

Kvantová mechanika

Pavel Cejnar

Kvantová mechanika popisuje děje probíhající na jemné úrovni rozlišení, kdy charakteristické rozdíly akce $S = \int \mathcal{L} dt$ (kde \mathcal{L} značí lagrangián, tedy okamžitý rozdíl kinetické a potenciální energie) mezi dvěma možnými průběhy děje jsou srovnatelné s hodnotou Planckovy konstanty ($\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34}$ J·s). Tato podmínka je nejčastěji splněna pro subtilní děje v mikrosvětě, ale v některých případech může být relevantní i v makroskopickém světě.

Stav kvantového systému

Stavem fyzikálního systému rozumíme souhrn všech dat o okamžité konfiguraci systému, které potřebujeme znát k jednoznačnému (v případě izolovaného systému) určení jeho budoucího i minulého vývoje. Stav vždy popisujeme pomocí nějakých matematických objektů, které jsou charakteristické pro daný typ teorie.¹ V kvantové mechanice je stav reprezentován n -rozměrným (většinou $n = \infty$) komplexním vektorem Ψ . Stavovým prostorem je lineární vektorový prostor, tzv. **Hilbertův prostor**, na němž je definován skalární součin (Ψ', Ψ) , tedy jisté zobrazení z množiny dvojic vektorů do množiny komplexních čísel. Násobení vektoru konstantou nemění fyzikální charakteristiky stavu, a proto je výhodné volit normalizované vektory, splňující podmínku $(\Psi, \Psi) = 1$.

Okamžitým důsledkem vektorového charakteru stavového prostoru je tzv. **princip superpozice**: jsou-li Ψ_1 a Ψ_2 vektory popisující dva z možných stavů systému, pak jejich lineární kombinace (tzv. superpozice)

$$\Psi = a\Psi_1 + b\Psi_2$$

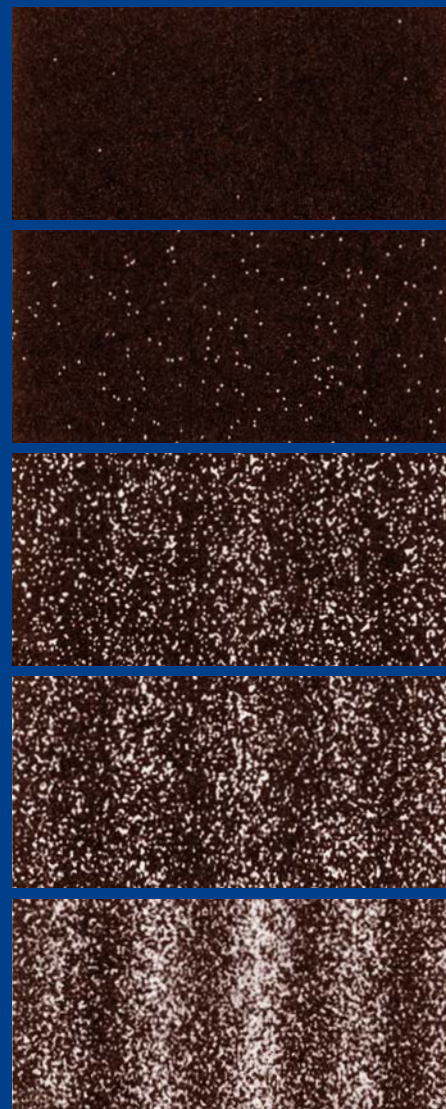
(kde a a b jsou libovolná komplexní čísla) představuje vektor popisující další možný stav. Jestliže stavům Ψ_1 a Ψ_2 odpovídaly odlišné hodnoty nějaké fyzikální veličiny, pak hodnota této veličiny ve stavu Ψ není určena – např. částice není ani tady, ani tam, ale spíše „tady i tam“. Právě tato delokalizace umožňuje částicové interferenční chování známé z experimentů.

