KVANTOVÁ MECHANIKA I.

JAN KLÍMA – BEDŘICH VELICKÝ

KAROLINUM

Kvantová mechanika I.

Jan Klíma
Bedřich Velický

Recenzovali:
prof. RNDr. Michal Lenc, Ph.D.
prof. RNDr. Lubomír Skála, DrSc.

Vydala Univerzita Karlova
Nakladatelství Karolinum
Praha 2025
Obálka Jan Šerých
Sazba studio Lacerta (www.sazba.cz)
Vydání druhé

ISBN 978-80-246-6130-8
ISBN 978-80-246-6160-5 (pdf)

Univerzita Karlova
Nakladatelství Karolinum

www.karolinum.cz
ebooks@karolinum.cz

OBSAH

Úvod

Kvantová teorie je historicky nejúspěšnější fyzikální teorií. Za téměř 90 let od svého vzniku dovolila popsat nebo dokonce předpovědět množství různorodých jevů o impozantní šíři: od fyziky „elementárních" částic přes stavbu jádra až po chemické reakce a pohyb elektronů v integrovaných obvodech. Kvantová teorie také zásadním způsobem změnila fyzikální obraz světa, ze kterého fyzici – teoretici i experimentátoři – stejně jako pracovníci dalších přírodních věd musejí vycházet. Takovému významu odpovídá ve světové literatuře i rozsáhlá a stále narůstající knihovna učebnic kvantové teorie lišících se obtížností, rozsahem i pojetím. To platí i o její nejpočetnější podknihovně – učebnicích kvantové mechaniky, v nichž se nepoužívá kvantová teorie pole. Učebnice této úrovně pro mnohé studenty znamenají vrchol setkání s kvantovou teorií. K nim se řadí i tato kniha, psaná ovšem česky a zaplňující určitou mezeru v české učebnicové literatuře.

Výběr učebnic kvantové mechaniky v češtině není totiž příliš rozsáhlý: pouze v knihovnách a antikvarátech můžeme nalézt starší překlady dvou učebnic, D. I. Blochinceva a A. S. Davydova[1]. Dostupná, nyní již v druhém vydání, je tak především dvoudílná učebnice prof. J. Formánka[2], která svou náročností a celkovou koncepcí je určena hlavně teoretickým fyzikům. Konečně nedávná kniha prof. L. Skály[3] je koncipována na bakalářské úrovni

1 Davydov, A. S.: *Kvantová mechanika*. Praha: SPN 1978; Blochincev, D. I.: *Základy kvantové mechaniky.* Praha: ČSAV 1956.

2 Formánek, J.: *Úvod do kvantové teorie I, II.* Praha: Academia 2004.

3 Skála L.: *Úvod do kvantové mechaniky.* Praha: Academia 2005; Praha: Nakladatelství Karolinum 2012.

studia fyziky a věnována moderně pojatému úvodu do kvantové teorie a řešení standardních základních úloh. Znalost základů kvantové fyziky v rozsahu této knihy je vhodným předpokladem ke studiu naší učebnice.

Tato kniha je primárně určena studentům magisterského studia fyziky, aplikované a technické fyziky, kteří se zaměřují na fyziku atomárních systémů a zabývají se tématy, jako je studium elektronových stavů v atomech, molekulách a pevných látkách, transportní jevy nebo interakce elektronů se zářením. Výběr témat a rozsah jejich zpracování byl volen tak, že kniha může sloužit jako standardní učebnice pro výuku kvantové mechaniky v magisterském a zčásti i v doktorském studiu. Autoři se při psaní mohli opírat jednak o vlastní badatelskou praxi, jednak o mnohaleté zkušenosti s přednášením kvantové mechaniky na různých úrovních. Pro magisterské studium na Matematickofyzikální fakultě Univerzity Karlovy bylo určeno i naše dvoudílné skriptum Univerzity Karlovy *Kvantová teorie I, II*, dávno zcela rozebrané.[1] Na jeho praxí prověřeném půdorysu jsme stavěli, i když většina materiálu byla nově zpracována a rozšířena. Měli jsme přitom na mysli i druhé poslání knihy, jejíž středně pokročilá úroveň a styl výkladu jsou vhodné i pro „druhé čtení" kurzu kvantové mechaniky zájemci z řad fyziků i absolventů dalších přírodovědných oborů nebo přírodovědně orientovaných oborů technických. Většina témat je proto vykládána o krok dále, než je v učebnicích kvantové mechaniky ustálené. Doplňkový materiál je často vložen do odstavců vymezených znaky ◖◗. Poměrně rozsáhlý je i poznámkový aparát, jednak s věcnými dodatky, jednak s citacemi na monografie i původní práce tak, aby se k nim zájemce o daný problém mohl obrátit.

Výklady jsou vedeny explicitně, nic není odsunuto do úloh nebo cvičení. Zájemce o řešené úlohy z kvantové mechaniky se může obrátit na knihu jednoho z nás[2]. Při psaní učebnice jsou autoři postaveni před dvě volby: mají se držet ustálených vzorů, nebo usilovat o originalitu? Naší snahou bylo sledovat „moderní pojetí", ale neodchylovat se výrazně od standardu s cílem, aby kniha dovolovala bezproblémové navázání na odbornou literaturu. Podobné úvahy nás vedly také k tomu, abychom se důsledně drželi standardní interpretace, a to jak při výkladu postulátů kvantové mechaniky, tak i při studiu jednotlivých kvantových jevů. Do kvantové metafyziky se nepouštíme, pokud by se snad za to nemohl pokládat výklad von Neumannovy teorie měření (kap. 1, § 9.5) a teorie dekoherence (kap. 1, § 9.8), které jsou ovšem rovněž konzervativní. Také pokud jde o matematický aparát, snažili jsme se, aby použitá matematika nevybočovala příliš z ustálených zvyklostí učebnic kvantové mechaniky. Na druhé straně určité techniky funkcionální analýzy jsou běžně používány v současné fyzikální literatuře, a proto jsme pokládali za vhodné připojit v dodatcích stručný přehled temperovaných distribucí a některých pojmů funkcionální analýzy způsobem, který těsně navazuje na hlavní text a odvolává se na fyzikální motivaci.

V textu je důsledně používáno dvojích jednotek, jednak soustavy SI, jednak atomových jednotek, tedy jednotek, v nichž jsou náboj a hmotnost elektronu spojeny s (redukovanou) Planckovou konstantnou a permitivitou vakua vztahem: $e = 4\pi\varepsilon_0 = \hbar = m_e = 1$. Otázce hodnot základních konstant a systému atomových jednotek je věnován první dodatek.

---

1 *Kvantová Mechanika I*. Univerzita Karlova 1985; 1992. *Kvantová Mechanika II*. Univerzita Karlova 1990, 1998.
2 Klíma, J., Šimurda, M.: *Sbírka problémů z kvantové teorie.* Praha: Academia 2006.

Vzhledem k širokému spektru probíraných témat je rozsah knihy značný, a proto jsme se rozhodli rozdělit ji na dva samostatné svazky. Předpokládáme, že čtenář jistý úvod do kvantové teorie již absolvoval (např. v rozsahu zmíněné učebnice prof. L. Skály). Kniha začíná poměrně rozsáhlým shrnutím formální stavby kvantové mechaniky a potřebného matematického aparátu, přičemž vykládané pojmy jsou ilustrovány řešením vybraných problémů pohybu jedné částice v časově neproměnných vnějších polích (kap. 1–3). Tato část obsahuje i ne zcela standardní partie, jako jsou výklad Aharonova-Bohmova jevu, výpočet kontrastu v kvantovém interferometru a úvod do teorie dekoherence.

Výklad pohybu v centrálním poli, symetrie a spinu (kap. 4–6) je jistým prohloubením standardních postupů – spektrum atomu vodíku je odvozeno bezreprezentačně, teorie symetrie obsahuje elementy teorie grup a jejích reprezentací a v rámci výkladu spinu je propočítána spinová rezonance a diskutován EPR paradox a Bellova nerovnost. Spin je pak zaveden znovu při výkladu Diracovy rovnice (kap. 7) a znovu ilustrován výpočtem hyperjemného rozštěpení základního stavu atomu vodíku.

