x ,
 d) $\hat{D}\psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}$, e) $\hat{K}\psi(x) = i\frac{d\psi(x)}{dx}$.

Řešení:

Ve všech případech budeme postupovat tak, že rozepíšeme levou stranu vztahu pro hermitovsky sdružené operátory 2.12 pomocí definice skalárního součinu a budeme ji upravovat tak, abychom se dostali na tvar na pravé straně.

- a) Operátor vynásobení komplexní konstantou: $\hat{C}\psi(x) = c\psi(x)$, kde $c \in \mathbb{C}$:

$$\langle \psi_1 | \hat{C}\psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | c\psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* c\psi_2 dx =$$

a díky komutativitě násobení čísel i funkcí a vlastnostem komplexního sdružení dostaneme

$$= \int_{-\infty}^{\infty} c\psi_1^*\psi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} (c^*\psi_1)^*\psi_2 dx = \langle c^*\psi_1 | \psi_2 \rangle.$$

Takže vidíme, že hermitovsky sdruženým operátorem k \hat{C} je operátor vynásob komplexně sdruženou konstantou. Operátor „vynásob konstantou“ je tedy hermitovský pouze v případě, že se jedná o reálnou konstantu, tj.:

$$C^\dagger = c^*.$$

- b) Hledání hermitovsky sdruženého operátoru \hat{X}^\dagger k operátoru vynásobení souřadnicí $\hat{X}\psi(x) = x\psi(x)$ je velmi podobné předchozí úloze:

$$\langle \psi_1 | \hat{X}\psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | x\psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* x\psi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} x\psi_1^*\psi_2 dx =$$

protože souřadnice x je reálná, je $x = x^*$ a výraz lze snadno upravit:

$$= \int_{-\infty}^{\infty} (x\psi_1)^* \psi_2 dx = \langle x\psi_1 | \psi_2 \rangle .$$

Operátor polohy \hat{x} se nám podařilo „přesunout“ z druhé složky skalárního součinu do první – hermitovsky sdružený operátor k \hat{x} je tedy opět \hat{x} , tj. $\hat{x}^\dagger = \hat{x}$, operátor \hat{x} je hermitovský.

c) Podobný postup zopakujeme i pro operátor vynásobení reálnou funkcí $V(x)$, tj. $\hat{V}\psi(x) = V(x)\psi(x)$:

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \hat{V}\psi_2 \rangle &= \langle \psi_1 | V(x)\psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* V(x)\psi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} V(x)\psi_1^* \psi_2 dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (V(x)\psi_1)^* \psi_2 dx = \langle V(x)\psi_1 | \psi_2 \rangle . \end{aligned}$$

Vidíme, že operátor \hat{V} je hermitovský.

d) Operátor „derivuj podle souřadnice x “ $\hat{D}\psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}$:

$$\langle \psi_1 | \hat{D}\psi_2 \rangle = \left\langle \psi_1 \left| \frac{d\psi_2}{dx} \right. \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \frac{d\psi_2}{dx} dx$$

Výraz v integrálu upravíme pomocí derivace součinu, tj. $\psi_1 \frac{d\psi_2}{dx} = \frac{d}{dx} (\psi_1 \psi_2) - \frac{d\psi_1}{dx} \psi_2$ (tento krok se také nazývá integrace metodou per partes):

$$\langle \psi_1 | \hat{D}\psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d}{dx} (\psi_1^* \psi_2) - \frac{d\psi_1^*}{dx} \psi_2 \right) dx = [\psi_1^* \psi_2]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi_1^*}{dx} \psi_2 dx$$

Nyní využijeme jednoho z požadavků, které na vlnové funkce ve kvantové mechanice obecně máme – aby byly naše funkce normovatelné, požadujeme, aby se v nevlastních bodech blížily hodnoty funkcí nule, tj.:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi_1(x) = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi_2(x) = 0$$

Nulovost obou limit samozřejmě zachovává i součin dvou vlnových funkcí, takže člen $[\psi_1^* \psi_2]_{-\infty}^{\infty}$ se vlastně redukuje na výraz „ $0 \cdot 0 - 0 \cdot 0 = 0$ “ – zbývá tedy upravit zbylý integrál:

$$\langle \psi_1 | \hat{D}\psi_2 \rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi_1^*}{dx} \psi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{d\psi_1}{dx} \right)^* \psi_2 dx =$$

$$= \left\langle -\frac{d\psi_1}{dx} \mid \psi_2 \right\rangle = \left\langle -\hat{D}\psi_1 \mid \psi_2 \right\rangle.$$

Hermitovsky sdruženým operátorem k operátoru $\hat{D} = \frac{d}{dx}$ je tedy operátor $\hat{D}^\dagger = -\hat{D} = -\frac{d}{dx}$. To znamená, že operátor „derivuj podle souřadnice x “ není hermitovský.

e) Nyní ukážeme, že pokud operátor „derivuj podle souřadnice x “ přenásobíme ryze imaginární jednotkou i , stane se z něj hermitovský operátor. Postup je zcela identický s předcházející částí, proto neobsahuje podrobnější komentáře:

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_1 \mid \hat{K}\psi_2 \right\rangle &= \left\langle \psi_1 \mid i\frac{d\psi_2}{dx} \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* i\frac{d\psi_2}{dx} dx = i \left([\psi_1^* \psi_2]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi_1^*}{dx} \psi_2 dx \right) = \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi_1^*}{dx} \psi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(i\frac{d\psi_1}{dx} \right)^* \psi_2 dx = \left\langle i\frac{d\psi_1}{dx} \mid \psi_2 \right\rangle = \left\langle \hat{K}\psi_1 \mid \psi_2 \right\rangle. \end{aligned}$$

Jde dokázat, že hermitovský operátor již nutně musí být lineární. Přesto je linearita natolik důležitou vlastností, že se výslovně zdůrazňuje.

2.3.4 Operátory fyzikálních veličin

Po stručném seznámení s pojmem operátor obecně se vrátíme k zavedení fyzikálních veličin v kvantové mechanice – tedy k tomu, jak najít operátor ke konkrétní fyzikální veličině. Nejprve vyslovme příslušný postulát:

Postulát o operátorech fyzikálních veličin

1. Každé měřitelné fyzikální veličině F je v kvantové mechanice přiřazen lineární a hermitovský operátor \hat{F} .
2. Základním fyzikálním veličinám – souřadnicím částice x_1, x_2, x_3 a složkám hybnosti částice p_1, p_2, p_3 – jsou přiřazeny operátory $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3$ a $\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3$ takto

$$x_k \longrightarrow \hat{x}_k = x_k \hat{\mathbb{E}}, \quad p_k \longrightarrow \hat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}, \quad k = 1, 2, 3$$

neboli zapsáno vektorově

$$\vec{r} \longrightarrow \hat{\vec{r}} = \vec{r} \hat{\mathbb{E}}, \quad \vec{p} \longrightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla,$$

kde $\hat{\mathbb{E}}$ je jednotkový operátor.

3. Je-li fyzikální veličina F vyjádřena pomocí základních mechanických veličin vztahem $F = F(\vec{r}, \vec{p})$, je jí přiřazen operátor

$$F \longrightarrow \hat{F} = F(\hat{r}, \hat{p}).$$

Připojme k těmto tvrzením několik poznámek.

V bodě dva vidíme, že kartézské souřadnici je přiřazen operátor „vynásob souřadnicí“ a hybnost je reprezentována operátorem derivace vynásobené ryze imaginárním číslem. Na základě úlohy 4 (s. 25) víme, že se v obou případech jedná o hermitovské operátory.

Uvedená volba operátorů souřadnice a hybnosti není jediná možná. Ve skutečnosti si můžeme tyto operátory zvolit poměrně s velkou volností, protože jedinou podmínkou, kterou musí naše volba splňovat je tzv. kanonická komutační relace (viz strana 2.21). Zde uvedená volba odpovídá tzv. souřadnicové reprezentaci (x -reprezentaci), protože operátor souřadnice je jen pouhým násobením souřadnicí.

K pravidlu pro konstrukci operátorů složitějších fyzikálních veličin⁸ podle bodu 3 je vhodné připomenout, že násobení operátorů je vlastně jejich skládání, jak již bylo uvedeno. Pokud je třeba přisoudit operátor součinu dvou veličin A a B , jejichž operátory \hat{A} a \hat{B} nekomutují, takže hrozí nejistota týkající se správného pořadí obou operátorů v součinu, postupuje se podle pravidla

$$F = AB \longrightarrow \hat{F} = \frac{(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})}{2}.$$

Uvedme nyní několik konkrétních příkladů operátorů fyzikálních veličin, s kterými se budeme v dalším výkladu nejčastěji setkávat.

Velmi často budeme potřebovat znát tvar operátoru **kinetické energie** T částice, pro který v klasické mechanice platí

$$T = \frac{1}{2} mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m}.$$

Nahradíme-li v tomto vzorci složky hybnosti jejich operátory podle výše uvedeného pravidla, dostaneme operátor kinetické energie částice ve tvaru⁹

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2}{2m} = \frac{(-i\hbar)^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta.$$

⁸Obvykle je toto pravidlo studenty formulováno jako „Napiš vzoreček dané veličiny a ostříšuj ho.“

⁹Povšimněte si, že opravdu druhá mocnina operátoru hybnosti, není druhá mocnina derivace, ale dvakrát aplikovaná derivace, tj. druhá derivace podle x .

Při studiu pohybu částice v konzervativním silovém poli popsaném **potenciální energií** $V(\vec{r})$ budeme používat její operátor $\hat{V}(\vec{r})$, pro který jednoduše platí (V je funkcí pouze souřadnic)

$$\hat{V} = V(\vec{r})\hat{\mathbb{E}},$$

kde $\hat{\mathbb{E}}$ je jednotkový operátor. Jedná se vlastně o operátor „vynásob potenciální energií“, což je reálná funkce a explicitně jsme ověřili, že se jedná o hermitovský operátor.

Pro operátor \hat{H} **celkové energie** E částice v konzervativním poli potom už snadno dostaneme vzorec

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\hat{\mathbb{E}}. \quad (2.14)$$

Důvodem pro použití označení \hat{H} pro tento operátor (nikoliv \hat{E}) je skutečnost, že v případě konzervativního pole je celková energie částice v klasickém případě shodná s její Hamiltonovou funkcí. V kvantové mechanice pak operátor celkové energie nazýváme také *Hamiltonův operátor*, nebo častěji zkráceně *hamiltonián*. I v obecném případě, kdy již částice není podrobena působení pouze konzervativních sil, je vždy klasické Hamiltonově funkci přiřazen operátor nazývaný hamiltonián.

Uvedme zde ještě jako příklad hamiltonián pro elektricky nabitou částici s nábojem q a hmotností m podrobenou vlivu elektromagnetického pole popsaného vektorovým potenciálem \vec{A} a skalárním potenciálem φ a současně ještě nějakého dalšího konzervativního pole s potenciální energií V . Oba potenciály i potenciální energie jsou funkcemi souřadnic, proto jejich operátory jsou násobením příslušnou funkcí. Hamiltonův operátor tedy dostaneme „ostříškováním“ hamiltoniánu známého z klasické teorie

$$\hat{H} = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + q\varphi + V \quad \Rightarrow \quad \hat{H} = \frac{(\vec{p} - q\vec{A}\hat{\mathbb{E}})^2}{2m} + q\varphi\hat{\mathbb{E}} + V\hat{\mathbb{E}}. \quad (2.15)$$

Je vidět, že při vypnutí elektromagnetického pole ($\vec{A} = 0$, $\varphi = 0$) a po dosazení explicitního tvaru operátoru hybnosti \vec{p} přejde vzorec 2.15 v 2.14. Podrobněji se budeme částic v elektromagnetickém poli zabývat v kapitole 6.1, zde to uvádíme jako příklad, kdy je třeba si dát pozor na pořadí, ve kterém operátory píšeme. Čitatel prvního členu hamiltoniánu 2.15 můžeme rozepsat jako $(\vec{p} - q\vec{A})^2 = \vec{p}^2 + 2q\vec{p} \cdot \vec{A} + q^2\vec{A}^2$, ale v kvantovém případě musíme poctivě napsat

$$(\vec{p} - q\vec{A}\hat{\mathbb{E}})^2 = (\vec{p} - q\vec{A}\hat{\mathbb{E}}) \cdot (\vec{p} - q\vec{A}\hat{\mathbb{E}}) = \vec{p}^2 + q\vec{p} \cdot \vec{A} + q\vec{A} \cdot \vec{p} + q^2\vec{A}^2\hat{\mathbb{E}},$$

protože si nemůžeme být jistí, že operátor hybnosti a operátor násobení vektorovým potenciálem lze prohodit (a v následující kapitole uvidíme, že obecně je prohodit opravdu nelze).¹⁰

¹⁰Tečkou značené skalární násobení vektorových veličin se počítá pro vektorové operátory stejně jako pro vektorové funkce a nemá nic společného se skalárním součinem $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$ (viz definice 2.6) dvou funkcí.

V souvislosti s řešením úlohy chování částice v centrálním silovém poli bude klíčovou fyzikální veličinou moment hybnosti \vec{L} , pro který nalezneme příslušný vektorový operátor (trojici operátorů) podle vztahu

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \longrightarrow \hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}},$$

což po rozepsání do složek dává¹¹

$$\begin{aligned}\hat{L}_1 &= \hat{x}_2 \hat{p}_3 - \hat{x}_3 \hat{p}_2 = i\hbar \left(x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} \right), \\ \hat{L}_2 &= \hat{x}_3 \hat{p}_1 - \hat{x}_1 \hat{p}_3 = i\hbar \left(x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} \right), \\ \hat{L}_3 &= \hat{x}_1 \hat{p}_2 - \hat{x}_2 \hat{p}_1 = i\hbar \left(x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} \right).\end{aligned}\tag{2.16}$$

Celý zápis můžeme zjednodušit použitím Levi-Civitova symbolu (viz kapitola 11.2), kdy j -tou složku momentu hybnosti L_j zapíšeme jako¹²

$$\left(\vec{L} \right)_j = (\vec{r} \times \vec{p})_j = \epsilon_{jkl} x_k p_l \quad \Rightarrow \quad L_j = \epsilon_{jkl} \hat{x}_k \hat{p}_l.\tag{2.17}$$

Pro popis vlastností a chování částice v centrálním poli se však lépe hodí sférické souřadnice r, θ, ϕ , a proto se budeme nejčastěji setkávat s vyjádřením složek operátoru momentu hybnosti $\hat{\vec{L}}$ v těchto souřadnicích. Příslušné vzorce odvodíme v kapitole 5.1, zde uvedeme jenom jejich tvar

$$\begin{aligned}\hat{L}_1 &= i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \\ \hat{L}_2 &= -i\hbar \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \\ \hat{L}_3 &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}\end{aligned}\tag{2.18}$$

a připojíme k nim i vyjádření druhé mocniny momentu hybnosti

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right].\tag{2.19}$$

Snadno si povšimneme, že operátory momentu hybnosti vyjádřené ve sférických souřadnicích vůbec nezávisí na radiální proměnné r .