Kvantová mechanika má indeterministický charakter – umožňuje určit jen pravděpodobnosti různých výsledků měření. Výrazy pro pravděpodobnosti jsou vždy založeny na skalárním součinu mezi nějakou dvojicí stavových vektorů. V obecném případě se pravděpodobnost „nalezení“ stavu Ψ' v jiném stavu Ψ spočte pomocí výrazu:

$$P(\Psi')_{\Psi} = |(\Psi', \Psi)|^2$$

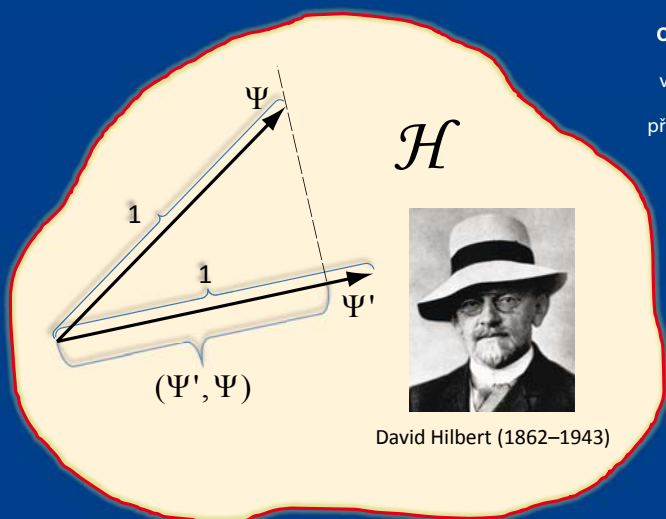
(předpokládáme normalizaci obou stavových vektorů). To znamená, že mají-li oba stavy nenulový překryv (skalární součin), nelze je z hlediska kvantové mechaniky plně rozlišit.

¹ Například v klasické fyzice je stav N -částicové soustavy zadán výčtem souřadnic a hybností všech částic, tedy jako bod v prostoru o dimenzi $6N$.



Obr. 2 Srdcem kvantové mechaniky je elektronový interferenční experiment. Elektrony procházející dvojicí paralelních štěrbin vytvářejí na stínítku za štěrbinami charakteristický obrazec patrný na obrázku (tečky udávají dopady jednotlivých elektronů). Kdyby byla otevřena jen jedna z obou štěrbin, vznikl by jediný pruh za touto štěrbinou, jsou-li ale otevřeny štěrbinu obě, pozorujeme několik pruhů v místech, které neodpovídají poloze štěrbin. Příčinou je interference, podobná té, která vzniká při skládání vln. Protože však elektrony dvojicí štěrbin procházejí po jednom (viz obrázek zachycující různé fáze tvorby obrazce), každý elektron musí interferovat „sám se sebou“. Z hlediska kvantové mechaniky se jedná o důsledek relace $P(x)_{\Psi_1 + \Psi_2} \neq P(x)_{\Psi_1} + P(x)_{\Psi_2}$, kde $P(x)_{\Psi}$ představuje pravděpodobnost naměření souřadnice x pro částici ve stavu Ψ , přičemž Ψ_1 , Ψ_2 , resp. $\Psi_1 + \Psi_2$ symbolizují stavové vektory odpovídající situaci, kdy je otevřena jen první nebo druhá štěrbinu, resp. obě štěrbinu najednou. Obrázek převzat z práce [A. Tonomura et al.: Am. J. Phys. 57, 117 (1989)].

Obr. 1 Skalární součin (Ψ', Ψ) dvou normalizovaných vektorů v Hilbertově prostoru \mathcal{H} je komplexní číslo, které představuje projekci vektoru Ψ do směru Ψ' . Druhá mocnina absolutní hodnoty tohoto čísla je rovna kvantové pravděpodobnosti, že stav Ψ bude při měření identifikován se stavem Ψ' . K obecné formulaci kvantové mechaniky pomocí abstraktního stavového prostoru dospěl J. von Neumann a další na základě matematické práce D. Hilberta.



David Hilbert (1862–1943)

Kvantování fyzikálních veličin

Je-li stav kvantového systému zadán vektorem Ψ , jak spočítat pravděpodobnostní rozdělení výsledků měření dané veličiny v tomto stavu? Kvantová mechanika připisuje každé fyzikální veličině A nějaký **operátor** \hat{A} , jenž každému vektoru Ψ stavového Hilbertova prostoru přiřazuje jiný vektor $\hat{A}\Psi$. Zavedení operátorů umožňuje zachytit jak nedeterministický charakter kvantové mechaniky, tak skutečnost, že některé veličiny nejsou vzájemně kompatibilní (jejich operátory nekomutují, tj. platí pro ně $\hat{A} \cdot \hat{B} \neq \hat{B} \cdot \hat{A}$, což má závažné fyzikální důsledky).