Technické partie – variační princip, poruchový počet nečasový i časový (kap. 8–9) jsou ilustrovány jejich aplikací na výpočty atomových a molekulárních energetických hladin (kap. 10) a výkladem semiklasické a kvantové teorie interakce atomu se zářením (kap. 11).

Velká pozornost je věnována řešení mnohačásticového problému v kvantové mechanice (kap. 10 a 11), který hraje zásadní roli při všech výpočtech složitějších systémů. Jak „brute force method“, tak „mean field method“ jsou podrobně diskutovány. Prvá z nich výpočty hladin atomu helia a vodíkové molekuly, druhá Hartreeho-Fockovou teorií a její aplikací na systematiku atomových hladin. Celá jedna kapitola (kap. 11) je věnována výpočtům celkových energií a problému korelace metodou funkcionálu hustoty (DFT), která po prvotních úspěších při použití v rozlehlých systémech se stala i přední metodou kvantové chemie.

Naproti tomu teorie rozptylu (kap. 12), se omezuje na elastický rozptyl.[1] O to podrobněji je vykládán rozptyl na sféricky symetrickém potenciálu mající četné aplikace v teorii kondenzovaných soustav.

Interakce s elektromagnetickým zářením (kap. 13) je vykládána na dvou úrovních – jako semiklasická (absorpce a emise záření, Kubova formule) i plně kvantová (chaotické a koherentní záření, jednofotonové a dvoufotonové procesy). Kvantová teorie záření je ilustrována podrobným řešením interakce záření s dvouhladinovým atomem, v jehož rámci je (nerelativisticky) počítán i Lambův posuv.

Jak už bylo uvedeno, kniha obsahuje řadu matematických dodatků vysvětlujících základy teorie distribucí, vlastnosti prostorů kvantové mechaniky, zavedení zobecněných vlastních funkcí, operátorový počet a další základní pojmy funkcionální analýzy.

Jan Klíma, Bedřich Velický

Matematicko-fyzikální fakulta
Univerzita Karlova v Praze
Praha, 2008–2014

1 Teorie rozptylu v mnohem širším rozsahu je podrobně vykládána v dříve citované učebnici J. Formánka.

Poděkování:
Autoři děkují Mgr. M. Hájkovi, Ph.D., Mgr. Pavolu Habudovi z MFF UK za pomoc při kreslení obrázků a svým kolegům RNDr. Tomáši Novotnému, RNDr. R. Sýkorovi a doc. I. Turkovi, DSc., za kritické přečtení vybraných kapitol.

ČÁST PRVNÍ – FORMÁLNÍ STAVBA KVANTOVÉ MECHANIKY

/1/

Matematický aparát a principy kvantové mechaniky

1.1 ÚVOD

I když v této knize budujeme formální aparát kvantové teorie systematicky a od začátku, předpokládáme, že čtenář je již obeznámen s historií vzniku a úvodní formulací kvantové mechaniky a pojmy jako vlnová funkce, relace neurčitosti, časová a nečasová Schrödingerova rovnice jsou mu známé – přinejmenším v případě pohybu jedné částice v jedné dimenzi. Jak je v pokročilejších učebnicích kvantové mechaniky obvyklé, shrnujeme proto formalismus do několika postulátů, které ilustrujeme příklady. Na druhé straně nám nejde o axiomatiku kvantové mechaniky a postuláty jsou vysloveny tak, aby jejich znění bylo srozumitelné širokému okruhu čtenářů s minimální průpravou základů kvantové mechaniky a matematiky.

I tak je kvantová mechanika po matematické stránce obtížná a používaný aparát přesahuje běžné matematické vzdělání fyziků, přinejmenším v době, kdy je jim obsáhlejší kurs kvantové teorie běžně přednášen. Proto jsme do textu – jak je rovněž zvykem – zařadili i stručné shrnutí používaného matematického aparátu, § 3. Zařadili jsme ho za prvé dva postuláty, z nichž vyplývá, které pojmy lineární algebry a funkcionální analýzy (zejména vlastnosti Hilbertova prostoru) se dostaly do kvantověmechanického popisu přírodních zákonů. Exaktnější výklad použité matematiky (lineárních prostorů, otázek konvergence v nekonečně rozměrných prostorech, vlastností operátorů, základů teorie distribucí apod.) je pak obsahem matematických dodatků B–D.

Zvláště kontroverzní částí kvantově mechanického popisu přírody je teorie měření; kodaňská interpretace zavádějící „redukci vlnové funkce“ sice pragmaticky obchází řadu potíží, ale z hlediska uživatele většinou vyhovuje, proto i my se jí přidržíme (§ 5). Z modernějších teorií, které jdou za interpretaci kodaňské školy, se stručně zmíníme o teorii dekoherence (§ 9.8)**.**

Smíšené stavy a jejich popis pomocí matice hustoty, které dovršují formální schéma kvantové mechaniky, umožňují popis otevřených systémů a jsou odrazovým můstkem kvantové statistiky v rovnováze i mimo rovnováhu, jsou zavedeny a analyzovány v § 9.

Diskuse EPR paradoxu a Bellových nerovností, které dokreslují zvláštnosti popisu přírody kvantovou mechanikou, je standardně vykládána úvahami o měření na singletním stavu dvou polovičních spinů, a proto je odložena do kap. 6, kde pojednáme o spinu a jejich skládání.

Vyložené pojmy jsou ilustrovány podrobnou diskusí tří systémů: lineárního harmonického oscilátoru, volné částice a nabité částice v konstantním magnetickém poli.

1.2 REPREZENTACE STAVŮ A FYZIKÁLNÍCH VELIČIN

V klasické fyzice je pohyb částice popsán znalostí její trajektorie. Získáme ji řešením klasických pohybových rovnic, známe-li počáteční podmínku, jíž je stav částice v jednom časovém okamžiku: její okamžitá poloha a okamžitá rychlost (nebo hybnost). Výsledkem je závislost polohového vektoru částice na čase, $\boldsymbol{r}(t)$, což je vektor z třírozměrného prostoru a veličina, která je přímo měřitelná a kterou si dovedeme dobře představit. V kvantové mechanice je popis i jediné částice mnohem abstraktnější a naší intuici nepřístupnější: odehrává se v obecně nekonečně rozměrném komplexním vektorovém prostoru, jak je vidět z následujícího postulátu:

* * * * *

Postulát I: o stavovém vektoru:

(a) *Stav systému je v kvantové teorii popsán vektorem v komplexním Hilbertově prostoru.*

(b) *Platí princip superpozice: jsou-li* ψ_1 *a* ψ_2 *dva stavové vektory, pak i jejich lineární kombinace* $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ *je rovněž přípustným stavem.*

* * * * *

Podle P. A. M. Diraca[1] budeme tyto *stavové vektory* nazývat ket-vektory a značit $|\ \rangle$, např. $|\psi\rangle$. Když jsme výše připsali stavový vektor jednomu systému, je třeba si uvědomit, že tento systém je náhodně vybraným systémem ze souboru identických systémů. Stavový vektor bychom tak mohli stejně dobře připsat tomuto souboru kolektivně.[2]

---

1 Dirac, P. A. M.: *The Principles of Quantum Mechanics*. 4. vyd. Oxford University Press 1958.

2 Poznamenejme, že popsat systém jediným stavovým vektorem lze pouze v ideálním případě – říkáme pak, že systém je v *čistém* stavu. Za méně šťastných okolností musíme systém popsat několika stavovými vektory s různými vahami – pak říkáme, že systém je ve *smíšeném* stavu. Smíšeným stavům se podrobně věnujeme v § 9.