¹¹V následující kapitole si ukážeme, že v tomto případě násobené operátory komutují, takže na jejich pořadí nezáleží. Zkuste si je napsat v obráceném pořadí a vztah upravte.

¹²V celém textu budeme předpokládat, že indexy j, k, l, \dots nabývají hodnot 1, 2, 3. Dále budeme ve vztazích využívat tzv. Einsteinovo sumační pravidlo, které říká, že pokud se „potkají“ v jednom členu dva stejné indexy, tak se automaticky přes tento index sčítá, aniž by se vypisoval sumační symbol. Vztah pro L_j tedy vlastně znamená $L_j = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 \epsilon_{jkl} x_k p_l$.

2.3.5 Komutační relace

Již jsme se setkali s tím, že operátory lze sčítat a násobit. Co se týká násobení operátorů, bylo zdůrazněno, že na rozdíl od násobení reálných nebo komplexních čísel je toto násobení nekomutativní. Pro vystižení této vlastnosti u dané dvojice operátorů \hat{A} a \hat{B} se používá operátorového výrazu definovaného vztahem

$$[\hat{A}, \hat{B}] \stackrel{\text{def.}}{=} \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (2.20)$$

Symbolu $[\hat{A}, \hat{B}]$ se říká komutátor operátorů \hat{A} a \hat{B} .¹³

Jestliže je komutátor $[\hat{A}, \hat{B}]$ nulovým operátorem,¹⁴ jsou operátory \hat{A} a \hat{B} **komutativní** a můžeme je násobit (skládat) v libovolném pořadí. Není-li tomu tak, říkáme potom, že oba operátory **nekomutují**.

Je vidět, že při úpravách výrazů obsahujících součiny operátorů je třeba dbát zvýšené opatrnosti. Z tohoto hlediska vypadá nekomutativnost některých dvojic operátorů pouze jako nepříjemnost matematické povahy. Uvidíme však, že skutečnost, zda dvojice operátorů reprezentujících fyzikální veličiny komutuje, či nikoli, má důležité fyzikální pozadí. Bude proto užitečné alespoň pro operátory nejdůležitějších fyzikálních veličin vyšetřit předem, jaké jsou jejich **komutační relace**.¹⁵

Poznámka: Při odvozování jakýchkoli vztahů mezi operátory, a tedy i komutačních relací, je třeba mít na mysli, že rovnost dvou operátorů \hat{A} a \hat{B} nastává, pokud dávají stejný výsledek pro jakoukoli funkci, tj. pro všechny funkce $\psi \in \mathcal{H}$ platí rovnost $\hat{A}\psi = \hat{B}\psi$. Rovnost operátoru tedy v sobě zahrnuje i rovnost jejich definičních oborů a zapisujeme ji jednoduše jako $\hat{A} = \hat{B}$.

Komutační relace souřadnic a hybností

Začneme komutačními vlastnostmi základních operátorů, tedy jednotlivých souřadnic \hat{x}_1 , \hat{x}_2 a \hat{x}_3 a jednotlivých složek hybností \hat{p}_1 , \hat{p}_2 a \hat{p}_3 .

Nejprve ověříme, že navzájem komutují souřadnice. Protože se jedná o první výpočet, budeme ho detailně komentovat.

Uvědomme si, že výsledkem komutátoru je operátor. Protože se jedná o jeden z prvních

¹³Jedná se o operaci na množině operátorů, protože výsledkem je opět operátor.

¹⁴To znamená, že každé funkci přiřazuje konstantně nulovou funkci. Sice nesprávně, ale častěji se říká, že je komutátor nulový nebo roven nule. Totu formulaci budeme používat i v dalším textu s tím, že víme, jak je to myšleno.

¹⁵Komutační relace jsou jakékoli vztahy obsahující komutátory, tj. jak komutátory konkrétních dvojic operátorů, tak i složitější vztahy mezi komutátory.

výpočtů s operátory, připíšeme za něj libovolnou funkci ψ , na kterou působí, díky tomu je výsledkem výrazu funkce

$$[\hat{x}_k, \hat{x}_l]\psi =$$

komutátor rozepíšeme podle definice

$$= (\hat{x}_k \hat{x}_l - \hat{x}_l \hat{x}_k)\psi =$$

a upravíme

$$= x_k x_l \psi - x_l x_k \psi = 0.$$

Poslední výraz je nulový díky komutativitě násobení čísel. Protože výsledkem působení komutátoru na libovolnou funkci je nula (nulová funkce), říkáme, že komutátor je nulový a operátory jednotlivých souřadnic spolu komutují, tj.

$$[\hat{x}_k, \hat{x}_l] = 0, \quad \text{kde } k = 1, 2, 3; l = 1, 2, 3.$$

Stejným způsobem spočítáme komutátor složek hybnosti

$$[\hat{p}_k, \hat{p}_l]\psi = (\hat{p}_k \hat{p}_l - \hat{p}_l \hat{p}_k)\psi = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_l} \right) - (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x_l} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \right) \psi =$$

vytkneme konstanty před derivace a roznásobíme závorky

$$= -\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial \psi}{\partial x_l} + \hbar^2 \frac{\partial}{\partial x_l} \frac{\partial \psi}{\partial x_k} = 0.$$

Poslední rovnost je dána záměnností derivací pro spojitě funkce. Vidíme, že také složky hybnosti komutují

$$[\hat{p}_k, \hat{p}_l] = 0, \quad \text{kde } k = 1, 2, 3; l = 1, 2, 3.$$

Úkol 2.12 Dokažte i obecnější tvrzení, že dvě libovolné funkce f_1 a f_2 operátorů souřadnic částice navzájem komutují, tj.

$$[f_1(\hat{\vec{r}}), f_2(\hat{\vec{r}})] = 0.$$

A podobně dokažte, že komutují i dvě funkce f_3 a f_4 závislé pouze na hybnosti, tj.

$$[f_3(\hat{\vec{p}}), f_4(\hat{\vec{p}})] = 0.$$

Nakonec spočítáme komutační relaci operátorů vybrané souřadnice x_k a vybrané složky hybnosti p_l . Pro libovolnou dvojici indexů k a l a pro libovolnou funkci ψ nyní platí

$$\begin{aligned} [\hat{x}_k, \hat{p}_l]\psi &= (\hat{x}_k\hat{p}_l - \hat{p}_l\hat{x}_k)\psi = (-i\hbar) \left(x_k \frac{\partial\psi}{\partial x_l} - \frac{\partial}{\partial x_l}(x_k\psi) \right) = \\ &= -i\hbar \left(x_k \frac{\partial\psi}{\partial x_l} - \delta_{kl}\psi - x_k \frac{\partial\psi}{\partial x_l} \right) = i\hbar\delta_{kl}\psi. \end{aligned}$$

To můžeme zapsat jako

$$[\hat{x}_k, \hat{p}_l] = i\hbar\delta_{kl}\hat{\mathbb{E}}, \quad \text{kde } k = 1, 2, 3; l = 1, 2, 3. \quad (2.21)$$

Tato relace nám říká, že operátory odpovídajících si složek ($k = l$) polohového vektoru $\hat{\vec{r}}$ a vektoru hybnosti $\hat{\vec{p}}$ nekomutují. Operátory různých složek souřadnice a hybnosti spolu komutují. Komutační relace 2.21 se nazývá **kanonická komutační relace**, má závažné důsledky a budeme se s ní v dalším výkladu často setkávat.

Zjednodušování komutačních relací

Složitější komutační relace je možné odvodit z relací jednodušších. Velmi užitečná jsou pro tento účel následující pravidla

$$[\hat{A}, \hat{A}] = 0, \quad (2.22)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}], \quad (2.23)$$

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}], \quad (2.24)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}. \quad (2.25)$$

Zejména pravidlo (2.25) je cenné pro odvozování tvaru složitějších komutátorů i komutačních relací, protože umožňuje zjednodušovat komutátory složených operátorů. Možná se zdá, že je těžké si ho zapamatovat – k tomu lze použít takovou pomůcku dle obrázku níže – komutátor se rozpadne na součet dvou komutátorů a při rozepisování součinu operátorů si musíme dát pozor na to, abychom zachovali původní pořadí operátorů \hat{B} a \hat{C} .

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$$

Úkol 2.13

- Dokažte výše uvedené vztahy mezi komutátory.
- Zjednodušte komutátor $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}]$.
- Použijte předchozí pravidla pro zjednodušení komutátorů $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\hat{D}]$ a $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\hat{D}]$.

Výpočtová úloha 2.5

Spočtěte následující komutátory:

a) $[\hat{p}_j, \hat{V}(\vec{r})]$, b) $[\hat{p}_j, \hat{T}]$. c) $[\hat{x}_j, \hat{T}]$.

Řešení:

a) Komutátor rozepíšeme pomocí definice (u operátoru potenciální energie \hat{V} nebudeme pro přehlednost psát, že závisí jen na souřadnici):

$$[\hat{p}_j, \hat{V}]\psi = (\hat{p}_j\hat{V} - \hat{V}\hat{p}_j)\psi = \hat{p}_j(\hat{V}\psi) - \hat{V}(\hat{p}_j\psi).$$

a dosadíme definice obou operátorů

$$[\hat{p}_j, \hat{V}]\psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}(V\psi) - V\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}\psi\right) = -i\hbar \left(\frac{\partial V\psi}{\partial x_j} - V \frac{\partial \psi}{\partial x_j}\right).$$

V prvním členu rozepíšeme derivaci součinu $\hat{V}\psi$ a upravíme do finálního tvaru:

$$[\hat{p}_j, \hat{V}]\psi = -i\hbar \left(\psi \frac{\partial V}{\partial x_j} + V \frac{\partial \psi}{\partial x_j} - V \frac{\partial \psi}{\partial x_j}\right) = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x_j}\psi.$$

Hledaný komutátor je tedy

$$[\hat{p}_j, \hat{V}] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x_j}.$$

Získaný výsledek lze zobecnit pro vektorový operátor $\hat{\vec{p}}$ jako:

$$[\hat{\vec{p}}, \hat{V}(\vec{r})] = -i\hbar \nabla V(\vec{r}).$$

b) Komutátor složky hybnosti a kinetické energie $T = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ nemusíme počítat, proto je zřejmé, že na základě úkolu 12 oba operátory komutují. Přesto stručně uveďme

výpočet:

$$[\hat{p}_j, \hat{T}] = \frac{1}{2m} \left[\hat{p}_j, \sum_{k=1}^3 \hat{p}_k^2 \right] = \frac{1}{2m} \sum_{k=1}^3 (\hat{p}_k [\hat{p}_j, \hat{p}_k] + [\hat{p}_j, \hat{p}_k] \hat{p}_k) = 0.$$

c) Pro operátory j -té souřadnice a kinetické energie bude platit

$$[\hat{x}_j, \hat{T}] = \frac{1}{2m} \left[\hat{x}_j, \sum_{k=1}^3 \hat{p}_k^2 \right] = \frac{1}{2m} \sum_{k=1}^3 (\hat{p}_k [\hat{x}_j, \hat{p}_k] + [\hat{x}_j, \hat{p}_k] \hat{p}_k) = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^3 i\hbar \delta_{jk} \hat{p}_k = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_j,$$

takže příslušná komutační relace vyjádřená ve vektorovém zápisu bude mít tvar

$$[\hat{\vec{r}}, \hat{T}] = \frac{i\hbar}{m} \hat{\vec{p}}.$$

Komutátory momentu hybnosti

Komutátory složek momentu hybnosti $\hat{\vec{L}} = (\hat{L}_1, \hat{L}_2, \hat{L}_3)$ jsou velmi významné zejména v souvislosti s popisem chování částice v silovém poli se sféricky symetrickým potenciálem. Mají tvar

$$[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = i\hbar \hat{L}_3, \quad [\hat{L}_2, \hat{L}_3] = i\hbar \hat{L}_1, \quad [\hat{L}_3, \hat{L}_1] = i\hbar \hat{L}_2.$$

Tyto relace lze dostat jednu z druhé cyklickou záměnou indexů 1, 2, 3 a obecně zapsat pomocí Levi-Civitova symbolu

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{L}_l. \quad (2.26)$$

Vidíme, že složky momentu hybnosti navzájem nekomutují a komutátor dvou složek je úměrný složce třetí.

Dále definujeme operátor velikosti¹⁶ momentu hybnosti \hat{L}^2 jako

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2 = \sum_{k=1}^3 \hat{L}_k^2.$$

Operátory jednotlivých složek momentu hybnosti \hat{L}_j s operátorem velikosti momentu hybnosti \hat{L}^2 komutují, tj.

$$[\hat{L}_j, \hat{L}^2] = 0. \quad (2.27)$$

O všech těchto komutačních relacích se přesvědčíme v následující úloze.

¹⁶Ve skutečnosti se jedná o kvadrát velikosti momentu hybnosti, přesto se často tento operátor nazývá právě operátorem velikosti momentu hybnosti.

Úkol 2.14 Pokud máte pocit, že počítání komutátorů s obecnými složkami momentu hybnosti je pro začátek příliš komplikované, zkuste si předtím spočítat následující konkrétní komutátory.

$$\text{a) } [\hat{L}_1, \hat{x}_2], \text{ apod.} \quad \text{b) } [\hat{L}_1, \hat{p}_3], \text{ apod.} \quad \text{c) } [\hat{L}_1, \hat{L}_2], \text{ apod.} \quad \text{d) } [\hat{L}_1, \hat{L}^2], \text{ apod.}$$

a na jejich základě odvodit obecnější vztahy.