Pravděpodobnostní rozdělení veličiny A pro daný kvantový stav je určeno jednotlivými momenty tohoto rozdělení, tedy středními hodnotami všech mocnin A^k pro $k = 1, 2, 3, \dots$, které se pro stavový vektor Ψ spočtou pomocí skalárního součinu

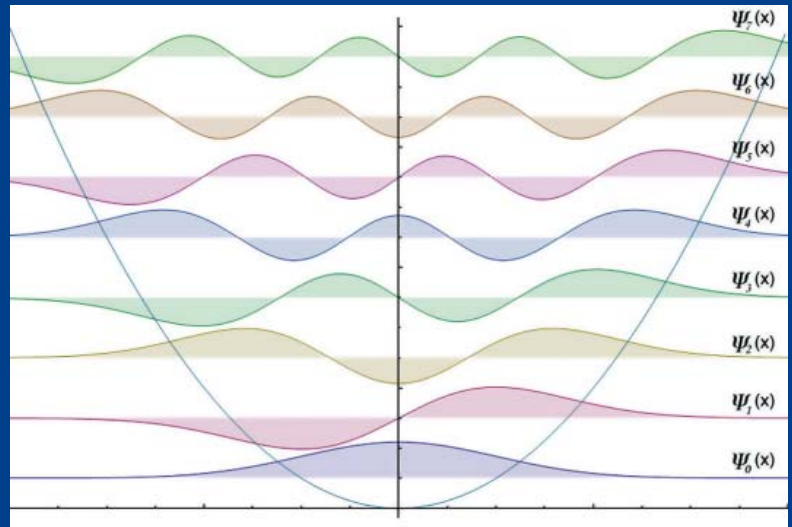
$$\langle A^k \rangle_{\Psi} = (\Psi, \hat{A}^k \Psi),$$

kde $\hat{A}^k \equiv \hat{A} \cdot \hat{A} \cdot \dots \cdot \hat{A}$ označuje k -tou mocninu operátoru \hat{A} . Významnou roli v kvantové mechanice hrají stavy s nulovým statistickým rozptylem dané veličiny. Ty jsou určeny vztahem $\Delta A_{\Psi} = \sqrt{\langle A^2 \rangle_{\Psi} - \langle A \rangle_{\Psi}^2} = 0$, vedoucím k rovnici

$$\hat{A}\Psi_a = a\Psi_a,$$

která říká, že působení operátoru \hat{A} na vektor Ψ_a je dáno jen násobením tohoto vektoru číslem a (jež je tedy jedním z vlastních čísel operátoru \hat{A}).

Všechny „naměřitelné“ hodnoty a veličiny A jsou určeny právě vlastními čísly operátoru \hat{A} , tedy řešeními poslední rovnice. Množina těchto řešení má často diskrétní (nespojité) charakter – výsledkem je kvantované spektrum dané veličiny (např. energie). Pro stavové vektory, které rovnici pro vlastní čísla vyhovují, je výsledek měření veličiny A jednoznačně určen (bude jim vlastní hodnota a , jak vyplývá z „bezdisperzního“ charakteru těchto stavů), pro ostatní vektory Ψ je pravděpodobnost naměření hodnoty a určena formulí $P(a)_{\Psi} = P(\Psi_a)_{\Psi}$ (viz odstavec „Stav kvantového systému“).



Obr. 3 Vlnové funkce $\psi_n(x)$ jednorozměrného harmonického oscilátoru pro několik nejnižších energetických hladin $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.

Příklady

Stavové vektory jedné bezstrukturální a bezspinové částice ve 3-rozměrném prostoru \vec{x} jsou ztotožněny s komplexními **vlnovými funkcemi** $\Psi \equiv \psi(\vec{x})$, přičemž skalární součin na tomto prostoru je definován integrálním vztahem $(\Psi', \Psi) \equiv \int \psi'(\vec{x})^* \psi(\vec{x}) d^3x$. Požaduje se normalizovatelnost vektorů, vyjádřená relací $(\Psi, \Psi) \equiv \int |\psi(\vec{x})|^2 d^3x < \infty$, která umožňuje vlnovou funkci přenásobit vhodnou konstantou tak, aby uvedený integrál byl roven jedné. Kvadrát absolutní hodnoty normalizované vlnové funkce $\rho(\vec{x}) = |\psi(\vec{x})|^2$ lze interpretovat jako amplitudu pravděpodobnosti výskytu částice v místě \vec{x} . Libovolná lineární kombinace normalizovatelných vlnových funkcí je opět normalizovatelná, je tedy splněn princip superpozice. Dimenze prostoru je nekonečná; soustavu bázových vektorů tvoří libovolná ortogonální soustava funkcí.