Vlnové funkce $\psi(x)$, které k popisu kvantového systému standardně používají úvodní texty, jsou vyjádřením stavového vektoru v konkrétní bázi, viz § 6. Stavové vektory (stejně jako vlnové funkce) nejsou „hmotné“ povahy, jako třeba zhuštění a zředění vzduchu zvukových vln, ani nejsou přímo měřitelné jako třeba intenzity elektrického a magnetického pole – jsou to pouze matematické konstrukce, z nichž lze vypočítat fyzikální charakteristiky systému, který popisují.

Princip superpozice (druhá část postulátu) stojí v srdci interferenčních jevů a – rozšířen přirozeně i na časovou evoluci zúčastněných stavů – stanovuje, že kvantová teorie je lineární teorií, tj. že časový vývoj stavu je zprostředkován lineárním operátorem, viz § 8.

Tak jako je stav systému popsán vektorem z Hilbertova prostoru, jsou fyzikálním veličinám připsány *operátory*, které působí v prostoru těchto vektorů.

* * * * *

Postulát II: o měřitelných veličinách:

(a) *Měřitelným fyzikálním veličinám odpovídají v kvantové teorii lineární hermitovské operátory, jejichž vlastní vektory tvoří úplný systém*[1] *v prostoru stavových vektorů.*

(b) *Jediné hodnoty, jichž může měřitelná fyzikální veličina F nabývat, jsou vlastní čísla operátoru $\hat{F}$ této veličině přiřazeného.*

* * * * *

Měřitelnými veličinami (angl. *observables*) máme na mysli veličiny, jako je třeba poloha, rychlost či energie, zatímco „neměřitelnými“ rozumíme formálně zavedené matematické veličiny, např. posunutí či rotace v našem trojrozměrném prostoru E_3.

V úvodních textech o kvantové mechanice se postuluje, že stavové vektory popisující jednu částici jsou zobrazeny jako vlnové funkce $\psi(x_1, x_2, x_3)$ v E_3; kartézské souřadnice x_i částice a jim odpovídající hybnosti p_i, $i = 1,2,3$ jsou v prostoru vlnových funkcí reprezentovány operátory $\hat{x}_i$ a $\hat{p}_i$, $i = 1,2,3$ působícími dle předpisu:

$$\hat{x}_i \psi(x_1, x_2, x_3) = x_i \cdot \psi(x_1, x_2, x_3),$$
$$\hat{p}_i \psi(x_1, x_2, x_3) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(x_1, x_2, x_3), \quad i = 1,2,3\,. \tag{2.1}$$

Tyto operátory splňují fundamentální – takzvané kanonické – komutační relace

$$[\hat{x}_i\,,\, \hat{x}_k] = 0, \quad [\hat{p}_i\,,\, \hat{p}_k] = 0, \quad [\hat{x}_i\,,\, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{ik}. \tag{2.2}$$

Postuláty I a II jsou dalekosáhlým zobecněním této poměrně názorné koncepce.

---

1 Jak dále podrobněji uvedeme, vlastní vektory i těch nejzákladnějších operátorů neleží v Hilbertově prostoru. Když zde mluvíme o úplnosti vlastních vektorů v prostoru stavových vektorů, mlčky tedy předpokládáme, že jako vlastní vektory připouštíme i vektory z tzv. zobecněného Hilbertova prostoru (neboli zobecněné vlastní vektory), viz dodatek C8.

◖ Uvedená formulace obou postulátů je výrazně intutivní. Neklade si totiž otázku, které vektory Hilbertova prostoru jsou přípustné jako stavy, ani které hermitovské operátory odpovídají skutečně pozorovatelným veličinám. Z elementárních výkladů kvantové teorie často vzniká dojem, že přípustné vlnové funkce musejí být hladké s druhými derivacemi a že pozorovatelných majících význam je pár, zhruba: poloha, hybnost, moment hybnosti, kinetická a potenciální energie. S tím však nevystačíme. Pragmatická odpověď, implicitně stojící za oběma postuláty je, že **přípustné vektory a operátory jsou všechny, které jsou potřebné**. Skutečně konzistentní formulaci vyjadřuje **Dvoudílný postulát úplnosti**:

Postulát I^{BIS} o stavovém vektoru: každý vektor Hilbertova prostoru popisuje přípustný stav.
Postulát II^{BIS} o měřitelných veličinách: každý hermitovský operátor na Hilbertově prostoru popisuje nějakou pozorovatelnou.

Význam postulátu úplnosti pro kvantovou teorii z matematického hlediska je zřejmý, tento postulát má však také zásadní význam z hlediska operacionálního a tedy pro spojení s experimentem. Z Postulátu I^{BIS} vyplývá princip superposice (Postulát I (b)) jako korolár. Zanedbáváme tedy možnost supervýběrových pravidel[1], která ovšem v nerelativistické oblasti fyziky atomů a jejich konglomerátů má mizivý význam. Postulát II^{BIS} může zarážet: operátor $\hat{x}\hat{p}^{-1}\hat{x}$ a podobné konstrukty nevypadají jako reálně pozorovatelné. Rozhodující zde však je, že tento postulát připouští jako pozorovatelné projekční operátory (viz § 3.2. a dodatek C4), které mají jasný a dokonce zásadní operacionální význam v teorii kvantového měření, jak bude vysvětleno v § 5. Z projekčních operátorů pak lze sestavit opravdu každý hermitovský (přesněji: samosdružený – viz dodatek C6) operátor. ◗

Klíčovým pojmem matematického aparátu kvantové teorie, jak ukazuje postulát II, je pojem vlastních čísel operátoru: platí-li pro nenulový vektor $|u\rangle$ a nějaký operátor $\hat{A}$

$$\hat{A}|u\rangle = \lambda|u\rangle, \tag{2.3}$$

1 Supervýběrová pravidla (*superselection rules*) se uplatňují v neseparabilních Hilbertových prostorech kvantové teorie pole. Celý prostor je rozdělen na podprostory („sektory“) a superposice vektorů z různých sektorů je nepřípustná, princip superposice je tedy omezen. Známý příklad je zákaz superposice různých nábojových stavů (*charge superselection rule*). Také pozorovatelné působí výlučně uvnitř jednotlivých sektorů, maticové elementy mezi sektory jsou nulové a to právě vedlo k termínu ‚supervýběrové pravidlo‘ jako odkazu na obyčejná výběrová pravidla známá třeba z optiky.
Více o supervýběrových pravidlech nalezne čtenář např. v přehledu z pera klasika tohoto problému: Wightman, A. S.: *Superselection rules; old and new.* Il Nuovo Cimento B **110** (1995), 751. Je však nutno upozornit na dynamicky indukovaná „měkká“ supervýběrová pravidla spojená s dekoherencí, viz Zurek, W. H: *Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical.* Reviews of Modern Physics **75** (2003), 715.
Konečně se supervýběrová pravidla uplatňují v moderní teorii kvantové informace, viz např. Bartlett, S. D. – Rudolph, T. – Spekkens, R. W.: *Reference frames, superselection rules, and quantum information*, Rev. Mod. Phys. **79** (2007), 555.

říkáme, že $|u\rangle$ je vlastní vektor operátoru $\hat{A}$ a λ je k němu příslušející vlastní číslo. Operátor tak převádí vlastní vektor ve vektor „téhož směru“ lišící se eventuálně jen „délkou“. Jelikož (2.3) je homogenní rovnice, je zároveň s $|u\rangle$ vlastním vektorem i každý vektor $k|u\rangle, k \neq 0$, lišící se od $|u\rangle$ pouze délkou. Vzhledem k tomu budeme za různé vlastní vektory považovat jen ty, které jsou lineárně nezávislé.