Výpočtová úloha 2.6

Spočítejte následující komutátory složek momentu hybnosti:

$$\text{a) } [\hat{L}_j, \hat{x}_m] \quad \text{b) } [\hat{L}_j, \hat{p}_m], \quad \text{c) } [\hat{L}_j, \hat{L}_k], \quad \text{d) } [\hat{L}_j, \hat{L}^2].$$

Řešení:

a) Počítáme komutátor j -té složky operátoru momentu hybnosti a m -té složky operátoru polohy. Operátor \hat{L}_j si rozepíšeme dle 2.17

$$[\hat{L}_j, \hat{x}_m]\psi = [\epsilon_{jkl}\hat{x}_k\hat{p}_l, \hat{x}_m]\psi = \epsilon_{jkl}[\hat{x}_k\hat{p}_l, \hat{x}_m]\psi$$

Využijeme pravidlo 2.25 pro zjednodušení komutátoru se součinem operátorů

$$[\hat{L}_j, \hat{x}_m]\psi = \epsilon_{jkl}(\hat{x}_k[\hat{p}_l, \hat{x}_m] + [\hat{x}_k, \hat{x}_m]\hat{p}_l)\psi$$

Protože operátory souřadnic spolu komutují, je druhý komutátor ve vztahu výše nulový, první komutátor je vlastně kanonická komutační relace 2.21

$$[\hat{L}_j, \hat{x}_m]\psi = \epsilon_{jkl}\hat{x}_k[\hat{p}_l, \hat{x}_m]\psi = \epsilon_{jkl}\hat{x}_k(-i\hbar)\delta_{lm}\psi.$$

Vysčítáme přes index l a využijeme antisymetrie ϵ_{jkm}

$$[\hat{L}_j, \hat{x}_m]\psi = -i\hbar\epsilon_{jkm}\hat{x}_k\psi = i\hbar\epsilon_{jmk}\hat{x}_k\psi.$$

Hledaný komutátor je tedy roven

$$[\hat{L}_j, \hat{x}_m] = i\hbar\epsilon_{jmk}\hat{x}_k.$$

b) Dále spočteme komutátor j -té složky operátoru momentu hybnosti a m -té složky operátoru hybnosti. Výpočet je zcela analogický jako v předchozí části, proto není podrobně komentován.

$$\begin{aligned} [\hat{L}_j, \hat{p}_m]\psi &= [\epsilon_{jkl}\hat{x}_k\hat{p}_l, \hat{p}_m]\psi = \epsilon_{jkl}[\hat{x}_k\hat{p}_l, \hat{p}_m]\psi = \epsilon_{jkl}(\hat{x}_k[\hat{p}_l, \hat{p}_m] + [\hat{x}_k, \hat{p}_m]\hat{p}_l)\psi = \\ &= \epsilon_{jkl}[\hat{x}_k, \hat{p}_m]\hat{p}_l\psi = \epsilon_{jkl}i\hbar\delta_{km}\hat{p}_l\psi = i\hbar\epsilon_{jml}\hat{p}_l\psi. \end{aligned}$$

Hledaný komutátor je tedy roven

$$[\hat{L}_j, \hat{p}_m] = i\hbar\epsilon_{jml}\hat{p}_l.$$

c) Při výpočtu komutátoru dvou složek operátoru momentu hybnosti využijeme co nejvíce výsledky předchozích dvou částí. Abychom se neztratili v indexech, použijeme jiná písmena a výsledek potom přepíšeme do požadovaného tvaru.

$$[\hat{L}_a, \hat{L}_b]\psi = [\hat{L}_a, \epsilon_{bcd}\hat{x}_c\hat{p}_d]\psi = \epsilon_{bcd}\hat{x}_c[\hat{L}_a, \hat{p}_d]\psi + \epsilon_{bcd}[\hat{L}_a, \hat{x}_c]\hat{p}_d\psi$$

Nyní využijeme předchozí výpočty a dosadíme za komutátory (sčítací indexy v Levi-Civitových symbolech nazveme e , resp. f):

$$[\hat{L}_a, \hat{L}_b]\psi = \epsilon_{bcd}\hat{x}_c(i\hbar\epsilon_{ade}\hat{p}_e)\psi + \epsilon_{bcd}(i\hbar\epsilon_{acf}\hat{x}_f)\hat{p}_d\psi$$

Vytkneme konstanty a cyklickou záměnou přeuspořádáme indexy Levi-Civitových symbolů tak, aby bylo možné použít vztah $\epsilon_{ABC}\epsilon_{ADE} = \delta_{BD}\delta_{CE} - \delta_{BE}\delta_{CD}$:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_a, \hat{L}_b]\psi &= i\hbar(\epsilon_{dbc}\epsilon_{dea}\hat{x}_c\hat{p}_e + \epsilon_{cdb}\epsilon_{cfa}\hat{x}_f\hat{p}_d)\psi = \\ &= i\hbar((\delta_{be}\delta_{ca} - \delta_{ba}\delta_{ce})\hat{x}_c\hat{p}_e + (\delta_{df}\delta_{ba} - \delta_{da}\delta_{bf})\hat{x}_f\hat{p}_d)\psi = \\ &= i\hbar(\delta_{be}\delta_{ca}\hat{x}_c\hat{p}_e - \delta_{ba}\delta_{ce}\hat{x}_c\hat{p}_e + \delta_{df}\delta_{ba}\hat{x}_f\hat{p}_d - \delta_{da}\delta_{bf}\hat{x}_f\hat{p}_d)\psi. \end{aligned}$$

Vysčítáme přes Kroneckerovy symboly ve všech čtyřech členech:

$$[\hat{L}_a, \hat{L}_b]\psi = i\hbar(\hat{x}_a\hat{p}_b - \delta_{ba}\hat{x}_c\hat{p}_c + \delta_{ba}\hat{x}_d\hat{p}_d - \hat{x}_b\hat{p}_a)\psi.$$

Druhý a třetí člen v závorce se liší jenom pojmenováním sčítacího indexu, takže se odečtou. Hledaný komutátor se tedy redukuje na tvar:

$$[\hat{L}_a, \hat{L}_b]\psi = i\hbar(\hat{x}_a\hat{p}_b - \hat{x}_b\hat{p}_a)\psi,$$

což nám již jasně připomíná složku vektorového součinu – a to tu složku, která není obsažena v komutátoru. Použijeme rozpis pomocí Levi-Civitova symbolu

$$[\hat{L}_a, \hat{L}_b]\psi = i\hbar\epsilon_{abc}\hat{L}_c\psi.$$

Dvě různé složky operátoru momentu hybnosti spolu tedy nekomutují a jejich komutátorem je násobek složky třetí (výsledek ještě přepíšeme pomocí indexů použitých v zadání):

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{L}_l.$$

d) Následující komutátor obsahuje operátor velikosti momentu hybnosti \hat{L}^2 , kde

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2 = \sum_{k=1}^3 \hat{L}_k^2.$$

Prvními úpravami tak převedeme hledaný komutátor na součet komutátorů:

$$[\hat{L}_j, \hat{L}^2]\psi = [\hat{L}_j, \sum_{k=1}^3 \hat{L}_k^2]\psi = \sum_{k=1}^3 [\hat{L}_j, \hat{L}_k^2]\psi = \sum_{k=1}^3 [\hat{L}_j, \hat{L}_k \hat{L}_k]\psi.$$

Nyní využijeme obecné pravidlo 2.25 pro práci se součinem operátorů v komutátoru:

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k^2]\psi = \sum_{k=1}^3 \left([\hat{L}_j, \hat{L}_k] \hat{L}_k + \hat{L}_k [\hat{L}_j, \hat{L}_k] \right) \psi.$$

Komutátor operátorů složek momentu hybnosti vyjádříme pomocí Levi-Civitova symbolu (tím se do výpočtu vnáší také sčítání přes index l):

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k^2]\psi = \sum_{k,l=1}^3 \left(i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{L}_l\hat{L}_k + \hat{L}_k i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{L}_l \right) \psi = i\hbar \sum_{k,l=1}^3 \left(\epsilon_{jkl}\hat{L}_l\hat{L}_k + \epsilon_{jkl}\hat{L}_k\hat{L}_l \right) \psi$$

Abychom ve výrazu výše dostali součin složek momentu hybnosti ve stejném pořadí, přeznačíme ve druhém členu indexy $k \rightarrow l$ a $l \rightarrow k$. Dále využijeme antisymetrie Levi-Civitova symbolu: $\epsilon_{jkl} = -\epsilon_{kjl}$

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k^2]\psi = i\hbar \sum_{k,l=1}^3 \left(\epsilon_{jkl}\hat{L}_l\hat{L}_k + \epsilon_{jlk}\hat{L}_l\hat{L}_k \right) \psi = i\hbar \sum_{k,l=1}^3 \left(\epsilon_{jkl}\hat{L}_l\hat{L}_k - \epsilon_{jkl}\hat{L}_l\hat{L}_k \right) \psi = 0.$$

Operátor složky momentu hybnosti a operátor velikosti momentu hybnosti spolu tedy komutují.

2.3.6 Vlastní čísla a vlastní funkce operátoru

Než se pustíme do zkoumání vlastních čísel a vlastních funkcí pro operátory na prostorech funkcí, připomeňme si tyto pojmy pro lineární zobrazení nad vektorovými prostory konečné dimenze tak, jak jste se s nimi potkali v lineární algebře. Jako ilustraci ukážeme význam těchto pojmů na jednoduchém lineárním zobrazení (homomorfismu) v rovině. Takové zobrazení je možné reprezentovat maticí, námi zkoumané zobrazení f bude:

$$x' = 2x + y$$

$$y' = x + 2y$$

Matice tohoto zobrazení má tvar:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

Spočtěme, jak se zobrazí vektory kanonické báze \vec{a} a \vec{b}

$$\vec{a}' = A\vec{a} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{b}' = A\vec{b} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

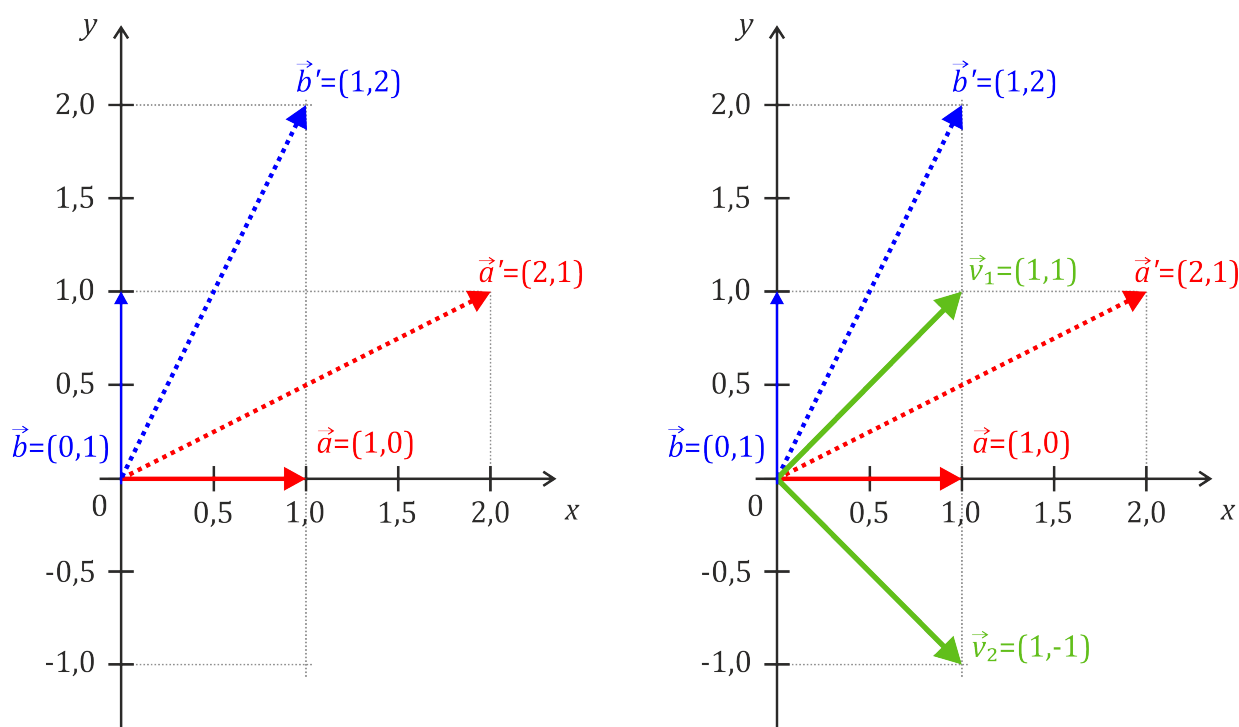
Geometrickou podobu transformace ukazuje obr. 2.1 vlevo. Nyní pojd'me nalézt vlastní vektory tohoto zobrazení. Připomeňme, že vlastní vektory \vec{v} jsou takové, které se zobrazí na svůj násobek, který označíme λ a říkáme mu vlastní číslo. Toto můžeme zapsat jako

$$A\vec{v} = \lambda\vec{v} \quad \Rightarrow \quad (A - \lambda\mathbb{E})\vec{v} = \vec{0}, \quad (2.28)$$

kde \mathbb{E} je jednotková matice. Získaný výraz představuje homogenní soustavu (dvou) lineárních rovnic, která má netriviální řešení právě tehdy, když je její determinant (zde determinant matice $A - \lambda\mathbb{E}$) nulový, tj. pokud platí

$$\det(A - \lambda\mathbb{E}) = 0,$$

což je vlastně rovnice pro hledání vlastních čísel λ . Dosad'me do této rovnice matici našeho zobrazení



Obrázek 2.1: Vlevo transformace vektorů kanonické báze, vpravo navíc zobrazení vlastních vektorů

$$\det(A - \lambda\mathbb{E}) = \det \begin{pmatrix} 2 - \lambda & 1 \\ 1 & 2 - \lambda \end{pmatrix} = (2 - \lambda)^2 - 1 = \lambda^2 - 4\lambda + 3 = (\lambda - 3)(\lambda - 1) = 0$$

Dostáváme dvě řešení $\lambda_1 = 3$ a $\lambda_2 = 1$. Tato dvě čísla jsou vlastními čísly našeho zobrazení f (resp. matice A). Počet vlastních čísel (pokud je počítáme včetně jejich násobnosti) je roven dimenzi prostoru. Vlastní vektory \vec{v}_1 a \vec{v}_2 nyní nalezneme tak, že obě vlastní čísla postupně dosadíme do rovnice 2.28 a soustavu vyřešíme

$$(A - \lambda_1\mathbb{E})\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{11} \\ v_{12} \end{pmatrix} = \vec{0} \Rightarrow \vec{v}_1 = \begin{pmatrix} v_{11} \\ v_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$(A - \lambda_2\mathbb{E})\vec{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{21} \\ v_{22} \end{pmatrix} = \vec{0} \Rightarrow \vec{v}_2 = \begin{pmatrix} v_{21} \\ v_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Protože se jedná o homogenní soustavu rovnic, je řešením vždy nejenom uvedený vektor, ale i jakýkoli jeho násobek, tj. tento vektor nám definuje podprostor vlastních vektorů,

keré přísluší danému vlastnímu číslu. Vlastní vektory jsou znázorněny v obrázku 2.1 vpravo. Protože matice našeho zobrazení byla symetrická, jsou vlastní vektory navzájem kolmé.