Operátor i -té složky **souřadnice** \hat{X}_i je určen jako násobení vlnové funkce příslušnou složkou x_i souřadnicového vektoru, tj. předpisem $\hat{X}_i \Psi \equiv x_i \psi(\vec{x})$. Operátor i -té složky **hybnosti** \hat{P}_i se vyjádří jako derivace $\hat{P}_i \Psi \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(\vec{x})$. Vlnová funkce se dá ekvivalentně zapsat také v impulzové reprezentaci – jako normalizovatelná funkce vektoru hybnosti, $\phi(\vec{p})$, kterou dostaneme pomocí Fourierovy transformace funkce $\psi(\vec{x})$. Impulzová reprezentace je vzhledem k reprezentaci souřadnicové jakoby zrcadlově převrácená, např. operátor hybnosti \hat{P}_i se v ní vyjádří násobením proměnnou p_i a operátor souřadnice naopak jako derivace $\hat{X}_i \equiv +i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i}$. Operátory stejné složky souřadnice a hybnosti spolu nekomutují, platí totiž $\hat{X}_i \hat{P}_j - \hat{P}_j \hat{X}_i = i\hbar \delta_{ij}$ (bez ohledu na reprezentaci), což má za následek **relace neurčitosti**

$$\Delta X_{i,\Psi} \Delta P_{i,\Psi} \geq \frac{\hbar}{2},$$

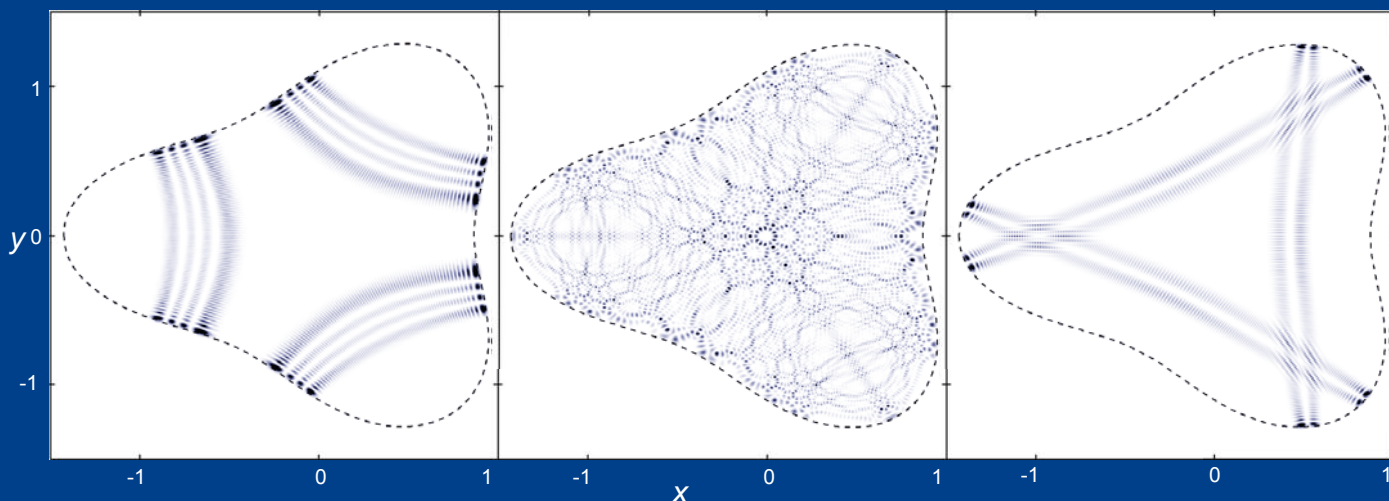
podle kterých v žádném stavu Ψ nelze přesně určit danou složku souřadnice a hybnosti současně (součin neurčitostí musí být přinejmenším roven pravé straně výrazu).¹

Operátor energie, tzv. **hamiltonián**, pro částici v potenciálu $V(\vec{x})$ se запиše jako

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}),$$

kde $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}$ označuje Laplaceův operátor vystupující v operátoru kinetické energie (první část výrazu pro \hat{H} , kde m značí hmotnost částice). Řešení rovnice pro vlastní čísla $\hat{H}\Psi = E\Psi$ dává spojitě či diskrétní spektrum energií E . Diskrétní řešení nacházíme v případech vázaných stavů, kdy potenciál neumožňuje únik částice do nekonečna. Příkladem je potenciálová jáma nebo harmonický oscilátor $V(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2$ (kde ω je kruhová frekvence klasického periodického pohybu), jehož spektrum a vlnové funkce jsou znázorněny na obrázku 3.