* * * * *

Elementárním příkladem je *jednotkový operátor*, který budeme značit $\hat{I}$. Ten libovolný vektor převádí v sebe sama (jinými slovy, každý vektor je jeho vlastním vektorem):

$$\hat{I}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle = 1\cdot|\psi\rangle \tag{2.4}$$

Jak naznačeno, má tedy jediné vlastní číslo, $\lambda = 1$.[1]

◖ Tento operátor není bezvýznamnou hříčkou. Jednak by správně měl vystupovat na pravé straně kanonické komutační relace (2.2): $[\hat{x}_i\,,\,\hat{p}_k] = i\hbar\delta_{ik}\,\hat{I}$, jednak mu odpovídá pozorovatelná, a sice jistota registrace. Proto se objevuje na pravé straně relací úplnosti vlastních vektorů, která bude podrobně vysvětlena v § 3.2. ◗

Zatímco v konečně rozměrném vektorovém prostoru definuje rovnice (2.3) přímočaře řešitelnou úlohu, v nekonečné dimenzi vyžaduje problém vlastních vektorů a vlastních čísel hlubší analýzu a vede k nutnosti pracovat i s vektory, které vybočují z Hilbertova prostoru. K těmto formálním otázkám se nyní obrátíme.

1.3 MATEMATICKÉ PROSTŘEDKY KVANTOVÉ MECHANIKY

V tomto odstavci jsou soustředěny nejdůležitější definice a vlastnosti matematických objektů, se kterými v kvantové teorii pracujeme. Klademe tu důraz méně na vyčerpávající exaktní výklad, více na užitečnost při vlastní práci. Také formální podoba všech veličin a rovnic je přizpůsobena stylu obvyklému ve fyzikálních textech.

1.3.1 HILBERTŮV PROSTOR[2]

Abstraktní Hilbertův prostor $\mathcal{H}$ je komplexní vektorový prostor na němž je definován skalární součin. Jsou-li $|f\rangle$ a $|g\rangle$ dva vektory z $\mathcal{H}$, budeme jejich skalární součin značit jako

1 Jiným názorným příkladem je vlastní vektor operátoru rotace v E_3. Rotace dle osy **n** o úhel $\alpha \neq 0$ převádí libovolný vektor z E_3 ve vektor jiný s výjimkou vektorů ležících podél osy rotace, které nechává beze změny. Vektor ***n*** je tak vlastním vektorem operátoru rotace s vlastním číslem rovným jedné. Rotace a jejich reprezentace pomocí (unitárních) operátorů jsou předmětem kap. 5, § 4.

2 Podrobnější výklad vlastností vektorových prostorů a Hilbertova prostoru zvlášť je uveden v dodatku C.

$\langle f|g\rangle$. Z axiomů skalárního součinu uveďme např. relaci *symetrie*: $\langle g|f\rangle = \langle f|g\rangle^*$, kde hvězdička označuje komplexní sdružení, dále *pozitivnost*: $\langle f|f\rangle \geq 0$ (rovnost platí tehdy a jen tehdy, když $|f\rangle = 0$) a *antilinearitu* v prvním argumentu: $\langle cf|g\rangle = c^* \langle f|g\rangle$, kde c je komplexní číslo. Skalární součin umožňuje zavést pojem ortogonality vektorů – říkáme, že $|\varphi\rangle$ a $|\psi\rangle$ jsou kolmé, když $\langle\varphi|\psi\rangle = 0$ – a pojem velikosti vektorů: říkáme, že $|\psi\rangle$ je normovaný (na jedničku), když $\| |\varphi\rangle \| = \sqrt{\langle\varphi|\varphi\rangle} = 1$ čili $\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$.

Jednou z implementací Hilbertova prostoru je prostor $L^2(\Omega)$ všech kvadraticky integrovatelných komplexních funkcí reálné proměnné na oblasti Ω, v kontextu kvantové teorie pak mluvíme o stavových vektorech v souřadnicové reprezentaci či o vlnových funkcích. Jsou-li $f(x)$ a $g(x)$ dvě funkce z $L^2(\Omega)$, jejich skalární součin definujeme jako

$$\langle f|g\rangle = \int_\Omega f^*(x) g(x)\, \mathrm{d}x. \tag{3.1.1}$$

Při pevném f představuje skalární součin $\langle f|g\rangle$ lineární funkcionál, jenž každému ketu $|g\rangle$ přiřazuje (komplexní) číslo $\langle f|g\rangle$. Tyto lineární funkcionály tvoří rovněž vektorový prostor, jehož prvky budeme (opět dle Diraca), nazývat bra-vektory[1] a značit $\langle f|$. Platí tudíž

$$\langle f|\big(|g\rangle\big)\rangle = \langle f|g\rangle.$$

Vektorový prostor, jehož elementy jsou bra-vektory, nazýváme duální k prostoru původnímu. V Hilbertově prostoru je korespondence $|f\rangle \leftrightarrow \langle f|$ jednoznačná a duální prostor je rovněž Hilbertův prostor. Kdybychom však vzali např. podprostor $\mathscr{S} \subset L^2$ tvořený funkcemi, které exponenciálně klesají v nekonečnu, bude duální prostor $\mathscr{S}'$ nejen větší než původní prostor $\mathscr{S}$, ale i větší než Hilbertův prostor. Bude totiž obsahovat i funkce, které nejsou kvadraticky integrabilní (jako např. rovinnou vlnu), ale pro něž existuje skalární součin (3.1.1) s každou z funkcí z $\mathscr{S}$. Právě v tomto smyslu vystupují v kvantové teorii i zobecněné funkce, jako je Diracova δ-funkce; podrobnější analýzu nalezne čtenář v dodatku B a C.

Všiměme si, že de Broglieho vlna, $\psi(x) = A\mathrm{e}^{ikx}$, která stála u zrodu kvantové teorie jako vlnová funkce popisující volnou částici, se nekvalifikuje jako přípustný „stavový vektor“, neboť nepatří do $L^2(E_1)$ – není totiž na intervalu E_1 kvadraticky integrabilní. V principu je možné omezit matematiku kvantové mechaniky na Hilbertův prostor, jako to učinil J. von Neumann[2], ale čas dal za pravdu P. A. M. Diracovi, který formuloval kvantovou mechaniku[3] za použití vlastních funkcí (ze spojitého spektra) vybočujících z Hilbertova prostoru; teorie distribucí a zavedení tzv. Gelfandova tripletu jako abstraktní nadstavby pak dodatečně poskytly matematické ospravedlnění jeho postupu. Podrobněji viz dodatek C.8.

---

1 Podle druhé části anglického výrazu pro závorku, *bracket:* $\langle bra|c|ket\rangle$.
2 Neumann, J. von: *Mathematische Grundlangen der Quantenmechanik.* Berlin: Springer Verlag 1932.
3 Dirac, P. A. M.: *The Principles of Quantum Mechanics.* 4. vyd. Oxford University Press 1958.

1.3.2 OPERÁTORY.[1] VLASTNÍ VEKTORY A VLASTNÍ ČÍSLA.

Operátory vyskytující se v kvantové mechanice jsou lineární; jsou-li $|u_1\rangle, |u_2\rangle$ libovolné vektory z vektorového prostoru $\mathfrak{R}$ a c_1, c_2 komplexní čísla, pak operátor $\hat{A}$ je lineární, pokud platí:

$$\hat{A}\left(c_1|u_1\rangle + c_2|u_2\rangle\right) = c_1\hat{A}|u_1\rangle + c_2\hat{A}|u_2\rangle. \tag{3.2.1}$$

Nadále budeme linearitu operátorů automaticky předpokládat.

Operátor $\hat{A}^\dagger$ je hermitovsky sdružený k $\hat{A}$ na prostoru $\mathfrak{R}$, platí-li pro libovolné dva vektory $|f\rangle, |g\rangle$ z $\mathfrak{R}$ vztah:

$$\langle f|\hat{A}g\rangle = \langle \hat{A}^\dagger f|g\rangle. \tag{3.2.2}$$

Platí-li $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ říkáme, že $\hat{A}$ je hermitovský operátor.