Hledání vlastních čísel a vlastních funkcí operátoru \hat{O} na prostoru funkcí \mathcal{H} budeme dělat analogicky. Napíšeme rovnici, která vyjadřuje skutečnost, že vlastní funkce se má daným operátorem zobrazit na svůj násobek

$$\hat{O}\psi = \lambda\psi, \quad (2.29)$$

jejímž řešením se určí jak neznámé vlastní funkce ψ , tak neznámá vlastní čísla λ . Protože náš prostor je vytvořen nad tělesem komplexních čísel, mohou vlastní čísla být obecně komplexní. Rovnice 2.29 má nejčastěji netriviální řešení¹⁷ pouze pro některé hodnoty parametru λ . Každá hodnota λ , pro kterou má 2.29 nenulové řešení, se nazývá **vlastní číslo** operátoru \hat{O} a příslušné řešení ψ se nazývá **vlastní funkce** operátoru \hat{O} . Množinu všech vlastních čísel λ nazýváme **spektr**em operátoru \hat{O} , může se jednat o spojitě vyplněný interval hodnot, případně několik oddělených intervalů, ale i diskrétní posloupnost jednotlivých čísel či kombinaci intervalů a diskrétních čísel, záleží na typu operátoru. Úplná klasifikace přesahuje zaměření tohoto textu.

Při pohledu na rovnici pro hledání vlastních čísel a funkcí(2.29) si můžeme snadno povšimnout skutečnosti, že k jednomu vlastnímu číslu λ nepatří jediná vlastní funkce ψ . Ale stejně jako jsme to viděli u dvoudimenzionálních vektorů, je-li nějaká funkce ψ řešením rovnice (2.29), je jejím řešením i každý její násobek $c\psi$, kde $c \in \mathbb{C}$, $c \neq 0$ (zde je důležitý předpoklad, že operátor \hat{O} je lineární). Tato nejednoznačnost nám ale nevadí. Naším konečným cílem totiž je určit kvantový stav částice. Již dříve však bylo zdůrazněno, že všechny funkce tvaru $c\psi$ odpovídají témuž stavu. Můžeme z nich například vybrat takové řešení (volbou čísla c), které splňuje normovací podmínku.

Degenerace

Tím, co bylo řečeno v předchozím odstavci, se ale otázka nejednoznačnosti vlastních funkcí příslušných jedinému vlastnímu číslu nevyčerpává. Už v lineární algebře jste poznali případy, kdy rovnici (2.29) vyhovuje pro nějaké konkrétní vlastní číslo λ více různých řešení, aniž by některá byla násobkem druhého. O takovém vlastním čísle jsme řekli, že je degenerované a k němu příslušující vlastní vektory tvoří podprostor celého prostoru.

Připomeňme si, co to znamená v našem případě. Předpokládejme, že platí

$$\hat{O}\psi_1 = \lambda\psi_1, \quad \hat{O}\psi_2 = \lambda\psi_2, \quad \psi_1 \neq \psi_2,$$

¹⁷Uvědomme si, že konstantně nulová funkce $\psi \equiv 0$ řeší tuto rovnici pro libovolnou hodnotu čísla λ . Takové řešení ale není fyzikálně zajímavé.

tj. že dvě různé funkce ψ_1 a ψ_2 patří k témuž vlastnímu číslu λ . Díky předpokladu, že operátor \hat{O} je lineární, však snadno zjistíme, že pro libovolná komplexní čísla c_1 a c_2 platí

$$\hat{O}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{O}\psi_1 + c_2\hat{O}\psi_2 = c_1\lambda\psi_1 + c_2\lambda\psi_2 = \lambda(c_1\psi_1 + c_2\psi_2)$$

neboli že každá funkce $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, která je lineární kombinací vlastních funkcí příslušejících k vlastnímu číslu λ , je rovněž vlastní funkcí \hat{O} příslušnou tomuto vlastnímu číslu λ . Tento poznatek můžeme snadno zobecnit i na případ více než dvou funkcí. Vidíme, že tedy vlastní funkce operátoru \hat{O} , které přísluší jednomu vlastnímu číslu, tvoří podprostor prostoru \mathcal{H} .

Ve shodě s lineární algebrou budeme v případě, že existují dvě nebo více lineárně nezávislých vlastních funkcí operátoru \hat{O} k témuž vlastnímu číslu λ , mluvit o *degeneraci vlastního čísla* λ . Vlastní číslo λ nazveme *degenerované vlastní číslo*. Stupeň degenerace vlastního čísla λ je roven dimenzi podprostoru jeho vlastních funkcí, tj. počtu lineárně nezávislých jemu příslušných vlastních funkcí.

Výpočtová úloha 2.7

Určete vlastní čísla a vlastní funkce operátoru hybnosti \hat{p} a operátoru kinetické energie \hat{T} . Nejprve uvažujte jednorozměrný případ, výsledek zobecněte pro případ třídimenziálního prostoru.

Řešení:

Vlastní čísla operátoru hybnosti:

V jednorozměrném případě budeme uvažovat operátor hybnosti ve tvaru $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$. Rovnice pro hledání vlastních čísel a vlastních funkcí má potom tvar:

$$-i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} = p_x \psi(x),$$

kde p_x je vlastní číslo operátoru \hat{p}_x . Jedná se o lineární diferenciální rovnici 1. řádu s konstantními koeficienty. Můžeme ji vyřešit například separací proměnných:

$$\int \frac{d\psi(x)}{\psi(x)} = - \int \frac{p_x}{i\hbar} dx \quad \Rightarrow \quad \psi(x) = A e^{\frac{ip_x x}{\hbar}},$$

kde $A \in \mathbb{C}$ je integrační konstanta (nebo prostě víme, že řešením tohoto typu rovnice je exponenciála).

Tím jsme našli vlastní funkce „matematicky“, ale jako fyzikálně přípustné budeme

uvažovat jen ty, které splňují podmínky kladené na vlnovou funkci. Je vidět, že spojitostí a spojitostí derivací je splněna. Pro normovatelnost funkcí je třeba, aby vlastní číslo p_x bylo reálné, protože jinak by exponenciála měla i reálnou část a byla neomezená. Za této podmínky si vyjádříme hustotu pravděpodobnosti

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \psi(x)^* \psi(x) = A^* e^{-\frac{ip_x x}{\hbar}} A e^{\frac{ip_x x}{\hbar}} = |A|^2$$

a vidíme, že způsobem, který jsme používali v předchozí kapitole, tyto funkce na celém \mathbb{R} normovat není možné. Zde uveďme jen, že vlnové funkce tohoto tvaru odpovídají volné částici a normují se odlišně, podrobněji se tím budeme zabývat v kapitole 3.10. Protože na hodnoty vlastních čísel p_x nemáme další podmínky (kromě reálnosti), není hybnost kvantována a spektrem tohoto operátoru jsou všechna reálná čísla.

Nyní pojdme tuto situaci rozšířit na trojrozměrný případ – v něm dostáváme soustavu tří parciálních diferenciálních rovnic:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z)}{\partial x} = p_x \psi(x, y, z), \quad (2.30)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z)}{\partial y} = p_y \psi(x, y, z), \quad (2.31)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z)}{\partial z} = p_z \psi(x, y, z). \quad (2.32)$$

Rovnice 2.30 nám ve shodě s jednorozměrným případem dává řešení:

$$\psi(x, y, z) = A(y, z) e^{\frac{ip_x x}{\hbar}}, \quad (2.33)$$

kde ovšem $A = A(y, z)$ není konstanta, ale obecně funkce proměnných y a z . Tento tvar nyní dosadíme do rovnice 2.31 a získáme:

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \left(A(y, z) e^{\frac{ip_x x}{\hbar}} \right) &= p_y A(y, z) e^{\frac{ip_x x}{\hbar}}, \\ -i\hbar \frac{\partial A(y, z)}{\partial y} &= p_y A(y, z) \Rightarrow A(y, z) = B(z) e^{\frac{ip_y y}{\hbar}}, \end{aligned} \quad (2.34)$$

kde $B = B(z)$ může stále ještě záviset na souřadnici z . Výsledky obou předcházejících rovnic nyní dosadíme do poslední rovnice 2.32:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \left(B(z) e^{\frac{ip_y y}{\hbar}} e^{\frac{ip_x x}{\hbar}} \right) = p_z B(z) e^{\frac{ip_y y}{\hbar}} e^{\frac{ip_x x}{\hbar}},$$

$$-i\hbar \frac{\partial B(z)}{\partial z} = p_z B(z) \Rightarrow B(z) = C e^{\frac{ip_z z}{\hbar}}, C \in \mathbb{C}. \quad (2.35)$$

Spojíme-li výsledky rovnic 2.33, 2.34 a 2.35, dostaneme výsledný tvar vlastních funkcí operátoru hybnosti:

$$\psi(x, y, z) = C e^{\frac{ip_x x}{\hbar}} e^{\frac{ip_y y}{\hbar}} e^{\frac{ip_z z}{\hbar}} = C e^{\frac{i\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}}, \quad (2.36)$$

kde jsme v posledním výrazu použili zápis pomocí skalárního součinu třírozměrných vektorů a $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ je vektor vlastních čísel operátoru hybnosti \hat{p} . Diskuze o přípustných hodnotách vlastních čísel p_x , p_y a p_z by byla úplně stejná jako v jedno-rozměrném případě.

Vlastní čísla operátoru kinetické energie:

Také zde se budeme nejdříve věnovat jednorozměrnému případu, ve kterém je operátor kinetické energie úměrný druhé derivaci podle souřadnice: $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$. Rovnice pro hledání vlastních čísel a vlastních funkcí má potom tvar:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = T \psi(x), \quad (2.37)$$

kde T je vlastní číslo operátoru \hat{T} . Řešení této rovnice (homogenní lineární diferenciální rovnice s konstantními koeficienty) budeme hledat ve tvaru $\psi(x) = C e^{ikx}$, $C \in \mathbb{C}$, což vede po dosazení do 2.37 na podmínku:

$$k = \pm \sqrt{\frac{2mT}{\hbar^2}}.$$

Vlastní funkce operátoru kinetické energie mají tedy tvar:

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \text{ kde } A, B \in \mathbb{C}. \quad (2.38)$$

Vidíme, že opět vlastní čísla T musejí být reálná a navíc nezáporná. Ke každé přípustné hodnotě T jsme dostali dvě lineárně nezávislé vlastní vlnové funkce, tj. každé vlastní číslo je dvakrát degenerované.

Ještě si můžeme povšimnout, že vlastní funkce \hat{T} jsou velmi podobné vlastním funkcím \hat{p} . Napišme si, jaký vztah by musel platit mezi vlastními čísly obou operátorů, aby byly vlnové funkce shodné:

$$\pm k = \frac{p_x}{\hbar} \Rightarrow \pm \sqrt{\frac{2mT}{\hbar^2}} = \frac{p_x}{\hbar} \Rightarrow T = \frac{p_x^2}{2m}, \quad (2.39)$$

což je vztah, který mezi hodnotou kinetické energie a hybnosti platí v klasické fyzice.

Ve třídimenziálním případě přechází druhá derivace podle souřadnice v Laplaceův operátor a rovnice pro hledání vlastních čísel má tvar:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial z^2} \right) = T\psi(x, y, z). \quad (2.40)$$

Řešení můžeme hledat opět ve tvaru „rovinné vlny“ $\psi(x, y, z) = Ce^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, kde konstanta $C \in \mathbb{C}$. Dosazením tohoto řešení do rovnice 2.40 dostáváme analogicky jednorozměrnému případu podmínku:

$$\sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = |\vec{k}| = \pm \sqrt{\frac{2mT}{\hbar^2}}.$$

Vidíme, že jedné konkrétní hodnotě vlastního čísla T odpovídají všechny vlastní funkce, jejichž vektor \vec{k} má správnou velikost, bez ohledu na to kam míří. Stupeň degenerace vlastního čísla T je tedy „nekonečný“. Mezi vlastním číslem T a vlastními čísly p_x , p_y a p_z opět platí klasický vztah $T = \frac{|\vec{p}|^2}{2m}$.

Všimněte si, že všechny vlastní funkce odpovídají rovinným vlnám. Získané výsledky se obvykle interpretují tak, že tyto vlnové funkce odpovídají volné částici pohybující se s danou velikostí hybnosti daným směrem. Uvědomte si, že volná částice nemění svoji hybnost. Vzhledem k tomu, že pokud v jednodimenziálním případě máme zadanou kinetickou energii, máme zadanou velikost hybnosti, ale částice se může pohybovat dvěma směry, proto nám vyšla dvojnásobná degenerace vlastního čísla. Ve třídimenziálním případě je směrů ještě více. Vzpomeňte si na tyto výsledky, až budete číst následující podkapitulu.

Vlastní čísla a funkce hermitovských operátorů

Dokažme si dvě důležitá tvrzení o vlastních číslech hermitovských operátorů.

Tvrzení: Hermitovské operátory mají **reálná** vlastní čísla.

Důkaz je vcelku přímočarý. Vezměme vlastní číslo λ operátoru \hat{O} a k němu příslušející vlastní funkci funkce ψ , tj. platí $\hat{O}\psi = \lambda\psi$, a tuto funkci dosadíme za obě funkce do definice hermitovského operátoru (2.13), tj. máme výraz $\langle \psi | \hat{O}\psi \rangle$, který upravíme dvojnásobem.

1. S využitím toho, že se jedná o vlastní funkci dostaneme rovnost

$$\langle \psi | \hat{O}\psi \rangle = \langle \psi | \lambda\psi \rangle = \lambda \langle \psi | \psi \rangle.$$

2. Pokud nejprve využijeme hermitovost operátoru \hat{O} a potom teprve skutečnosti, že ψ je jeho vlastní funkce, dostaneme

$$\langle \psi | \hat{O}\psi \rangle = \langle \hat{O}\psi | \psi \rangle = \langle \lambda\psi | \psi \rangle = \lambda^* \langle \psi | \psi \rangle.$$

Obě rovnosti vycházejí ze stejného vztahu, jejich výsledky se tedy musí rovnat, tj. platí

$$\lambda \langle \psi | \psi \rangle = \lambda^* \langle \psi | \psi \rangle.$$

Protože funkce ψ je vlastní funkce, není konstantně nulová, a proto je skalární součin (ψ, ψ) nenulový (pozitivní definitnost skalárního součinu) a můžeme jím poslední rovnost vydělit. Dostáváme

$$\lambda = \lambda^*,$$

což znamená, že λ je reálné číslo.

Tvrzení: Libovolné dvě vlastní funkce téhož hermitovského operátoru, jimž přísluší navzájem různá vlastní čísla, jsou navzájem kolmé.

Důkaz je velmi podobný jako důkaz tvrzení uvedeného výše. Uvažujme dvě vlastní vlnové funkce, které přísluší různým vlastním číslům, tj.

$$\hat{O}\psi_1 = \lambda_1\psi_1, \quad \hat{O}\psi_2 = \lambda_2\psi_2, \quad \lambda_1 \neq \lambda_2.$$

Vydeme opět z definice hermitovského operátoru (2.13), ze které dostaneme rovnost

$$\langle \psi_1 | \hat{O}\psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \lambda_2\psi_2 \rangle = \lambda_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle.$$

Pokud nejprve využijeme hermitovosti operátoru \hat{O} , dostáváme

$$\langle \psi_1 | \hat{O}\psi_2 \rangle = \langle \hat{O}\psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \lambda_1\psi_1 | \psi_2 \rangle = \lambda_1^* \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle,$$

kde jsme v posledním kroku využili toho, že vlastní čísla hermitovského operátoru jsou reálná. Obě rovnosti vycházejí ze stejného výrazu, jejich pravé strany se tedy musí rovnat

$$\lambda_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle,$$

$$(\lambda_2 - \lambda_1) \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0,$$

a protože nenulovost závorky v poslední rovnosti máme zaručenou předpokladem různých vlastních čísel, musí nutně platit

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0,$$

tj. funkce ψ_1 a ψ_2 jsou navzájem kolmé.