¹ Souřadnice a hybnosti jsou důležité z důvodu návazání na výsledky klasické fyziky, ale v kvantovém případě mají příslušné operátory poněkud anomální vlastnosti: jejich působení není definováno v celém Hilbertově prostoru a vlastní funkce leží mimo tento prostor.



Obr. 4 Hustota pravděpodobnosti $\rho = |\psi|^2$ třech vysoce vzbuzeých energetických stavů částice v rovinném potenciálu $V = r^4 + 0,62 r^3 \cos 3\varphi - r^2$, kde (r, φ) jsou polární souřadnice v rovině (x, y) . Tmavé oblasti odpovídají vysoké hustotě pravděpodobnosti výskytu částice; vnější čára ohraničuje klasicky dostupnou oblast při dané hodnotě energie. Převzato z práce [P. Stránský, P. Hruška, P. Cejnar: Phys. Rev. E 79, 066201 (2009)].

Evoluční rovnice

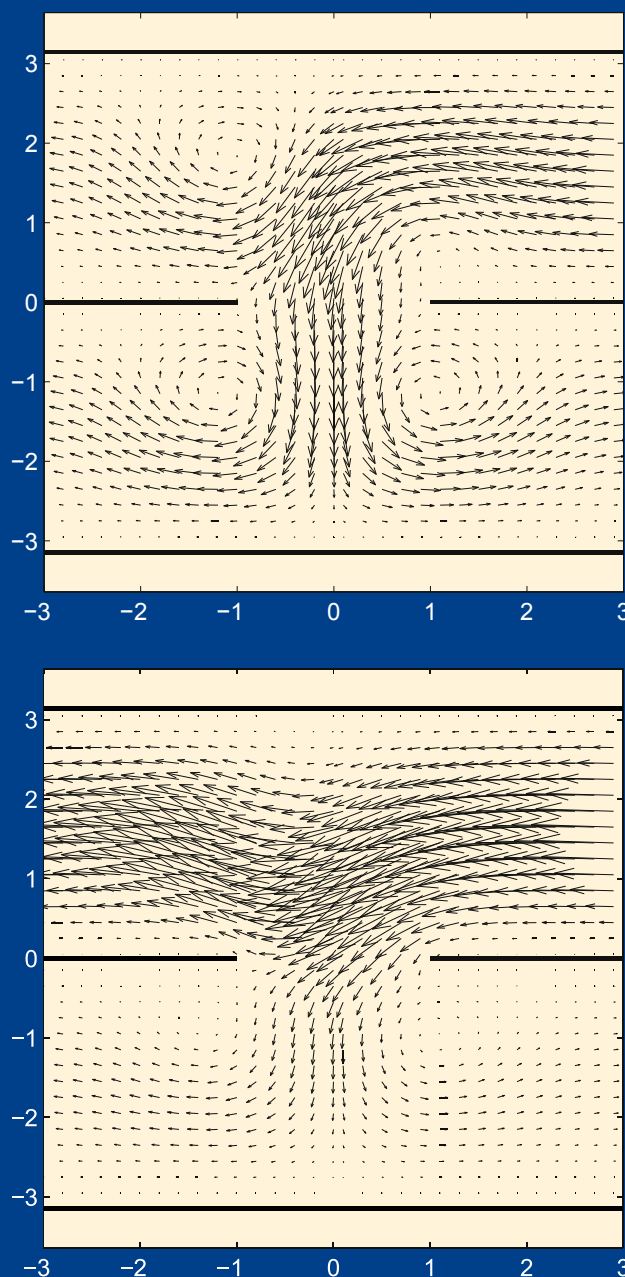
Kvantový stavový vektor se vyvíjí v čase. Evoluce izolovaného systému popsaného hamiltoniánem \hat{H} je vyjádřena pomocí rovnice $\Psi(t) = \hat{U}(t)\Psi(0)$, kde operátor $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ (exponenciála hamiltoniánu, která je definována prostřednictvím Taylorova rozvoje) představuje **evoluční operátor**. Uvedený výraz platí jen za předpokladu, že hamiltonián systému sám nezávisí na čase, tedy neobsahuje např. časově proměnné vnější pole (v nestacionárním případě je evoluční operátor zadán formou nekonečné řady). Ekvivalentně lze evoluci vyjádřit pomocí **Schrödingerovy rovnice**