Hermitovský operátor $\hat{P}$ splňující podmínku $\hat{P}\hat{P} = \hat{P}$ se nazývá projekční. Je-li $|u\rangle$ normovaný vektor z $\mathfrak{R}$, pak operátor

$$\hat{P}_u = |u\rangle\langle u| \tag{3.2.3}$$

je projekční operátor promítající do směru $|u\rangle$, protože působí-li $\hat{P}_u$ na libovolný ket $|f\rangle$, pak výsledný vektor míří „podél" $|u\rangle$:

$$\hat{P}_u|f\rangle = |u\rangle\langle u|f\rangle.$$

Projekční operátory můžeme sčítat; je-li prostor $\mathfrak{R}$ N-rozměrný a normované vektory $|u_i\rangle$, $i=1,...,N$, jsou vzájemně kolmé, pak operátor $\hat{P}_{\mathfrak{R}}$ definovaný vztahem $\hat{P}_{\mathfrak{R}} = \sum_{i=1}^{N}|u_i\rangle\langle u_i|$ promítá na celý prostor $\mathfrak{R}$, takže

$$\hat{P}_{\mathfrak{R}} = \sum_{i=1}^{N}|u_i\rangle\langle u_i| = \hat{1}. \tag{3.2.4}$$

Vztahu (3.2.4) říkáme *rozklad jedničky* a představuje podmínku úplnosti ortonormálního souboru vektorů $|u_i\rangle$ v $\mathfrak{R}$. Rozklad jedničky často používáme pro formální úpravy a Diracova braketová notace je pro jeho použití obzvláště účelná. Např. můžeme psát:

$$\begin{aligned}\hat{A} = \hat{1}\hat{A}\hat{1} &= \sum_{i,j=1}^{N}\hat{P}_i\hat{A}\hat{P}_j = \sum_{i=1}^{N}|u_i\rangle\langle u_i|\hat{A}\sum_{j=1}^{N}|u_j\rangle\langle u_j| \\ &= \sum_{i,j=1}^{N}|u_i\rangle\langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle\langle u_j|.\end{aligned} \tag{3.2.5}$$

---

1 Matematicky fundovanější výklad vlastností operátorů v Hilbertově prostoru je uveden v dodatku C a D. Tam jsou rovněž diskutovány problémy vznikající v nekonečné dimenzi a problém zobecněných vlastních funkcí operátorů.

Působení operátoru $\hat{A}$ v $\mathfrak{R}$ je tudíž zcela popsáno maticí tohoto operátoru $A_{ij} = \langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle$ ve zvolené bázi $\{|u_i\rangle\}$. Všimněme si, že platí

$$A^{\dagger}_{ij} = \langle u_i | \hat{A}^{\dagger} | u_j \rangle = \langle u_i | \hat{A}^{\dagger} u_j \rangle = \langle \hat{A} u_i | u_j \rangle = \langle u_j | \hat{A} u_i \rangle^{*} = A^{*}_{ji}, \tag{3.2.6}$$

takže matice hermitovsky sdruženého operátoru $\hat{A}^{\dagger}$ je rovna hermitovsky sdružené matici operátoru $\hat{A}$.

Veličiny, které nejsou přímo měřitelné, nemusí být reprezentovány hermitovskými operátory (viz níže). Operace rotace či posunutí v prostoru E_3 jsou v prostoru ketů reprezentovány operátory, které nejsou hermitovské, ale *unitární*. Operátor $\hat{U}$ je unitární, platí-li:

$$\hat{U}\hat{U}^{\dagger} = \hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \hat{1}. \tag{3.2.7}$$

(V nekonečně rozměrných prostorech jsou obě relace (3.2.7) podstatné.) Zvolíme-li v $\mathfrak{R}$ libovolnou ortonormální bázi $|u_i\rangle$, $i = 1,...,N,$ má definice (3.2.7) podobu definice unitární matice

$$\sum_{i=1}^{N} U_{ki}\, U^{*}_{\ell i} = \sum_{i=1}^{N} U^{*}_{ik}\, U_{i\ell} = \delta_{k\ell}. \tag{3.2.8}$$

Jelikož z definic (3.2.2) a (3.2.7) plyne pro libovolné dva kety $|f\rangle, |g\rangle$

$$\langle \hat{U}f | \hat{U}g \rangle = \langle f | \hat{U}^{\dagger}\hat{U}g \rangle = \langle f | g \rangle, \tag{3.2.9}$$

zachovávají unitární operátory „úhly“ mezi vektory[1] a jejich velikost, takže převádějí jednu ortonormální bázi $|u_i\rangle$, $i = 1,...,N$, v druhou ortonormální bázi $|w_i\rangle$, $i = 1,...,N$:

$$|w_i\rangle = \hat{U}|u_i\rangle, \;\; i = 1,...,N. \tag{3.2.10}$$

Je-li operátor $\hat{A}$ popsán v původní bázi maticí A_{ij} (viz definici (3.2.5))

$$\hat{A}|u_i\rangle = \sum_{j=1}^{N} A_{ji}|u_j\rangle,$$

pak v nové bázi $\{|w_i\rangle\}$ je jeho působení popsáno maticí A'_{ij} definovanou vztahem

$$\hat{A}|w_i\rangle = \sum_{j=1}^{N} A'_{ji}|w_j\rangle, \tag{3.2.11}$$

což můžeme přepsat ve tvaru

---

1 Úhel mezi vektory v N-rozměrném prostoru můžeme zavést zobecněním vztahu z třírozměrného prostoru: $\cos\alpha = \boldsymbol{uv} / |\boldsymbol{u}||\boldsymbol{v}|$.

$$\hat{U}^{\dagger}\hat{A}\hat{U}\left|u_i\right\rangle = \sum_{j=1}^{N} A'_{ji}\left|u_j\right\rangle \tag{3.2.12}$$

Matice $\|A'\|$ a $\|A\|$ spojené vztahem

$$\|A'\| = \|U^{\dagger}\|\|A\|\|U\| \tag{3.2.13}$$

se nazývají *unitárně ekvivalentní* a totéž platí i pro operátory $\hat{A}$ a $\hat{A}'$ spojenými vztahy

$$\hat{A}' = \hat{U}^{\dagger}\hat{A}\hat{U}. \tag{3.2.14}$$

Unitárně ekvivalentní matice a operátory mají mnoho společného, neboť popisují totéž lineární zobrazení jen v jiné bázi. Mají kupříkladu stejné spektrum (i když jiné vlastní vektory) a splňují tytéž komutační relace.

Předpis (3.2.14) popisuje transformaci operátorů při změně báze. Alternativně můžeme provést unitární transformaci ketů v téže bázi předpisem

$$\left|\psi'\right\rangle = \hat{U}\left|\psi\right\rangle,\ \left|\varphi'\right\rangle = \hat{U}\left|\varphi\right\rangle,.... \tag{3.2.15}$$

Odpovídající transformaci operátorů pak definujme požadavkem:

$$\hat{A}\left|\psi\right\rangle = \left|\varphi\right\rangle \Leftrightarrow \hat{A}'\left|\psi'\right\rangle = \left|\varphi'\right\rangle. \tag{3.2.16}$$

V tomto případě snadno nalezneme, že

$$\hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{\dagger}. \tag{3.2.17}$$

Také tato dvojice operátorů $\hat{A}$ a $\hat{A}'$ je unitárně ekvivalentní. Prvou transformaci nazýváme pasivní, druhou aktivní. V E_3 by první odpovídala vyjádření vektorů a lineárních zobrazení v pootočeném souřadném systému, druhá vyjádření pootočených vektorů a lineárních zobrazení v pevné bázi. S oběma případy se v dalším setkáme.