Předchozí tvrzení nás vede k myšlence využít vlastní funkce hermitovského operátoru \hat{O} ke konstrukci ortogonální báze prostoru \mathcal{H} . V případě, že operátor \hat{O} nemá degenerovaná vlastní čísla je vše jednoduché. Pokud k degeneraci dochází, pak v každém podprostoru vlastních funkcí příslušejících jednotlivým vlastním číslům λ_j zvolíme libovolné ortonormální báze (nemáme zde žádná omezení¹⁸, jaké funkce zvolit) a dohromady budou tyto vektory tvořit ortonormální bázi celého prostoru.

Pokud se nad tím zamyslíte pořádně, tak předchozí úvahy ukazují, že z vlastních funkcí lze zkonstruovat množinu lineárně nezávislých navzájem kolmých funkcí. Ale aby tato množina byla bází prostoru \mathcal{H} , je třeba, aby její lineární obal byl roven \mathcal{H} , tj. jinými slovy aby opravdu každý prvek \mathcal{H} šel vyjádřit jako lineární kombinace prvků této množiny. Toto je důsledkem separability a úplnosti \mathcal{H} , ale podrobnější diskuze překračuje zaměření tohoto textu.

2.4 Měření v kvantové mechanice a relace neurčitosti

Než se pustíme do diskuze toho, jak zakomponovat měření do matematiky kvantové mechaniky, připomeňme si, že v předchozí kapitole jsme zjistili, že množina všech vlastních funkcí ψ_n operátoru \hat{F} tvoří v prostoru \mathcal{H} bázi, to znamená že každou funkci $\psi \in \mathcal{H}$ lze jednoznačně vyjádřit jako lineární kombinaci $\psi = \sum_n c_n \psi_n$.

Postulát o měření v kvantové mechanice

Množina vlastních čísel operátoru \hat{F} koresponduje s množinou možných hodnot veličiny F naměřených v jednotlivých aktech experimentu.

Jestliže je vlnová funkce ψ normovaná, tj. platí $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, koresponduje skalární součin $\langle \psi | \hat{F} \psi \rangle$ se střední hodnotou $\langle F \rangle_\psi$ veličiny F ve stavu ψ vyhodnocenou z dostatečně velkého počtu jednotlivých aktů experimentu.

Tento postulát je spojovacím můstkem mezi teorií a experimentem tím, že dává do souvislosti teoreticky vypočtená vlastní čísla operátoru \hat{F} (tedy část formálního aparátu kvantové mechaniky) s číselnými hodnotami veličiny F naměřenými v experimentu (tj. s tím, co by nám ukázal hypotetický „měřák“ dané veličiny na svém „displeji“). Jinými slovy, nikdy nelze naměřit v jednom aktu měření veličiny F číselnou hodnotu, která by nebyla shodná s některým vlastním číslem F_n .

¹⁸V některých případech (viz např. kapitola 7.3.2 může být volba báze podprostoru vlastních funkcí daného vlastního čísla určena dalšími požadavky vyplývajícími z úlohy, kterou řešíme.

Podívejme se teď podrobněji na druhou část postulátu. Představuje další spojovací můstek mezi teorií a experimentem – tvrdí, že skalární součin $\langle \psi | \hat{F}\psi \rangle$ spočítaný v rámci teorie odpovídá střední (průměrné) hodnotě (označujeme ji $\langle F \rangle_\psi$) veličiny F získané v dostatečně početné sadě měření veličiny F u částice ve stavu popsaném vlnovou funkcí ψ .

Vzorec pro střední hodnotu fyzikální veličiny F lze upravit na praktičtější tvar

$$\langle F \rangle_\psi = \frac{\langle \psi | \hat{F}\psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (2.41)$$

který je platný pro jakoukoliv funkci ψ (tedy i nenormovanou¹⁹).

Zkusme spočítat **střední hodnotu** veličiny F ve **stavu popsaném vlastní funkcí** ψ_n operátoru \hat{F} (vlastní číslo, které přísluší této vlastní funkci, označíme F_n), tj. platí $\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n$:

$$\langle F \rangle_{\psi_n} = \frac{\langle \psi_n | \hat{F}\psi_n \rangle}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle} = \frac{\langle \psi_n | F_n\psi_n \rangle}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle} = F_n \frac{\langle \psi_n | \psi_n \rangle}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle} = F_n.$$

Analogickým způsobem dostaneme i střední hodnotu F^2 ve tvaru

$$\langle F^2 \rangle_{\psi_n} = \frac{\langle \psi_n | \hat{F}^2\psi_n \rangle}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle} = \frac{\langle \psi_n | F_n^2\psi_n \rangle}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle} = F_n^2 \frac{\langle \psi_n | \psi_n \rangle}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle} = F_n^2$$

a z těchto dvou výsledků snadno určíme střední kvadratickou odchylku (δF)

$$(\delta F)^2 = \langle (F - \langle F \rangle_{\psi_n})^2 \rangle_{\psi_n} = \langle F^2 \rangle_{\psi_n} - \langle F \rangle_{\psi_n}^2 = F_n^2 - F_n^2 = 0.$$

Tyto výsledky skutečně znamenají, že pokud budu ve stavu ψ_n měřit fyzikální veličinu F , naměřím vždy hodnotu F_n (s nulovou odchylkou a rovnou příslušnému vlastnímu číslu). Říkáme, že vlastní funkce ψ_n popisuje stav částice, v němž má veličina F tzv. **ostrou hodnotu**, tj. jedná se o **stav s ostrou hodnotou**.

Vraťme se nyní znovu k principu superpozice. Zkusme **určit střední hodnotu** veličiny F ve stavu popsaném vlnovou funkcí ψ , která je **lineární kombinací dvou vlastních funkcí** operátoru \hat{F} , tj. $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, kde c_1 a c_2 jsou komplexní konstanty. Pro jednoduchost předpokládejme, že funkce ψ_1 , ψ_2 i ψ jsou normované a funkce ψ_1 a ψ_2 na sebe kolmé.

$$\langle F \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{F}\psi \rangle = \langle c_1\psi_1 + c_2\psi_2 | \hat{F}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) \rangle$$

¹⁹Pokud si vzpomenete na vztah pro výpočet normovací konstanty 2.7, vidíme, že do vztahu pro střední hodnotu byl vlastně doplněn kvadrát velikosti normovací konstanty. Tím došlo k normování původně nenormované vlnové funkce.

Využijeme linearity operátoru \hat{F} a linearity skalárního součinu

$$\begin{aligned}\langle F \rangle_\psi &= \langle c_1\psi_1 + c_2\psi_2 | c_1\hat{F}\psi_1 + c_2\hat{F}\psi_2 \rangle = \langle c_1\psi_1 + c_2\psi_2 | c_1F_1\psi_1 + c_2F_2\psi_2 \rangle = \\ &= c_1^*c_1F_1 \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle + c_1^*c_2F_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + c_2^*c_1F_1 \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle + c_2^*c_2F_2 \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle.\end{aligned}$$

A s využitím ortonormality funkcí ψ_1 a ψ_2 dostaneme

$$\langle F \rangle_\psi = |c_1|^2 F_1 + |c_2|^2 F_2.$$

Tento vztah nám ukazuje význam komplexních konstant c_1 a c_2 v lineární kombinaci:

Je-li stav popsán normovanou vlnovou funkcí $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, kde ψ_1 a ψ_2 jsou normované a navzájem kolmé vlastní funkce operátoru \hat{F} a c_1 a c_2 komplexní konstanty, naměříme vlastní hodnotu F_1 s pravděpodobností $|c_1|^2$ a hodnotu F_2 s pravděpodobností $|c_2|^2$.

Řekněme to ještě jinými slovy: Vlnová funkce ψ_1 popisuje stav částice, který je charakteristický tím, že při měření²⁰ veličiny F se získá její přesná hodnota F_1 , tj. že při libovolném počtu opakovaných měření vždy vyjde F_1 a že ve stavu ψ_2 má veličina F v tomtéž smyslu přesnou hodnotu F_2 . Potom platí, že uvedeme-li částici do stavu $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, dostaneme při mnohokrát opakovaném měření²¹ veličiny F střídavě pouze hodnoty F_1 a F_2 (žádné jiné) a jejich relativní četnosti budou shodné s čísly $|c_1|^2$ a $|c_2|^2$.

Není obtížné si uvědomit, že pro nenormovanou vlnovou funkci by platilo

$$\langle F \rangle_\psi = \frac{|c_1|^2 F_1 + |c_2|^2 F_2}{|c_1|^2 + |c_2|^2} = \frac{|c_1|^2}{|c_1|^2 + |c_2|^2} F_1 + \frac{|c_2|^2}{|c_1|^2 + |c_2|^2} F_2$$

a zobecnit uvedené závěry na případ kombinace více navzájem kolmých vlastních vlnových funkcí

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n, \quad \langle F \rangle_\psi = \frac{\sum_n |c_n|^2 F_n}{\sum_n |c_n|^2}, \quad (2.42)$$

odkud vidíme, že relativní četnost či pravděpodobnost naměření hodnoty F_n je dána výrazem $\frac{|c_n|^2}{\sum_n |c_n|^2}$, jehož jmenovatel je pro normovanou funkci ψ roven jedné.

Další součástí postulátu o měření je popis toho, **jak měření ovlivňuje stav částice**

²⁰Tento vztah by se také dal chápat tak, že se částice s pravděpodobností $|c_1|^2$ nalézá ve stavu ψ_1 a s pravděpodobností $|c_2|^2$ ve stavu ψ_2 . Vzhledem k tomu, že v kvantové mechanice nelze mluvit o tom, kde částice je, pokud ji neměříme, tak je lepší spíše mluvit o naměření dané hodnoty, než o tom, že částice byla v nějakém stavu.

²¹Pozor, musíme měřit vždy částici ve stavu $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, tj. u každého měření se ujistit, že částice je v tomto stavu.

Jestliže provedeme měření veličiny F u částice popsané vlnovou funkcí ψ s výsledkem F_n , změní měření stav částice na stav popsaný vlastní vlnovou funkcí ψ_n operátoru \hat{F} , která přísluší naměřenému vlastnímu číslu F_n .

Tedy bez ohledu na to, jak komplikovaný byl stav částice před měřením, po měření již musíme k popisu stavu částice používat příslušnou vlastní funkci. Tomuto procesu se říká **redukce vlnové funkce**.²² Tato skutečnost se využívá k tomu, abychom „připravili“ částice do stavu, který je popsán známou vlnovou funkcí a o měření se uvažuje jako o „filtru“.

Úkol 2.15 Označme si 3 vlastní vektory Hamiltonova operátoru \hat{H} jako ψ_1, ψ_2, ψ_3 . Platí pro ně

$$\hat{H}\psi_1 = E\psi_1 \quad \hat{H}\psi_2 = 4E\psi_2 \quad \hat{H}\psi_3 = 7E\psi_3,$$

kde E je konstanta. Uvažujme obecný stav

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_1 + \sqrt{\frac{2}{3}}(\psi_2 + \psi_3).$$

Jaké energie můžeme ve stavu ψ naměřit? S jakou pravděpodobností? Určete střední hodnotu energie ve stavu ψ . V jakém stavu se bude systém nacházet po měření, ve kterém naměříme energii $4E$?

Úkol 2.16

1. 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 systémů před a po měření?
2. Máme systém v neznámém stavu. Změříme veličinu A a dostaneme hodnotu A_1 . Ihned poté toto měření zopakujeme. Jakou hodnotu naměříme?
3. Máme k dispozici jediný systém nacházející se v neznámém stavu popsaném vlnovou funkcí ψ . Jak je možné tuto funkci určit?

²²V některé literatuře najdete také termín kolaps vlnové funkce, který ale někdy vede k představě, že při měření vlnová funkce z kolabuje a po měření již žádnou vlnovou funkci nemáme. Pojmenování redukce je výstižnější, protože před měřením byl stav jistě opsán vlnovou funkcí rozložitelnou na lineární kombinaci vlastních funkcí a měření ji „zredukovalo“ jen na jeden člen.

2.4.1 Vztah mezi komutativitou a společnými vlastními funkcemi

Velmi důležitá je souvislost mezi komutativitou dvou operátorů a jejich vlastními funkcemi, kterou popisuje následující tvrzení:

Dva operátory \hat{F} a \hat{G} komutují právě tehdy, když lze zkonstruovat společný systém jejich vlastních funkcí.

Nejprve si dokažme, že **pokud operátory mají společné vlastní funkce, potom komutují**. Uvažujme dvě fyzikální veličiny F a G , jimž přísluší operátory \hat{F} a \hat{G} , a předpokládejme, že mají oba operátory společnou množinu vlastních funkcí ψ_n , tj. že platí

$$\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n, \quad \hat{G}\psi_n = G_n\psi_n.$$

Budeme-li aplikovat na obě strany první rovnice operátor \hat{G} , dostaneme

$$\hat{G}\hat{F}\psi_n = \hat{G}(F_n\psi_n) = F_n\hat{G}\psi_n = F_nG_n\psi_n.$$

Jestliže naopak zapůsobíme operátorem \hat{F} na obě strany druhé rovnice, dostaneme podobným způsobem výsledek

$$\hat{F}\hat{G}\psi_n = \hat{F}(G_n\psi_n) = G_n\hat{F}\psi_n = G_nF_n\psi_n.$$

Odečteme-li nyní první rovnici od druhé, dostaneme díky komutativitě násobení čísel na pravých stranách

$$(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})\psi_n = [\hat{F}, \hat{G}]\psi_n = 0.$$

V tuto chvíli ještě nemůžeme říci, že komutátor operátorů \hat{F} a \hat{G} je nulový. K tomu nestačí, že je nulový, pokud působí na vlastní funkce, ale musíme znát výsledek jeho působení na libovolnou funkci.

Víme, že libovolnou funkci ψ můžeme vyjádřit ve tvaru lineární kombinace vlastních funkcí $\psi = \sum_n c_n\psi_n$, a protože $[\hat{F}, \hat{G}]$ je lineární operátor (neboť \hat{F} a \hat{G} jsou lineární operátory), musí také platit, že

$$[\hat{F}, \hat{G}]\psi = [\hat{F}, \hat{G}] \sum_n c_n\psi_n = \sum_n c_n[\hat{F}, \hat{G}]\psi_n = 0.$$

Ted' jsme teprve ukázali, že je splněna komutační relace

$$[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{0}. \tag{2.43}$$

Z toho plyne dokazované tvrzení: Mají-li dva operátory společný systém vlastních funkcí, navzájem spolu komutují.