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(t) = \hat{H}(t) \Psi(t),$$

která platí i pro soustavy s proměnným hamiltoniánem. Při evoluci se nemění skalární součiny vektorů a tedy ani jejich normalizace.

Kvantová evoluce prostorové vlnové funkce jedné částice v poli potenciálu $V(\vec{x})$ se dá názorně interpretovat s využitím rozkladu $\psi = \sqrt{\rho} e^{iS/\hbar}$, v němž je komplexní funkce $\psi(\vec{x}, t)$ rozepsána prostřednictvím dvou reálných funkcí, pravděpodobnostní hustoty $\rho(\vec{x}, t)$ a fáze $S(\vec{x}, t)$. Převedením Schrödingerovy rovnice do této parametrizace se ukáže, že funkci $\rho(\vec{x}, t)$ a vektor $\vec{j}(\vec{x}, t) = \rho \frac{\nabla S}{m}$ (úměrný gradientu funkce S) lze interpretovat jako hustotu ρ a tok $\vec{j} = \rho \vec{v}$ (kde \vec{v} představuje rychlost proudění) jakéhosi „kvantového média“. Proudění tohoto média v prostoru je řízeno jak přirozeným potenciálem $V(\vec{x})$, tak dodatečným kvantovým členem – „potenciálem“ tvaru $U(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}$. V limitě $\hbar \rightarrow 0$ (limita klasické fyziky) je příspěvek členu U nulový a řešení přechází na problém klasického pohybu souboru částic. Pro skutečnou (nenulovou) hodnotu Planckovy konstanty dostáváme rovnice proudění s celkovým potenciálem $V+U$, jenž ve svém druhém členu netriviálně závisí na hustotě média ρ .

Toková formulace Schrödingerovy rovnice se hodí např. k popisu rozptylu částic při vzájemných srážkách: tok \vec{j} částic rozptylujících se do různých směrů se při znalosti interakčního potenciálu dá spočítat a konfrontovat s experimentem. Jiný příklad „kvantového proudění“ je na obrázku 5.



Obr. 5 Proudové čáry odpovídající dvěma energetickým stavům dvojice propojených rovinných vlnodů. Jedná se o stacionární stavy, v nichž hustota ρ i tok \vec{j} zůstávají konstantní. Převzato z práce [P. Exner, P. Šeba, M. Tater, D. Vaněk: J. Math. Phys. 37, 4867 (1996)].



Obr. 6 Niels Bohr a Albert Einstein při jedné z diskusí o povaze kvantových zákonů.

Interpretační otázky

Spojité změna stavového vektoru daná evolučním operátorem popisuje vývoj kvantového systému při absenci vnějších zásahů. Ten je narušen při měření, kdy dochází k náhlé, nedeterministické změně vlnové funkce (k její tzv. **redukci**, „kolapsu“). Při tomto procesu je stav kvantové superpozice, ve kterém se systém nachází před měřením, redukován pouze na jeden z možných výsledků měření. Skutečnost, že kvantové měření bez ohledu na konkrétní realizaci ovlivňuje stav měřeného systému, představuje dosud ne zcela vyjasněný předpoklad kvantové mechaniky. Spolu s dalšími interpretačními otázkami se stal předmětem neutuchajících diskusí. Následuje stručný slovníček některých pojmů, které se v těchto diskusích objevují:

Komplementarita: Kvantový formalismus obsahuje zdánlivě protichůdné pohledy na realitu (např. částicové a vlnové chování).

Kontextualita: Výsledky dané sekvence měření závisí na pořadí a dalších zdánlivě podružných okolnostech. Celý proces pozorování se stává součástí fyzikálních dějů.

Provázanost: Při popisu složeného systému nelze v obecném případě oddělit stavy jednotlivých podsystémů. Tyto podsystémy pak mohou vykazovat silně korelované neklasické chování.