* * * * *

Je-li operátor $\hat{F}$ definován na prostoru $\mathfrak{R}$, pak nenulový vektor $\left|f\right\rangle \in \mathfrak{R}$ splňující relaci

$$\hat{F}\left|f\right\rangle = \lambda\left|f\right\rangle, \tag{3.2.18}$$

se nazývá (jak jsme již dříve uvedli) vlastní vektor operátoru $\hat{F}$ a λ je odpovídající vlastní číslo. Je-li $\hat{F}$ v (3.2.18) hermitovský operátor, platí řada významných vlastností (jejichž důkaz je uveden v dodatcích C a D):

(a) vlastní čísla jsou reálná,

(b) vlastní vektory lze vždy volit ortogonální a jelikož jejich velikost je libovolná, tak i ortonormální. Budeme dále vždy předpokládat, že vlastní vektory hermitovských

operátorů reprezentující pozorovatelné veličiny tvoří bázi v prostoru, v němž je hermitovský operátor definován, a

(c) je-li $\hat{G}$ rovněž hermitovský operátor, pak společný systém vlastních vektorů $\hat{F}$ a $\hat{G}$ existuje tehdy a jen tehdy, když $\hat{F}$ a $\hat{G}$ komutují.

Jelikož vlastní čísla odpovídají dle postulátu II (b) měřeným hodnotám fyzikálních veličin, musí být reálná, čímž je objasněno, proč pozorovatelné veličiny musí být reprezentovány hermitovskými operátory.

Všiměme si, že matice hermitovského operátoru v ortonormální bázi svých vlastních vektorů je diagonální:

$$\hat{F} = \sum_{k,\ell} |F_k\rangle\langle F_k|\hat{F}|F_\ell\rangle\langle F_\ell| = \sum_{k,\ell} |F_k\rangle F_\ell \delta_{k\ell} \langle F_\ell| = \sum_k |F_k\rangle F_k \langle F_k|, \tag{3.2.19}$$

což můžeme přepsat pomocí projekčních operátorů jako

$$\hat{F} = \sum_k F_k \hat{P}_k, \;\; \hat{P}_k = |F_k\rangle\langle F_k|. \tag{3.2.20}$$

Existuje-li k vlastnímu číslu F_k pouze jediný vlastní vektor $|F_k\rangle$, říkáme, že číslo F_k je nedegenerované. Existuje-li naopak takových (lineárně nezávislých) vektorů více, $|F_{ki}\rangle$, $i = 1,...,s_k$, pak i každý vektor

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{s_k} c_i |F_{ki}\rangle, \tag{3.2.21}$$

kde c_i, $i = 1,...,s_k$ jsou libovolné koeficienty, je vlastním vektorem $\hat{F}$ s vlastním číslem F_k. Tvoří-li tyto vektory $|F_{ki}\rangle$ ortonormální systém, pak unitární transformace U převádí původní systém vlastních vektorů $|F_{kj}\rangle$, $j = 1,...,s_k$ v rovnocenný ortonormální systém vlastních vektorů $|\tilde{F}_{kj}\rangle$, $j = 1,...,s_k$:

$$|\tilde{F}_{kj}\rangle = \sum_{i=1}^{s_k} U_{ji} |F_{ki}\rangle, \quad j = 1,...,s_k. \tag{3.2.22}$$

Poznamenejme, že vzhledem k potenciální degeneraci vlastních čísel, je obzvláště výhodný zápis (3.2.20) hermitovského operátoru $\hat{F}$ v bázi svých vlastních vektorů, protože projekční operátory $\hat{P}_k$ pak promítají na celý podprostor vlastních stavů příslušných (degenerovanému) vlastnímu číslu F_k a zápis je invariantní vzhledem k transformacím (3.2.22).

* * * * *

Zatímco stavové vektory musí být vektory z Hilbertova prostoru, Hilbertův prostor je příliš malý, aby v něm úloha na vlastní vektory některých fundamentálních operátorů kvantové

mechaniky měla řešení. Jak snadno nalezneme, mají v souřadnicové reprezentaci vlastní funkce $\hat{x}$ s vlastním číslem x_0 a vlastní funkce $\hat{p}$ s vlastním číslem p_0 tvar:

$$f_{x_0}(x) = \delta(x - x_0), \quad f_{p_0}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0 x/\hbar}, \tag{3.2.23}$$

přičemž první není funkcí v běžném slova smyslu a druhá není kvadraticky integrabilní (ale z hlediska Hilbertova prostoru jsou obě stejně „singulární“, protože při vhodné změně báze v Hilbertově prostoru si prohodí místa). Oba operátory mají také spojité spektrum.

Zatímco vlastní vektory patřící k diskrétnímu spektru leží v Hilbertově prostoru, vlastní vektory spojitého spektra nikoliv; vlastní vektory diskrétního spektra lze tudíž normovat obvyklým způsobem, zatímco vlastní vektory odpovídající spojitému spektru lze normovat pouze na δ-funkci

$$\langle f_\lambda \,|\, f_{\lambda'} \rangle = \delta(\lambda - \lambda'). \tag{3.2.24}$$

Nechceme-li proto vyřadit z používaného matematického aparátu zobecněné funkce, jako jsou δ-funkce a rovinné vlny, musíme jako vlastní vektory (funkce) připustit i funkce nepatřící do $L^2(E_1)$. Jak uvidíme dále, při výpočtu měřitelných veličin se zobecněné vlastní funkce vyskytují v kvantověmechanickém formalismu fakticky pouze ve „skalárních součinech“ s vlnovými funkcemi z L^2. Můžeme proto zmírnit požadavek na přípustnost vlastních funkcí např. tak, že připustíme v definici (3.2.18) všechna f_λ, pro něž

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_\lambda^*(x)\,\psi(\lambda)\,\mathrm{d}\lambda \in L^2(E_1) \tag{3.2.25}$$

pro každé $\psi \in L^2(E_1)$. Na takové vlastní funkce pak rozšíříme i definici skalárního součinu. V tomto smyslu jsou pak přípustné i dříve nalezené vlastní funkce operátorů $\hat{x}$ a $\hat{p}$. V případě první z funkcí (3.2.23) se integrál (3.2.25) redukuje přímo na zvolenou funkci $\psi(x)$, v případě druhé z funkcí (3.2.23) je integrál (3.2.25) roven Fourierovu obrazu funkce $\psi(x)$, který patří do $L^2(E_1)$, jak se dokazuje v teorii Fourierova integrálu.

1.4 ABSTRAKTNÍ HILBERTŮV PROSTOR A HILBERTŮV PROSTOR KONKRÉTNÍHO SYSTÉMU

Dříve než přikročíme k dalším postulátům kvantové teorie, bude účelné alespoň předběžně stanovit, jak se vektory a operátory příslušné zcela abstraktně chápanému Hilbertovu prostoru vztahují k reálným fyzikálním systémům. K dané dimenzi, ať již konečné, nebo spočetně nekonečné[1], přísluší jediný abstraktní unitární či Hilbertův prostor, „stejný“ pro

1 *Mechanickým systémům* nerelativistické teorie s konečným počtem stupňů volnosti odpovídá v kvantovém popisu Hilbertův prostor se spočetně nekonečnou dimenzí (tj. lze v něm zavést ortonormovanou bázi, jejíž vektory mohou být očíslovány). Naproti tomu v *kvantové teorii pole* pracujeme s prostory o nespočetně nekonečné dimenzi. To se týká již problémů zdánlivě nenápadných, jako je záření černého tělesa, z kterého se vlastně pojem kvanta zrodil.

všechny systémy. Přiřadit prostor stavů k zvolenému systému znamená dát Hilbertovu prostoru určitou vnitřní strukturu, například zavedením vhodné ortonormované báze. Mluví se o *sestrojení Hilbertova prostoru*. Jsou tu dvě možné cesty:

(a) V případech, kdy jsme vedeni názorem, můžeme za výchozí vzít Postulát I a stavové vektory zavést prostřednictvím jejich zobrazení (vzájemně jednoznačného) do prostoru $L^2(\Omega)$ funkcí na konfiguračním prostoru Ω, který jsme předem intuitivně vyvolili. To je např. případ jedné částice popsaný rovnicemi (2.1).

(b) Obecnějším a zároveň fyzikálnějším postupem je vyjít z Postulátu II a zvolit základní pozorovatelné pro daný systém a jejich charakteristické určující vlastnosti. V daném případě to znamená vyjít z komutačních relací (2.2) a z nich zpětně k (2.1) dojít – příklad takzvaného *kanonického kvantování*.