Ted' se budeme zabývat obráceným tvrzením, tedy zda **komutující operátory mají společný systém vlastních funkcí**. Předpokládejme tedy, že pro operátory \hat{F} a \hat{G} platí komutační relace $[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{0}$. Označme jako funkce ψ_n vlastní funkce operátoru \hat{F} , pro které tedy platí $\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n$. Aplikujme na obě strany tohoto vztahu operátor \hat{G}

$$\hat{G}\hat{F}\psi_n = \hat{G}F_n\psi_n$$

a na levé straně využijme komutativity obou operátorů a na pravé linearity operátoru \hat{G}

$$\hat{F}\hat{G}\psi_n = F_n\hat{G}\psi_n.$$

Dostáváme vztah, ze kterého je zřejmé, že výraz $\hat{G}\psi_n$ je vlastní funkcí operátoru \hat{F} a přísluší také vlastnímu číslu F_n . Pokud je toto vlastní číslo nedegenerované, potom víme, že vlastní funkce jsou si vzájemně úměrné, liší se jen vynásobením konstantou (konstantu označme G_n)

$$\hat{G}\psi_n \sim \psi_n \quad \Rightarrow \quad \hat{G}\psi_n = G_n\psi_n.$$

Tato rovnice nám ale říká, že funkce ψ_n je vlastní funkcí operátoru \hat{G} .

Posuďme i poněkud složitější případ, kdy vlastní číslo F_n je d_n -násobně degenerované. Uvažujme d_n vlastních funkcí $\psi_{n\alpha}$, pro které platí

$$\hat{F}\psi_{n\alpha} = F_n\psi_{n\alpha}, \quad (2.44)$$

jsou normované a navzájem ortogonální, tj. $\langle \psi_{n\alpha} | \psi_{n\beta} \rangle = \delta_{\alpha\beta}$, pro $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, d_n$. V tomto případě jsou vlastními funkcemi k vlastnímu číslu F_n operátoru \hat{F} nikoliv jen funkce $\psi_{n\alpha}$ (a jejich násobky), ale všechny funkce tvaru

$$\Phi_n = \sum_{\alpha} c_{\alpha}\psi_{n\alpha}$$

tvůřící d_n -dimenzionální podprostor prostoru \mathcal{H} (funkce $\psi_{n\alpha}$ tvoří ortonormální bázi tohoto podprostoru).

Provedeme nyní s d_n rovnicemi 2.44 stejné kroky, jako v předchozím případě, tj. zapůsobíme na ně operátorem \hat{G}

$$\hat{G}\hat{F}\psi_{n\alpha} = \hat{G}F_n\psi_{n\alpha}.$$

a využijeme komutativity operátorů \hat{F} a \hat{G} a linearity operátoru \hat{G}

$$\hat{F}\hat{G}\psi_{n\alpha} = F_n\hat{G}\psi_{n\alpha}.$$

Podle této rovnice je sice každá z funkcí $\hat{G}\psi_{n\alpha}$ vlastní funkcí operátoru \hat{F} , ale zároveň nemusí být nutně vlastní funkcí operátoru \hat{G} , neboť nemusí být jen prostým násobkem $\psi_{n\alpha}$, ale lineární kombinací všech $\psi_{n\alpha}$, tj. víme, že platí

$$\hat{G}\psi_{n\alpha} = \sum_{\beta} g_{\alpha\beta}\psi_{n\beta}. \quad (2.45)$$

Funkce $\psi_{n\alpha}$ tvořící bázi podprostoru vlastních funkcí \hat{F} jsme vybrali náhodně. Uvědomme si, že by koeficienty $g_{\alpha\beta}$ ve vztahu 2.45 tvořili diagonální matici, potom by funkce $\psi_{n\alpha}$ byly vlastními funkcemi i operátoru \hat{G} . Námi hledaná báze je tedy taková, ve které dojde k diagonalizaci matice koeficientů $g_{\alpha\beta}$. Algebraickými metodami lze ukázat, že taková báze existuje.

Můžeme tedy shrnout, že komutují-li dva operátory \hat{F} a \hat{G} , pak lze vždy zkonstruovat společný systém jejich vlastních funkcí. Neznamená to tedy automaticky, že každá vlastní funkce jednoho z operátorů je i vlastní funkcí druhého.

Právě dokázané tvrzení nám odhaluje fyzikální pozadí komutačních vlastností operátorů fyzikálních veličin. Pokud operátory \hat{F} a \hat{G} dvou fyzikálních veličin navzájem komutují, tak mají společné vlastní funkce. To znamená to, že existují stavy, v nichž se při měření naměří pro obě veličiny F i G současně ostré hodnoty, což můžeme vyjádřit i tak, že jsou tam obě dvě veličiny „dobře definované“.

V opačném případě, kdy spolu operátory nekomutují, neexistují jejich společné vlastní funkce, tj. ani stavy, ve kterých by obě veličiny zároveň měly ostrou hodnotu. Říkáme, že příslušné dvě veličiny nejsou principiálně současně měřitelné.

Pod současnou měřitelností si nejspíše představíme něco jako měření obou veličin v témže čase a s minimální možnou chybou. V rámci klasické fyziky na tom není nic zvláštního, protože v ní předpokládáme, že měření nijak neovlivní stav částice. Nepřesnosti, které se při měření vždy vyskytují, sice není možné v reálném experimentu úplně odstranit, ale pečlivým úsilím a přesnými algoritmy je lze minimalizovat. Podstatné je, že v rámci teorie není žádné omezení na přesnost měření, ať měříme jednu nebo více veličin.

Kvantová mechanika však je v tomto ohledu zřetelně odlišná. Připomeňme, co jsme již zjistili:

- Stav systému je měřením ovlivněn.
- Také jsme v předchozím textu zjistili, že pro každou veličinu existují tzv. stavy s ostrou hodnotou (vlastní stavy), ve kterých je hodnota dané veličiny „dobře definována“. Jinými slovy v těchto stavech víme s určitostí, jakou hodnotu naměříme.
- Ve všech ostatních stavech máme vždy několik možných hodnot výsledků měření a opakovaná měření mají nenulovou neurčitost (chybu měření).
- Další věcí, která již také byla zmíněna a musíme ji vzít v úvahu, je skutečnost, že v rámci kvantové mechaniky se nesnažíme odpovídat na otázky typu, jak věci jsou (kde částice je, jaká je hodnota dané veličiny), ale pouze na otázky typu „co naměříme“ (případně co bychom naměřili, kdybychom měřili).

Jak toto všechno obsáhnout v případě, že nás zajímají dvě veličiny zároveň? V předchozím textu jsme dokázali, že dva operátory mají společný systém vlastních funkcí právě tehdy, když komutují. Z toho plyne, že pokud dvě veličiny komutují, tak jejich operátory mají společné vlastní funkce, tj. existují stavy, ve kterých jsou obě veličiny „dobře definované“. Pokud ale veličiny nekomutují, tak tyto společné vlastní funkce neexistují, což je příčinou toho, že hodnoty obou veličin nemůžeme „znát“ současně.

2.4.2 Relace neurčitosti

V této části budeme předchozí úvahy kvantifikovat. Nejprve ale jeden krátký přípravný úkol.

Úkol 2.17 Uvažujme dva hermitovské operátory \hat{A} a \hat{B} . Připomeňme, že jejich komutátor $[\hat{A}, \hat{B}]$ je také operátor. Rozmyslete si, zda se také jedná o hermitovský operátor, případně jak ho „upravit“, abychom hermitovský operátor dostali.

Uvažujme dvě fyzikální veličiny A a B , pro jejichž operátory \hat{A} a \hat{B} platí komutační relace

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{K}. \quad (2.46)$$

Abychom mohli sledovat odchylky hodnot veličin A a B kolem jejich středních hodnot $\langle A \rangle_\psi$ a $\langle B \rangle_\psi$, zavedeme operátory těchto odchylek

$$\widehat{\Delta A} = \hat{A} - \langle A \rangle \hat{\mathbb{E}}, \quad \widehat{\Delta B} = \hat{B} - \langle B \rangle \hat{\mathbb{E}}. \quad (2.47)$$

Pokud si uvědomíme, že střední hodnoty $\langle A \rangle_\psi$ a $\langle B \rangle_\psi$ jsou čísla a $\hat{\mathbb{E}}$ jednotkový operátor, snadno si ověříme, že pro operátory $\widehat{\Delta A}$ a $\widehat{\Delta B}$ platí stejné komutační relace jako pro \hat{A} a \hat{B} , tedy

$$[\widehat{\Delta A}, \widehat{\Delta B}] = i\hat{K}. \quad (2.48)$$

Za měřítko velikosti chyb při měření veličin A a B zvolíme jejich střední kvadratické odchylky δA a δB (tzv. **neurčitosti fyzikálních veličin A a B**) definované takto:

$$\begin{aligned} (\delta A)^2 &= \langle (\widehat{\Delta A})^2 \rangle_\psi = \langle \psi | (\widehat{\Delta A})^2 \psi \rangle, \\ (\delta B)^2 &= \langle (\widehat{\Delta B})^2 \rangle_\psi = \langle \psi | (\widehat{\Delta B})^2 \psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Následující výpočet probíhá tak, že vezmeme speciálně zkonstruovanou vlnovou funkci²³ a spočítáme její „velikost“. Díky pozitivní definitnosti skalárního součinu víme, že musí být nezáporná. A potom budeme tuto nerovnici upravovat až na tvar, ve kterém budou vystupovat hledané neurčitosti.

Nejprve napíšeme vlnovou funkci Ψ

$$\Psi = (\alpha\widehat{\Delta A} - i\widehat{\Delta B})\psi,$$

kde α je libovolné reálné číslo. Spočítejme skalární součin

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \langle (\alpha\widehat{\Delta A} - i\widehat{\Delta B})\psi | (\alpha\widehat{\Delta A} - i\widehat{\Delta B})\psi \rangle \geq 0, \quad (2.50)$$

o kterém víme, že je nenulový pro libovolnou reálnou hodnotu α . Skalární součin roznásobíme:

$$\alpha^2 \langle \widehat{\Delta A}\psi | \widehat{\Delta A}\psi \rangle - i\alpha \langle \widehat{\Delta A}\psi | \widehat{\Delta B}\psi \rangle + i\alpha \langle \widehat{\Delta B}\psi | \widehat{\Delta A}\psi \rangle + i(-i) \langle \widehat{\Delta B}\psi | \widehat{\Delta B}\psi \rangle \geq 0.$$

Při dalších úpravách využijeme toho, že operátory $\widehat{\Delta A}$ a $\widehat{\Delta B}$ jsou hermitovské

$$\alpha^2 \langle \psi | (\widehat{\Delta A})^2 \psi \rangle - i\alpha \langle \psi | \widehat{\Delta A}\widehat{\Delta B}\psi \rangle + i\alpha \langle \psi | \widehat{\Delta B}\widehat{\Delta A}\psi \rangle + \langle \psi | (\widehat{\Delta B})^2 \psi \rangle \geq 0.$$

Po porovnání s definicemi neurčitostí (2.49) vidíme, že první a poslední člen obsahuje neurčitost. Dále druhý a třetí člen můžeme spojit v jeden (díky linearitě skalárního součinu)

$$\alpha^2 (\delta A)^2 - i\alpha \langle \psi | [\widehat{\Delta A}\widehat{\Delta B} - \widehat{\Delta B}\widehat{\Delta A}] \psi \rangle + (\delta B)^2 \geq 0 \quad (2.51)$$

a uplatnit znalost komutátoru (2.48)

$$\alpha^2 (\delta A)^2 + \alpha \langle K \rangle_\psi + (\delta B)^2 \geq 0. \quad (2.52)$$

Tím jsme dospěli ke kvadratické nerovnosti, která musí být splněna pro všechny hodnoty reálné proměnné α . To je možné jen tehdy, je-li diskriminant kvadratického trojčlenu na levé straně nulový nebo záporný²⁴, tj. dostáváme podmínku

$$(\langle K \rangle_\psi)^2 - 4(\delta A)^2(\delta B)^2 \leq 0, \quad (2.53)$$

která po malé úpravě dává tzv. *relace neurčitosti*

$$\delta A \delta B \geq \frac{1}{2} |\langle K \rangle_\psi|. \quad (2.54)$$

²³Je tedy nutné vědět „odkud začít“. Alternativní odvození lze nalézt např. ve Skálově učebnici.

²⁴Příslušná kvadratická rovnice by pak neměla reálný kořen, nebo měla pouze jeden (dvojnásobný) reálný kořen.

Tento vzorec platí obecně pro libovolné dvě fyzikální veličiny A a B .

Pojďme prozkoumat, co nám relace neurčitosti říkají v některých konkrétních případech a pro vybrané dvojice fyzikálních veličin. První, čeho je dobré si povšimnout, je skutečnost, že pro komutující operátory je pravá strana nulová a celá relace neurčitosti se „scvrkne“ na triviální tvrzení, že součin dvou nezáporných čísel je nezáporný.

Je-li střední hodnota komutátoru \hat{K} příslušných dvou veličin v daném stavu nenulová, pak je součin $\delta A \delta B$ kladný, takže obě násobená čísla musejí být nenulová. Pokud chceme mít neurčitosti co nejmenší (tj. „jít s přesností až na hranici, kam nás relace neurčitosti pustí“), tak bude ve vztahu 2.54 rovnost. Odtud jasně vidíme, že pokud budeme zmenšovat neurčitost jedné veličiny (tj. „měřit ji přesněji“), tak se nám bude zvětšovat neurčitost druhé veličiny. Pokud bychom chtěli mít jednu veličinu určenu „hodně přesně“, tj. její neurčitost se bude blížit nule, potom neurčitost druhé veličiny poroste nade všechny meze. V limitním případě, kdy první veličinu známe úplně přesně, tj. částice se nachází ve stavu s ostrou hodnotou první veličiny a má tedy nulovou neurčitost, pak relace neurčitosti říká, že neurčitost druhé veličiny je nekonečná, tj. řečeno laicky – nevíme o ní vůbec nic.