EPR paradox (Einstein, Podolsky, Rosen): Mezi provázanými kvantovými systémy může docházet k jisté subtilní formě „nelokálního“ působení (které však nelze využít k nesvětelnému přenosu informace).

Schrödingerova kočka: Do stavů kvantové superpozice se mohou dostávat i makroskopické objekty („kočka“). Jak potom interpretovat kolaps vlnové funkce při měření?

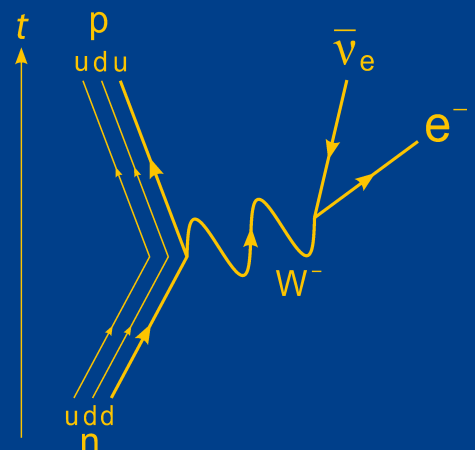
Dekoherence: Ztráta kvantových atributů systému („koherence“) v důsledku jeho interakce s okolním prostředím.

Klasická limita: Pro $\hbar \rightarrow 0$ by kvantová fyzika měla přecházet na fyziku klasickou. Tato limita však vyžaduje silně netriviální vlastnosti, vyplývající ze skutečnosti, že kvantová mechanika má mnohem bohatší strukturu než mechanika klasická.

Skryté parametry: Zvláštnosti kvantového světa nelze vysvětlit pomocí pravděpodobnostní teorie klasického typu, která by např. pracovala s dosud neznámými („skrytými“) parametry fyzikálních systémů. Tato teorie by totiž musela obsahovat předpoklad okamžitého působení na dálku.

Relativistická kvantová teorie

Schrödingerova rovnice pro částici v potenciálu V je založena na nerelativistické relaci mezi energií a hybností $E = \frac{p^2}{2m} + V$. To má mj. za následek narušení vztahu příčinnosti – vlnová funkce lokalizovaná na počátku v malé prostorové oblasti se bude v důsledku relací neurčitosti „rozplývat“ rychlostí, která (při dostatečně ostré počáteční lokalizaci) může přesáhnout rychlost světla c . Snahy o zavedení relativistické analogie Schrödingerovy rovnice však narazily na dva problémy: (a) při řešení této rovnice je nutné vzít v úvahu i záporné hodnoty energie, vyplývající z relativistického vztahu $E^2 = (mc^2)^2 + (pc)^2$, a (b) ne vždy je možné najít kladně definovanou hustotu pravděpodobnosti ρ pro výskyt částice v prostoru. Ukázalo se, že konzistentní řešení těchto problémů je možné až v rámci **kvantové teorie pole**, která je zastřešující teorií současného pohledu na mikrosvět. Zatímco přímým důsledkem problému (a) je existence antičástic, nábojově sdružených partnerů obyčejných částic (např. antičásticí elektronu je kladně nabitý pozitron), problém (b) souvisí s nemožností trvale fixovat počet částic v daném systému (je-li energie dostatečná, mohou vznikat nové částice, případně může docházet k vzájemným přeměnám různých typů částic). Kvantová teorie pole proto pracuje s komplikovaným stavovým prostorem, který obsahuje stavy se všemi možnými počty různých typů částic (stav s nulovým počtem částic představuje vakuum). Tento prostor nemá spočetnou soustavu bázových vektorů – odpovídá popisu kontinua, systému se „spojitě nekonečným“ počtem stupňů volnosti. Relativistická kvantová teorie tak sjednocuje dvě základní entity klasické fyziky – částice a pole.



Obr. 7 Příklad kvantového procesu, při kterém dochází ke změně počtu a typu částic. Jedná se o β -rozpad neutronu: jeden ze tří kvarků, z nichž se neutron skládá, se změnil z typu d na typ u (čímž se z neutronu stane proton), při tom je emitována virtuální částice W^- , která se následně rozpadne na elektron a antineutrino. Každý takovýto diagram v kvantové teorii pole reprezentuje matematický výraz, z něhož se dá vycílit příspěvek příslušného procesu do celkové pravděpodobnosti přeměny.