Zajisté by bylo vítané, kdyby pro sestrojení prostoru stavů k danému systému existovalo univerzální pravidlo, podle kterého by bylo možno postupovat a které by vystupovalo v celém schématu kvantové teorie jako další postulát. To však není v úplnosti možné a vlastně pokaždé je nutno postup „kvantování“ podrobně posoudit. Je však několik obecných vodítek, která ve většině případů postačí:

1. Pro systémy s klasickou analogií, tedy takové, jejichž pozorovatelné mají význam i v mezním případě zanedbání kvantových efektů, je kanonické kvantování podrobně diskutováno v následujícím odstavci.
2. K nejdůležitějším pozorovatelným, jako je hybnost nebo moment hybnosti je možno dospět také zkoumáním důsledků *symetrie Eukleidova prostoru*, jako je jeho homogenita a izotropie. To je diskutováno v kap. 5.
3. Má-li systém anebo jeho části dodatečné, čistě *kvantové stupně volnosti*, je nutno pro jejich popis vybudovat odpovídající prostor stavů, zpravidla o konečné dimenzi. Příkladem tu je zavedení spinu elektronu v nerelativistické teorii; jeho existence je zde nezávislým postulátem a pro jeho popis je zaveden spinový prostor dimenze 2. Tomu je věnována kap. 6.
4. Pro *složený systém*, tvořený několika podsystémy, je možno prostor stavů vybudovat jako direktní součin prostorů stavů těchto podsystémů, viz § 4.4.

Je nutno upozornit na odlišnost prvních tří bodů od posledního. Body 1.–3. mají heuristický ráz, poskytují nám vodítko, nikoli jednoznačně platné výsledky. Bod 4. je součástí formalismu a má exaktní deduktivní charakter. Zvláštní postavení má bod 1. Konstrukce Hilbertova prostoru má v tomto případě skutečně ráz *kvantování*, tedy postupu, který historicky sehrál jedinečnou úlohu: umožnil odrazit se od pevniny klasické fyziky a na bárce kvantování se vydat na neznámý oceán kvantového světa. Svůj význam sehrává i dnes. Vztah obou světů, kvantového a klasického zůstává jedním z klíčových témat kvantové teorie. Zbytek § 4 je věnován prvnímu z uvedených aspektů této problematiky, možnostem kanonického kvantování.

1.4.1 SYSTÉMY S KLASICKOU ANALOGIÍ: KARTÉZSKÉ SOUŘADNICE

Začneme od kanonického kvantování v případě, kdy je tento postup zaručen, totiž od zobecnění rovnic (2.2) na případ mnoha částic:

* * * * *

Postulát III: O kanonickém kvantování kartézských proměnných
Jsou-li x_i, p_i, $i = 1,\ldots, N$ kartézské kanonicky sdružené proměnné[1]*, pak jejich operátory splňují komutační relace*

$$\left[\hat{x}_i, \hat{p}_j\right] = i\hbar\delta_{ij}, \ \left[\hat{x}_i, \hat{x}_j\right] = \left[\hat{p}_i, \hat{p}_j\right] = 0; \ i, j = 1,\ldots, N. \tag{4.1.1}$$

* * * * *

Naším cílem bude z tohoto postulátu odvodit vlastnosti těchto pozorovatelných a dalších veličin z nich sestrojených jako jejich funkce. Označme

$$x = x_1,\ldots, x_N, \quad p = p_1,\ldots, p_N \tag{4.1.2}$$

a obecněji pro libovolné zobecněné souřadnice

$$q = q_1,\ldots, q_N, \quad p = p_1,\ldots, p_N. \tag{4.1.3}$$

Podobně pro operátory

$$\begin{aligned} &\hat{x} = \hat{x}_1,\ldots, \hat{x}_N, \quad \hat{p} = \hat{p}_1,\ldots, \hat{p}_N, \\ &\hat{q} = \hat{q}_1,\ldots, \hat{q}_N, \quad \hat{p} = \hat{p}_1,\ldots, \hat{p}_N. \end{aligned} \tag{4.1.4}$$

Z platnosti komutačních relací (4.1.1) plyne úplnou indukcí, že alespoň pro každou funkci $F(x)$ resp. $F(p)$, již lze rozvést v mocninnou řadu, platí pro každé $s = 1,\ldots, N$:

$$[\hat{x}_s, \hat{F}(\hat{p})] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{p}_s} \hat{F}(\hat{p}), \quad [\hat{p}_s, \hat{F}(\hat{x})] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{x}_s} \hat{F}(\hat{x}), \tag{4.1.5}$$

kde parciální derivace vpravo provedeme formálně v rozvoji funkce do mocninné řady.[2]

---

1 Jsou-li q_i, $\dot{q}_i$, $i = 1,\ldots, N$ zobecněné souřadnice a rychlosti, pak hybnosti p_i kanonicky sdružené se souřadnicemi q_i jsou definovány vztahem $p_i = \dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$, kde L je Lagrangeova funkce, jež je pro konzervativní síly dána jako rozdíl kinetické a potenciální energie, $L = T - V$. Hamiltonova funkce, klíčová veličina kanonického formalismu, je dána jako $H = \sum_{i=1}^{N} p_i \dot{q}_i - L$ a nezávisí-li Lagrangeova funkce na čase, je rovna celkové energii, $H = T + V$.

2 Pro konstanty a lineární funkce tvrzení triviálně platí. Libovolný polynom pak vytváříme lineární kombinací součinů. Pro komutátor součtu a součinu však platí stejná algebraická pravidla jako pro derivace.

Mějme nyní společný vlastní vektor všech (komutujících) operátorů souřadnice

$$\hat{x}_i|\Phi\rangle = a_i|\Phi\rangle,\ \ i=1,...,N, \tag{4.1.6}$$

kde a_i jsou nějaká reálná čísla. Zvolme dále N-tici reálných čísel $\{b_i\}$ a pomocí unitární transformace definujme vektor

$$\big|\{b_\ell\}\big\rangle = \mathrm{e}^{(i\hbar)^{-1}\sum \hat{p}_j(b_j-a_j)}|\Phi\rangle = \hat{F}(\hat{p})|\Phi\rangle. \tag{4.1.7}$$

S pomocí (4.1.5) dostáváme

$$\begin{aligned}\hat{x}_i\big|\{b_\ell\}\big\rangle &= \hat{F}(\hat{p})\,a_i\big|\Phi\big\rangle + i\hbar\frac{\partial}{\partial\hat{p}_i}\hat{F}(\hat{p})\big|\Phi\big\rangle \\ &= b_i\big|\{b_\ell\}\big\rangle.\end{aligned} \tag{4.1.8}$$

Protože čísla b_i jsou libovolná, znamená to, že operátory souřadnice mají neohraničené spojité spektrum vyplňující interval $(-\infty,+\infty)$. Totéž pochopitelně platí o operátorech hybnosti.

Zatímco původní stav (4.1.6) popisuje částice v místech $a_i, i=1,...,N$, vektor $\big|\{b_\ell\}\big\rangle \equiv \big|b_1,...,b_N\big\rangle$ v (4.1.8) popisuje částice v místech $b_i, i=1,...,N$. Operátor

$$\hat{F}(\hat{p}) = \mathrm{e}^{(i\hbar)^{-1}\sum \hat{p}_i(b_i-a_i)}$$

tak popisuje posunutí v konfiguračním prostoru o vektor $b-a=(b_1-a_1,...,b_N-a_N)$.[1]

◖ Tento výsledek závisí jen na komutačních relacích (2.2) resp. (4.1.1) (ty je nutno použít k odvození (4.1.5)) a bývá označován jako *Pauliho věta*: jestliže dvojice samosdružených operátorů $\hat{P},\hat{Q}$ splňuje vztah $[\hat{P},\hat{Q}]=i\hbar$, pak oba operátory mají spojité spektrum vyplňující celou přímku. ◗

Lineární obal vektorů $\big|\{x_\ell\}\big\rangle$, tj. normovatelných lineárních kombinací a jejich hromadných bodů je izomorfní s $L^2(E_N)$, kde N-rozměrný Eukleidův prostor vzniká jako kartézský součin N intervalů $(-\infty,+\infty)$:

$$|\Psi\rangle = \int \Pi\,\mathrm{d}x_i\big|\{x_\ell\}\big\rangle\big\langle\{x_\ell\}\big|\Psi\big\rangle \ \Leftrightarrow\ \psi(x)\equiv\big\langle\{x_\ell\}\big|\Psi\big\rangle. \tag{4.1.9}$$

Vidíme, že konfigurační prostor nemusíme předpokládat, vzniká přirozeným způsobem jako obor měřitelných hodnot kartézských souřadnic.