Předchozí text velmi pěkně vynikne např. u volné částice (podrobnosti viz kapitola 3.10). Pro jednoduchost uvažujme jednodimenzionální případ. Našimi veličinami s nekomutujícími operátory budou poloha a hybnost. Jestliže je částice ve stavu s ostrou hodnotou hybnosti, pak je v nějakém konkrétním čase popsána vlnovou funkcí $\psi = N \exp\left(-i\frac{(p_x x)}{\hbar}\right)$. Hustota pravděpodobnosti nalezení takové částice je

$$\rho = |\psi|^2 = |N|^2 = \text{konst.},$$

tj. konstantní. Takže víme zcela přesně, s jakou hybností se částice pohybuje ($\delta p = 0$), ale vůbec nevíme, kde je (pravděpodobnost jejího nalezení je stejná v celém prostoru). Podobně to dopadne, pokud bychom chtěli částici velmi dobře lokalizovat, tj. její stav by byl popsán δ -funkcí. Pak víme přesně, kde částice je, ale jak odvodíme v kapitole 3.10, všechny hodnoty hybnosti jsou stejně pravděpodobné, tj. nevíme, jak se pohybuje.

Je velmi důležité si uvědomit, že se opravdu jedná o zcela jinou situaci než v klasické fyzice. Obě veličiny s nekomutujícími operátory nemohou být určeny zároveň zcela přesně, protože to teorie zakazuje, nikoli proto, že bychom to (zatím) neuměli.

Napišme ještě jednu konkrétní, jednoduchou a zároveň nejdůležitější relaci neurčitosti, a to relaci neurčitosti pro souřadnici a hybnost. Připomeneme-li si komutační relaci $[\hat{x}_k, \hat{p}_k] = i\hbar\hat{E}$, dosazením do (2.54) získáme

$$\delta x_k \delta p_k \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (2.55)$$

kteří se říká **Heisenbergova relace neurčitosti**. Tato relace nás nutí vzdát se pojmu

trajektorie částice – ta totiž vyžaduje současnou znalost polohy i hybnosti částice.²⁵ Z nerovnosti (2.55) je vidět, že tvrzení o současné neurčitelnosti platí jen pro odpovídající si složky polohového vektoru a hybnosti. Naproti tomu veličiny x_k a p_l jsou pro $k \neq l$ současně měřitelné, neboť příslušné operátory komutují. Právě tak jsou současně měřitelné i všechny souřadnice x_k navzájem i všechny složky hybnosti p_l navzájem. Je tedy možné určit měřením v určitých stavech polohu částice (ale nikoliv zároveň její hybnost) a v určitých jiných stavech hybnost částice (ale ne polohu).

Úkol 2.18 Ukažte, že Brownův pohyb lze popisovat klasicky (tj. lze zanedbat důsledky relací neurčitosti). Parametry pohybující se částice $m = 10^{-13}$ kg, průměr $d \approx 1 \mu\text{m}$, polohu lze určit s přesností asi $\Delta x = d/100$, $v = 10^{-6}$ m/s.

Relace neurčitosti vylučující současnou měřitelnost budou platit i pro dvě veličiny, z nichž jedna závisí pouze na souřadnicích částice a druhá pouze na její hybnosti. V tom případě jsou totiž příslušné operátory nekomutativní. Důležitým konkrétním případem jsou kinetická energie $T(\vec{p})$ částice a její potenciální energie $V(\vec{r})$. Navíc oba spolu nekomutující operátory \hat{T} a \hat{V} nekomutují ani s hamiltoniánem, který je jejich součtem. Znamená to, že ve stavech s ostrou hodnotou energie E , o které se budeme přednostně zajímat, mají její složky T a V neostře hodnoty.

Úkol 2.19 Určete minimální energii elektronu a protonu, pokud obě částice uzavřeme do objemu o velikosti atomového jádra (cca 10^{-14} m). Porovnejte se skutečnými energiemi.

Připomeneme-li si komutační relace pro operátory složek momentu hybnosti \hat{L}_1 , \hat{L}_2 a \hat{L}_3 (žádné dva navzájem nekomutují, ale komutují s velikostí momentu hybnosti), dospějeme k ještě překvapivější a komplikovanější situaci, kdy nejde současně měřením přesně určit jednotlivé složky téže vektorové veličiny. Současně může být určena velikost vektoru a jedna jeho složka. Příslušný vektor nejde tedy ani graficky znázornit. Podrobněji se k problematice momentu hybnosti vrátíme při výkladu chování částice v kulově symetrickém poli (viz kapitola 5.1).

²⁵Každý, kdo se začíná seznamovat s kvantovou mechanikou, se musí s tímto problémem vyrovnat a vzdát se představy, že mikročástice se v prostoru přemísťují podobně jako makroskopická tělesa, jenom v jiném měřítku.

Výpočtová úloha 2.8

Využijte relace neurčiti k odhadu minimální možné energie částice v kvadratickém potenciálu (tj. minimální energetické hladiny lineárního harmonického oscilátoru).

2.5 Časový vývoj stavu kvantového systému

2.5.1 Nestacionární Schrödingerova rovnice

K dokončení popisu základního formálního schématu kvantové mechaniky ještě zbývá uvést

- jak se v konkrétních případech určí možné kvantové stavy částice nebo souboru částic,
- jak se získá popis časového vývoje stavu částice.

V roce 1926 našel E. Schrödinger diferenciální rovnici, která umožňuje jak určení vlastností kvantového objektu, tak i jeho chování v daných – obecně časově proměnných – podmínkách. Tato rovnice je jedním z postulátů kvantové mechaniky, to znamená, že se nedá odvodit z předchozích poznatků. A vzhledem k tomu, že celou kvantovou mechaniku zde představujeme jako logicky konzistentní teorii, nebudeme ani zde uvádět, čím byl E. Schrödinger inspirován (tj. jak probíhalo jeho odvození).

Časový vývoj kvantového systému, jemuž přísluší hamiltonián (Hamiltonův operátor) \hat{H} , je popsán rovnicí

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t). \quad (2.56)$$

Tato rovnice se nazývá **Schrödingerova rovnice** (často s přívlastky **časová** nebo **nestacionární**, jejichž význam se ukáže až později).

Její hlavní význam spočívá v tom, že nám umožňuje ze znalosti vlnové funkce v nějakém čase t_0 , tj. ze znalosti počátečního stavu $\psi(\vec{r}, t = t_0)$, nalézt vlnovou funkci v nějakém následném čase $t > t_0$, tj. $\psi(\vec{r}, t > t_0)$.

Okomentujme podrobněji, zda je možné najít časový vývoj i zpětně v čase. Schrödingerovu rovnici lze samozřejmě řešit i pro časy $t < t_0$, podobně jako pohybové rovnice²⁶ v jiných částech fyziky. Pokud bychom měli zaručeno, že se se systémem „nic nedělo“,

²⁶Jako pohybové (nebo také evoluční) rovnice označujeme libovolné rovnice, které určují, jak se bude systém vyvíjet v čase, tj. „pohybovat“. V mechanice to je Newtonův druhý pohybový zákon, Lagrangeovy či Hamiltonovy rovnice, v elektřině a magnetismu Maxwellovy rovnice atd.

tj. neproběhlo žádné měření, potom by řešení i v čase zpět mělo smysl. Jakékoli měření ale představuje nepřekročitelnou hranici při cestě zpět v čase, protože neexistuje způsob, jak ze znalosti stavu po měření zrekonstruovat stav před měřením. Z tohoto důvodu se v kvantové mechanice uvažuje jen řešení v budoucím čase.

Matematicky je Schrödingerova rovnice diferenciální rovnicí prvního řádu v časové proměnné, což souvisí s postulátem o vlnové funkci – stav částice je **úplně** popsán vlnovou funkcí. To znamená, že k nalezení jednoznačného řešení rovnice (2.56) musí stačit zadat jen vlnovou funkci v počátečním časovém okamžiku, tj. jedinou počáteční podmínku.

Poznámka: Rovnice 2.56 představuje rovnost mezi dvěma funkcemi – levou a pravou stranou. Rozhodně nelze tedy „zkrátit ψ “ a dostat tak, že je hamiltonián úměrný časové derivaci. Takový přechod mezi rovnostmi funkcí a rovnostmi operátorů lze provést pouze v případě, že by daná rovnost byla splněna pro libovolnou funkci, což zde není (pokud by byla, bylo by zbytečné tuto rovnici řešit). Na druhou stranu tzv. evoluční operátor (operátor, který „posune“ vlnovou funkci o nějaký čas dále) je s hamiltoniánem velmi těsně spjat.

2.5.2 Stacionární Schrödingerova rovnice

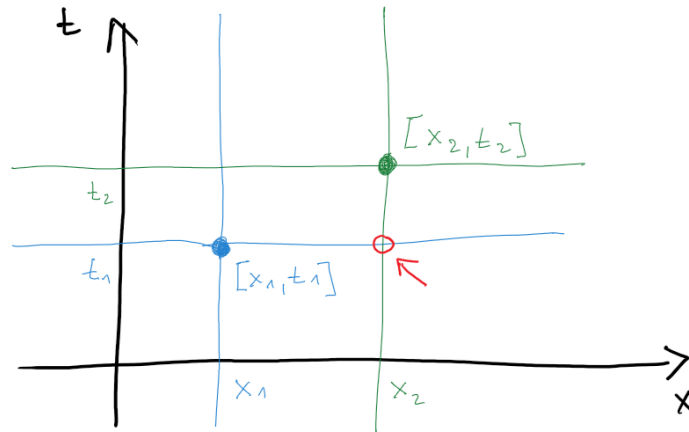
Podobně jako třeba v teoretické mechanice, i v kvantové mechanice bude mít velký význam studium systémů, ve kterých se nemění celková energie, tj. studovaný kvantový systém (částice, soustava částic) je dostatečně izolován od svého okolí. Přesněji **hamiltonián \hat{H}** daného systému **nezávisí explicitně na čase**, tj. $\hat{H} \neq \hat{H}(t)$ nebo $\partial\hat{H}/\partial t = 0$. V takovém případě je možné rovnici (2.56) rozdělit na dvě části, jednodušší rovnici a část, která půjde rovnou vyřešit. Tyto úpravy teď provedeme.

Explicitní nezávislost hamiltoniánu na čase je jedním předpokladem. Druhým (tak trochu dočasným) předpokladem bude separace prostorových a časových proměnných ve vlnové funkci

$$\psi(\vec{r}, t) = R(\vec{r})T(t). \quad (2.57)$$

Jinými slovy budeme hledat jen taková řešení rovnice (2.56), která splňují uvedenou podmínku. Jistě cítíte, že rozhodně nemáme automaticky zaručeno, že všechna řešení rovnice (2.56) mají tento tvar. Prozradíme ale už teď, že všechna řešení rovnice (2.56) budeme schopni „vytvořit“ z řešení v tomto speciálním (separovaném) tvaru. Ještě doplníme, že funkci $R(\vec{r})$ se říká prostorová část²⁷ a funkci $T(t)$ časová část vlnové funkce.

²⁷V následujících kapitolách ji budeme značit už jen $\psi(\vec{r})$, resp. $\psi(x)$ pro jednorozměrné případy. Podle proměnných se pozná, zda se jedná o celou vlnovou funkci, nebo jen o její prostorovou část. Navíc z dalšího odvození vyplyne, že platí $\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}, t = 0)$.



Obrázek 2.2: Náčrtek vysvětlující, proč obě strany rovnice 2.58 se rovnají stejnému číslu – pro jednoduchost uvažujeme pouze jedinou prostorovou souřadnici. Zvolíme si nějaké konkrétní hodnoty proměnných $[x_1, t_1]$ – do levé strany dosadíme t_1 , tím dostaneme konkrétní číslo a tomuto číslu se musí rovnat pravá strana pro všechny hodnoty x (modrá svislá čára) a naopak hodnotě pravé strany pro x_1 se musí rovnat ve všech časech t (modrá vodorovná čára). Podobně si můžeme zvolit jiný bod $[x_2, t_2]$ a zeleně označit všechny body, ve kterých musí mít podle předchozích úvah stejnou hodnotu. A díky bodu, který je jak zelený, tak modrý (označený červenou šipkou), víme, že modrá i zelená hodnota musí být shodné. A podobně i pro ostatní hodnoty souřadnic a času.

Dosadíme tedy separovaný tvar vlnové funkce (2.57) do nestacionární Schrödingerovy rovnice (2.56)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} R(\vec{r})T(t) = \hat{H} (R(\vec{r})T(t)).$$

Vidíme, že na levé straně můžeme prostorovou část $R(\vec{r})$ vytknout před derivaci a na pravé straně se zase časová část vlnové funkce $T(t)$ chová vůči působení hamiltoniánu \hat{H} jako konstanta (využijeme tedy linearitu hamiltoniánu)

$$i\hbar R(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial t} T(t) = T(t) \hat{H} R(\vec{r}).$$

Obě strany rovnice vydělíme součinem $R(\vec{r})T(t)$ a dostaneme

$$i\hbar \frac{1}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = \frac{\hat{H} R(\vec{r})}{R(\vec{r})}. \quad (2.58)$$

Levá strana této rovnice je závislá pouze na čase a pravá strana je funkcí pouze prostorových proměnných. Splnit tuto rovnici nezávisle na sobě pro každé \vec{r} a pro každé t je možné jen tím, že se obě strany budou rovnat konstantě (vysvětlení je i na obrázku 2.5.2). Tato konstanta se obvykle označuje E – obě strany rovnice mají fyzikální rozměr energie a později bude ještě zřetelněji patrné, že se opravdu jedná o celkovou energii systému.

Tím se rovnice (2.58) rozpadne na dvě jednodušší rovnice vzájemně provázané hodnotou konstanty E . První z těchto rovnic je velmi jednoduchá lineární diferenciální rovnice

prvního řádu s konstantními koeficienty

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = ET(t), \quad (2.59)$$

jejíž řešení má tvar

$$T(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}, \quad (2.60)$$

ve kterém se nachází zatím neznámá konstanta E a které může být ještě vynásobeno libovolným výrazem nezávislým na čase.

Druhá rovnice má tvar

$$\hat{H}R(\vec{r}) = ER(\vec{r}). \quad (2.61)$$

V této diferenciální rovnici vystupuje hamiltonián \hat{H} studovaného systému a její řešení je tedy možné až ve chvíli, kdy víme, jaký systém studujeme a známe jeho hamiltonián. Řešení této rovnice je klíčem k určení vlastností systému, a proto patří k nejzákladnějším a velmi často používaným vztahům kvantové mechaniky a nazývá se **nečasová** nebo **stacionární Schrödingerova rovnice**.

Připomeneme-li si kapitolu (2.3.6) s výkladem o vlastních číslech a funkcích operátorů, snadno si povšimneme, že rovnice (2.61) je vlastně rovnicí pro hledání vlastních funkcí $R_n(\vec{r})$ a vlastních čísel E_n hamiltoniánu \hat{H} . Můžeme to vyjádřit zápisem rovnice (2.61)

$$\hat{H}R_n(\vec{r}) = E_n R_n(\vec{r}), \quad (2.62)$$

kam jsme vlastně „dosadili“ nalezená řešení.

Ted' můžeme interpretovat čísla²⁸ E_n jako možné hodnoty celkové energie E systému, které lze získat měřením. Zejména v případech, kdy se jedná o oddělené hodnoty, tak se energie E_n také nazývají *hladiny energie* systému. A funkce R_n jsou prostorové části vlnové funkce popisující takový stav studovaného systému, v nichž má energie ostrou hodnotu shodnou s hodnotou příslušného vlastního čísla E_n .

Vrátíme-li se nyní na začátek kapitoly ke vztahu 2.57, dostáváme, že vlnovou funkci $\psi(\vec{r}, t)$ řešící původní časovou Schrödingerovu rovnici (2.56) dostaneme vynásobením její prostorové a časové části podle vzorce (2.57) ve tvaru

$$\psi_n(\vec{r}, t) = R_n(\vec{r})e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}. \quad (2.63)$$

²⁸V tomto okamžiku není podstatné, kolik vlastních čísel a funkcí hamiltonián má. V dalších kapitolách uvidíme, že to může být konečně mnoho, nekonečně ale spočetně („očíslovatelné“) mnoho, ale i že n může být reálné číslo z nějakého intervalu.

Všimněte si, že konstanta E má index n i v časové části, protože se jedná o stejnou konstantu, která obě části propojuje. Podobně stejným indexem označujeme i vlnovou funkci ψ_n . Tato funkce řeší jak nestacionární Schrödingerovu rovnici (2.56), ze které jsme vyšli, ale i stacionární Schrödingerovu rovnici (2.56), protože funkce $\psi_n(\vec{r}, t)$ a $R_n(\vec{r})$ se liší pouze vynásobením (komplexním) výrazem $e^{-iE_n t/\hbar}$, kterým se dají obě strany rovnice (2.61) podle okolností rozšířit nebo zkrátit. A jak již bylo dříve řečeno, vlnová funkce a její násobky znamenají automaticky tentýž kvantový stav.²⁹

Úkol 2.20 Spočítejte hustotu pravděpodobnosti $\rho_n(\vec{r}, t)$ pro stacionární vlnovou funkci $\psi_n(\vec{r}, t)$ a diskutujte její závislost na čase.

Úkol 2.21 Uvažujte libovolnou veličinu A , která nezávisí explicitně na čase. Na čase tedy nezávisí ani její operátor \hat{A} . Ukažte, že střední hodnota této veličiny ve stacionárním stavu ψ_n nezávisí na čase.

V předchozím úkolech jste spočítali, že funkce $\psi_n(\vec{r}, t)$ popisuje stále stejný stav, její hustota pravděpodobnosti nezávisí na čase a ani střední hodnoty časově nezávislých veličin se s časem nemění. Proto řešení $\psi_n(\vec{r}, t)$ nazýváme tzv. **stacionární vlnové funkce**, resp. stavy, které popisují, **stacionárními stavy**.

POZOR: Není pravda, že by stacionární vlnová funkce nezávisela na čase!

V předchozím textu jsme našli taková řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice (2.56), která mají speciální tvar. Tato rovnice je ale lineární, a proto každá lineární kombinace jejích řešení je také řešením, tj. řešením je

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n = \sum_n c_n R_n(\vec{r}) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}, \quad (2.64)$$

kde c_n jsou libovolné komplexní konstanty. Stavy, jimž přísluší vlnové funkce (2.64), se nazývají **nestacionární stavy**.

²⁹Všimavý čtenář by zde mohl namítnout, že se nejedná o „pouhý“ násobek, protože multiplikatívni faktor závisí na čase. A opravdu tento faktor obsahuje informaci o tom, jak se daný stav vyvíjí v čase. Pokud se ale pustíme do měření polohy částice (hledání, kde ji můžeme najít), budeme to dělat v nějakém konkrétním čase t_{mereni} . Vlnové funkce $\psi_n(\vec{r}, t_0)$ a $\psi_n(\vec{r}, t_{\text{mereni}})$ se opravdu navzájem liší jen vynásobením nějakou komplexní konstantou. Popisují tedy stejný stav. Podobnou úvahu můžeme udělat při měření jakékoli jiné veličiny, která explicitně nezávisí na čase.

Úkol 2.22 Z předchozích úvah je patrné, že nestacionární vlnová funkce je díky linearitě řešením nestacionární Schrödingerovy rovnice. I stacionární Schrödingerova rovnice (2.61) je lineární. Lze tedy její řešení kombinovat. Je tedy kombinace stacionárních funkcí (tj. nestacionární vlnová funkce 2.64)

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n R_n(\vec{r}) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$$

řešením stacionární Schrödingerovy rovnice?

Úkol 2.23 Spočítejte hustotu pravděpodobnosti $\rho(\vec{r}, t)$ pro nestacionární vlnovou funkci $\psi(\vec{r}, t) = c_1 \psi_1(\vec{r}, t) + c_2 \psi_2(\vec{r}, t)$, kde c_1 a c_2 jsou libovolné komplexní konstanty, a diskutujte její závislost na čase.

Úkol 2.24 Ukažte, jak závisí střední hodnota energie na čase ve stavu, který je popsán nestacionární vlnovou funkcí $\psi(\vec{r}, t) = c_1 \psi_1(\vec{r}, t) + c_2 \psi_2(\vec{r}, t)$, kde c_1 a c_2 jsou libovolné komplexní konstanty. Lze tento výpočet zobecnit i pro kombinaci více stacionárních vlnových funkcí?

Nakonec ještě zbývá okomentovat, zda nestacionární vlnové funkce (získané jako kombinace stacionárních vlnových funkcí dle vztahu 2.64) zahrnují opravdu všechna řešení nestacionární vlnové rovnice (2.56). Předpokládejme tedy, že máme nějakou zcela obecnou funkci $\Psi(\vec{r}, t)$, která je řešením nestacionární Schrödingerovy rovnice. V okamžiku $t = 0$ platí, že funkce $\Psi(\vec{r}, t = 0)$ patří do Hilbertova prostoru vlnových funkcí a může být vyjádřena jako lineární kombinace funkcí báze tohoto prostoru. Jako bázi zvolíme vlastní funkce hamiltoniánu, tj. funkce $R_n(\vec{r})$. Tím dostáváme

$$\Psi(\vec{r}, t = 0) = \sum_n c_n R_n(\vec{r}) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r}, t = 0),$$

kde c_n jsou vhodně zvolené komplexní konstanty. Časový vývoj pravé strany známe a díky linearitě nestacionární Schrödingerovy rovnice je jedno, zda „nejprve sečteme funkce a potom je necháme vyvíjet v čase“, nebo budeme nejprve uvažovat časový vývoj každé stacionární vlnové funkce a teprve poté výsledek sečteme. Z této úvahy je patrné, že nestacionární vlnové funkce popisují všechna řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice.

Závěrem si dovolíme ještě znovu připomenout, že všechny úvahy v této kapitole jsme dělali za předpokladu, že hamiltonián systému nezávisí explicitně na čase. Klasifikace stavů a vlnových funkcí na stacionární a nestacionární se tedy vztahuje jen na tento případ. Má-li naproti tomu studovaný systém časově závislý hamiltonián $\hat{H}(t)$, platí pouze nestacionární Schrödingerova rovnice a všechny stavy systému jsou stavy nestacionárními.

Úkol 2.25 Ukažte, že časový vývoj zachovává normovanost.

2.5.3 Rovnice kontinuity

Rovnice kontinuity v diferenciálním tvaru je vlastně jen jiným vyjádřením zákona zachování. Například zákon zachování elektrického náboje v nějakém konkrétním bodě můžeme napsat jako

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0,$$

kde ρ je hustota náboje a \vec{j} je hustota elektrického proudu. První člen vyjadřuje, jak moc se v daném bodě změnilo „množství“ náboje, druhý člen určuje, zda převažuje „odtékání“ či „přitékání“ náboje do daného místa. Změna množství je dána „nerovnováhou přítoku a odtoku“. Podobně lze rovnici kontinuity napsat i pro proudění tekutin, kde zachovávanou veličinou je hmotnost. V tomto případě ρ bude hustota, hustotu toku vyjádříme jako $\rho \vec{v}$ a rovnice kontinuity bude mít tvar

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \vec{v} = 0.$$

Na konci předchozího kapitoly jsme viděli, že se zachovává normovanost vlnové funkce, tj. pravděpodobnost nalezení částice v celém prostoru zůstává rovna jedné. Na to lze nahlížet i tak, že pravděpodobnost nalezení částice se chová jako ideálně nestlačitelná tekutina. Napišme rovnici kontinuity pro hustotu pravděpodobnosti nalezení částice $\rho(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t)$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0.$$

To, co nám ale chybí, je význam hustoty toku pravděpodobnosti \vec{j} . Budeme tedy upravovat první člen tak, abychom dostali výraz ve tvaru „divergence něčeho“, což poté prohlásíme za hustotu toku pravděpodobnosti \vec{j} . Pusťme se do úprav (pro zkrácení výrazů nebudeme vypisovat proměnné vlnových funkcí)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial \psi^* \psi}{\partial t} = \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Za derivaci vlnové funkce dosadíme z nestacionární Schrödingerovy rovnice (2.56)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}\psi.$$

poslední rovnost komplexně sdružíme a uvědomíme si, že čas t je reálný a operátor \hat{H} hermitovský

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^* = \left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H}\psi \right)^* \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H}\psi^*.$$

Po dosazení do rovnice kontinuity dostáváme

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left(-\psi \hat{H}\psi^* + \psi^* \hat{H}\psi \right).$$

Až do tohoto okamžiku byly provedené kroky obecné, ale další úpravy směřující k získání typického tvaru rovnice kontinuity závisí na tvaru hamiltoniánu \hat{H} . Omezme se zde zatím na případ pohybu částice v konzervativním silovém poli charakterizovaném potenciální energií $V(\vec{r}, t)$. Hamiltonián má v takovém případě tvar ($\hat{\mathbb{E}}$ je jednotkový operátor)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \hat{\mathbb{E}}. \quad (2.65)$$

Dosaďme tento hamiltonián do předchozí rovnice

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left(-\psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi^* + \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi \right).$$

Členy s potenciální energií se díky komutativitě násobení funkcí odečtou

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\hbar}{2im} (\psi \Delta \psi^* - \psi^* \Delta \psi). \quad (2.66)$$

Pravou stranu chceme mít ve tvaru divergence. Zkusme si nejprve závorku na pravé straně napsat *pro jednorozměrný případ*. V jedné dimenzi je vlnová funkce $\psi = \psi(x, t)$, Laplaceův operátor Δ se redukuje na druhou derivaci podle souřadnice x a divergence na první derivaci podle souřadnice. Rovnice kontinuity má tedy tvar

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* - \psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \right)$$

Pokud využijeme pravidlo o derivování součinu, platí

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) = \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} + \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}$$

a rovnici kontinuity můžeme tedy upravit na

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\hbar}{2im} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right],$$

kde se druhý a čtvrtý člen v závorce na pravé straně odečtou. Po úpravě dostáváme

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\hbar}{2im} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right),$$

což už je hledaný tvar s divergencí. Hustotu toku pravděpodobnosti j v jednorozměrném případě získáme porovnáním poslední rovnosti s rovnicí kontinuity v jednorozměrném tvaru $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x}$ jako

$$j = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right). \quad (2.67)$$

Ve třírozměrném případě postupujeme zcela stejně. Druhý člen na levé straně rovnice (2.66) upravíme následovně

$$\psi^* \Delta \psi = \sum_{k=1}^3 \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_k^2} = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_k} \right) - \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \psi^*}{\partial x_k} \frac{\partial \psi}{\partial x_k}.$$

Podobně postupujeme i s prvním členem na levé straně rovnice (2.66) a zjistíme, že součty s prvními derivacemi se odečtou. Dostáváme tedy

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\hbar}{2im} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x_k} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_k} \right) = \frac{\hbar}{2im} \operatorname{div} (\psi \operatorname{grad} \psi^* - \psi^* \operatorname{grad} \psi),$$

odkud po porovnání s obecným tvarem rovnice kontinuity $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\operatorname{div} \vec{j}$ plyne

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \operatorname{grad} \psi - \psi \operatorname{grad} \psi^*), \quad (2.68)$$

což je hledaný tok hustoty pravděpodobnosti.

Úkol 2.26 O hustotě pravděpodobnosti ρ víme, že má jen reálné (dokonce jen nezáporné) hodnoty. Můžeme něco takového říci i o hustotě toku pravděpodobnosti \vec{j} ?

Rovnice kontinuity spojuje hustotu pravděpodobnosti ρ a hustotu toku pravděpodobnosti \vec{j} vždy v konkrétním bodě. Provedeme integraci rovnice kontinuity přes objem V vymezený vnitřkem libovolné uzavřené plochy S_V a dostaneme

$$\int_V \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} \right) dV = 0 \quad (2.69)$$

a dále provedeme podle Gaussovy věty transformaci objemového integrálu z divergence vektorové funkce na plošný integrál

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \, dV + \int_{S_V} \vec{j} \cdot d\vec{S} = \frac{d}{dt} \int_V \rho \, dV + \int_{S_V} j_n \, dS = 0, \quad (2.70)$$

kde j_n je průmět vektoru \vec{j} do vnější normály k ploše S_V . Tím jsme dostali rovnici kontinuity v integrálním tvaru. Snadno nahlédneme, že časová derivace objemového integrálu na levé straně má význam přírůstek pravděpodobnosti nalezení částice uvnitř objemu V za jednotku času. Plošnému integrálu pak je možné přisoudit význam „množství pravděpodobnosti“, které projde za jednotku času celou plochou ohraničující objem V směrem ven.

Úkol 2.27 Určete hustotu toku pravděpodobnosti \vec{j} pro vlastní funkce operátoru hybnosti \hat{p} a operátoru kinetické energie \hat{T} (viz strana 42).

Úkol 2.28 Určete hustotu toku pravděpodobnosti \vec{j} pro stavy popsané

1. stacionární vlnovou funkcí,
2. nestacionární vlnovou funkcí rovnou lineární kombinaci dvou stacionárních vlnových funkcí,
3. reálnou vlnovou funkcí.

Řešení úkolů z podkapitoly

Řešení 2.1

V rámci klasické mechaniky je stav jednoho hmotného bodu v daném okamžiku jednoznačně popsán, uvedeme-li jeho polohu pomocí polohového vektoru \vec{r} a jeho hybnost \vec{p} . Obojí jsou vektorové veličiny, takže se jedná o šest čísel, konkrétně v kartézských souřadnicích o souřadnice polohy $\equiv (x, y, z)$ a složky vektoru hybnosti $\equiv (p_x, p_y, p_z)$. Použít ale můžeme i jakékoli jiné (zobecněné) souřadnice a jim příslušející (zobecněné) hybnosti.

V případě, že by se jednalo o jednodimenzionální pohyb, pak by byla potřeba „čísla“ jen dvě. Pro dvoudimenzionální pohyb čtyři.