Působení operátorů hybnosti $\hat{p}_i$ na lineárním obalu vektorů $\big|\{x_\ell\}\big\rangle$ najdeme využitím vztahů (4.1.9) a (4.1.7):

---

1 S operátorem posunutí se znova setkáme v kap. 5 při diskusi homogenity prostoru a roli symetrie v kvantové mechanice obecně.

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\tfrac{1}{\varepsilon}\big[\psi(x_1,\cdots,x_r+\varepsilon,\cdots,x_N)-\psi(x_1,\cdots,x_r,\cdots,x_N)\big]$$
$$=\lim_{\varepsilon\to 0}\tfrac{1}{\varepsilon}\big[\langle\{x_\ell\}|\mathrm{e}^{-(i\hbar)^{-1}\hat{p}_r\varepsilon}|\Psi\rangle-\langle\{x_\ell\}|\Psi\rangle\big] \tag{4.1.10}$$

a tedy

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_r}\psi(x)=\langle\{x_\ell\}|\hat{p}_r|\Psi\rangle, \tag{4.1.11}$$

který standardně zapisujeme jako

$$\hat{p}_r\langle\{x_\ell\}|\Psi\rangle\equiv\hat{p}_r\psi(x).$$

V případě kartézských proměnných se tedy podařilo splnit kanonické komutační relace očekávaným způsobem,

$$\hat{x}_i=x_i,\quad \hat{p}_i=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i},\quad i=1,...,N. \tag{4.1.12}$$

◖ Bylo dokázáno (věta Stoneova-von Neumannova), že všechny ireducibilní reprezentace kanonických komutačních relací (4.1.1) jsou unitárně ekvivalentní s (4.1.12). Důležité jsou například unitární transformace, které nemění operátory souřadnic. Ty jsou tvaru $\hat{U}=\mathrm{e}^{-i\Phi(\hat{x}_\ell)}$, kde $\Phi(x_i)$ je reálná funkce. Dostáváme

$$\hat{U}^\dagger\hat{x}_i\hat{U}=\mathrm{e}^{i\Phi(\hat{x}_\ell)}\,\hat{x}_i\,\mathrm{e}^{-i\Phi(\hat{x}_\ell)}=\hat{x}_i$$
$$\hat{U}^\dagger\hat{p}_i\hat{U}=\mathrm{e}^{i\Phi(\hat{x}_\ell)}\,\hat{p}_i\,\mathrm{e}^{-i\Phi(\hat{x}_\ell)}=\hat{p}_i-\hbar\partial_i\Phi(\hat{x}_\ell). \tag{4.1.13}$$

Je poučné ověřit, že transformované hybnosti navzájem komutují. Tato transformace je příkladem tzv. *kalibrační transformace*, která je lokální a spočívá vlastně v přefázování vektorů báze: $\hat{U}|\{x_\ell\}\rangle=\mathrm{e}^{-i\Phi(x_\ell)}|\{x_\ell\}\rangle$, viz kap. 13, § 2.1. ◗

Další pozorovatelné budou popsány operátory, které rovněž vyvodíme z klasické analogie, ovšem s uvážením nekomutativnosti základních operátorů. Uvažujeme systém n částic a pro souřadnice a hybnosti použijeme vektorové podoby. Tedy $\hat{\boldsymbol{r}}_J=\hat{x}_{J1}\boldsymbol{e}_1+\hat{x}_{J2}\boldsymbol{e}_2+\hat{x}_{J3}\boldsymbol{e}_3$, kde $\boldsymbol{e}_i, i=1,2,3$ jsou jednotkové vektory ve směru souřadných os, podobně $\hat{\boldsymbol{p}}_J$. Zpět k indexování (4.1.4) vede předpis $Ju\to i$, $J=1,\ldots,n$; $u=1,2,3;$. $i=1,\ldots,N=3n$. Nejdůležitějšími příklady, kdy nevznikají těžkosti jsou:

$\hat{\boldsymbol{R}}=(\sum_J m_J)^{-1}\sum_J m_J\hat{\boldsymbol{r}}_J$	Polohový vektor těžiště
$\hat{\boldsymbol{P}}=\sum_J\hat{\boldsymbol{p}}_J$	Celková hybnost soustavy
$\hat{\boldsymbol{L}}=\sum_J\hat{\boldsymbol{r}}_J\times\hat{\boldsymbol{p}}_J$	Celkový moment hybnosti

$\hat{T} = \sum_J (2m_J)^{-1} \hat{\boldsymbol{p}}_J^2$	Celková kinetická energie
$\hat{V} = \sum_J V_J^{(1)}(\hat{\boldsymbol{r}}_J) + \sum_{JK} V_{JK}^{(2)}(\hat{\boldsymbol{r}}_J, \hat{\boldsymbol{r}}_K) + \ldots$	Potenciální energie daná vnějšími poli, párovými interakcemi atd.
$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$	Hamiltonián pro konzervativní systém rovný celkové energii

Tvar uvedených veličin je shodný s klasickými výrazy, protože v součinech vystupují jen komutující operátory (i u momentu hybnosti se ve vektorovém součinu násobí nestejné souřadnice a hybnosti).

Tam, kde kanonicky sdružené veličiny vystupují v součinu, je přechod od klasických výrazů k odpovídajícím kvantovým pozorovatelným nesnadný. Uvažujme jediný pár kanonických proměnných x a p, $\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$. Co přiřadíme klasické veličině xp? V nejjednodušších případech provedeme „symetrizaci“, aby vznikla kvantová pozorovatelná, tedy samosdružený („hermitovský“) operátor:

$$xp \to \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) \tag{4.1.14}$$

To je ovšem heuristický krok a jeho oprávněnost můžeme posoudit až dodatečně.

Příklad operátoru $\frac{1}{2}\{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}\}$ vypadá poněkud uměle, ale ve skutečnosti se vyskytuje dosti často. Například unitární operátor změny měřítka působící na vlnovou funkci podle vztahu

$$\hat{U}(\lambda)\psi(x) = \lambda^{\frac{1}{2}}\psi(\lambda x), \quad \lambda > 0$$

má operátorovou podobu

$$\hat{U}(\lambda) = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}\{\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}\}\ln\lambda}. \tag{4.1.15}$$

Chápeme-li $\hat{x}, \hat{p}$ podle konvence (4.1.4), platí tento vztah beze změny i ve vícerozměrném případě. K tomu se ještě vrátíme v § 9.6 při odvozování věty o viriálu.

Známějším příkladem tohoto symetrizačního postupu je konstrukce operátoru radiální složky hybnosti, jež je v klasické teorii kanonicky sdružená k velikosti průvodiče $r = |\mathbf{r}|$; zabýval se jí již Dirac v prvním vydání své učebnice kvantové teorie. Prostá symetrizace dává operátor

$$p_r = \frac{\boldsymbol{r}}{r}\boldsymbol{p} \to \hat{p}_r = \tfrac{1}{2}\left\{\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{\hat{r}}\hat{\boldsymbol{p}} + \hat{\boldsymbol{p}}\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{\hat{r}}\right\}, \tag{4.1.16}$$

jenž má ve sférických souřadnicích podobu

$$\hat{p}_r = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r. \tag{4.1.17}$$