



**KVANTOVÁ  
MECHANIKA I.**

---

**JAN KLÍMA – BEDŘICH VELICKÝ**

---

KAROLINUM

## **Kvantová mechanika I.**

**doc. RNDr, Jan Klíma, CSc.**

**prof. RNDr. Bedřich Velický, CSc.**

---

Recenzovali:

prof. RNDr. Michal Lenc, Ph.D.

prof. RNDr. Lubomír Skála, DrSc.

Vydala Univerzita Karlova v Praze

Nakladatelství Karolinum

Obálka Jan Šerých

Sazba studio Lacerta ([www.sazba.cz](http://www.sazba.cz))

Vydání první

© Univerzita Karlova v Praze, 2015

© Jan Klíma, Bedřich Velický, 2015

ISBN 978-80-246-2937-7

ISBN 978-80-246-2957-5 (online : pdf)



Univerzita Karlova v Praze  
Nakladatelství Karolinum 2016

[www.karolinum.cz](http://www.karolinum.cz)  
[ebooks@karolinum.cz](mailto:ebooks@karolinum.cz)



# OBSAH

<b>Část první: Formální stavba kvantové mechaniky</b> .....	13
<b>I. Matematický aparát a principy kvantové mechaniky</b> .....	15
1.1 Úvod .....	15
1.2 Reprezentace stavů a fyzikálních veličin .....	16
1.3 Matematické prostředky kvantové mechaniky .....	19
1.3.1 Hilbertův prostor. Ket vektory a bra vektory .....	19
1.3.2 Operátory. Vlastní vektory a vlastní čísla .....	21
1.4 Abstraktní Hilbertův prostor a Hilbertův prostor konkrétního systému .....	25
1.4.1 Systémy s klasickou analogií: kartézské souřadnice .....	27
1.4.2 Obecnější pohled na kanonické kvantování .....	31
1.4.3 Kvantování neklasických stupňů volnosti .....	34
1.4.4 Složené systémy; entanglement .....	35
1.5 Měření .....	39
1.5.1 Střední hodnoty .....	40
1.5.2 Projekční postulát .....	42
1.6 Teorie reprezentací .....	46
1.6.1 Maticová kvantová mechanika .....	46
1.6.2 Souřadnicová a impulsová reprezentace .....	48
1.7 Harmonický oscilátor .....	51
1.7.1 Oscilátor: systém mnoha tváří .....	51
1.7.2 Oscilátor v abstraktním Hilbertově prostoru .....	52
1.7.3 Energetická reprezentace .....	54
1.7.4 Oscilátor v souřadnicové a impulsové reprezentaci .....	55
1.8 Časová evoluce .....	58
1.8.1 Schrödingerova rovnice. Evoluce středních hodnot. Zákony zachování .....	58
1.8.2 Hamiltonián nezávislý na čase .....	64
1.8.3 Evoluční operátor .....	66
1.8.4 Schrödingerův a Heisenbergův obraz .....	74
1.9 Smíšené stavy a matice hustoty .....	79
1.9.1 Smíšené stavy izolovaného systému .....	79
1.9.2 Matice hustoty (stavový operátor) .....	81
1.9.3 Čisté a smíšené stavy .....	83
1.9.4 Unitární evoluce a redukce stavu měřením pro matice hustoty .....	84
1.9.5 Matice hustoty a formální schéma kvantové teorie .....	88
1.9.6 Zákony zachování, stacionární stavy .....	90
1.9.7 Entropie, kvantová statistika .....	97
1.9.8 Matice hustoty podsystemu. Dekoherece .....	104
1.10 Soustavy mnoha částic .....	107

I.10.1 Princip totožnosti mikročástic . . . . .	107
I.10.2 Reprezentace obsazovacích čísel . . . . .	110
<b>2. Relace neurčitosti . . . . .</b>	<b>117</b>
2.1 Robertsonův vztah . . . . .	118
2.2 Heisenbergovy relace $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$ . . . . .	120
2.3 Relace neurčitosti pro moment hybnosti . . . . .	127
2.4 Fáze kvantového oscilátoru a relace neurčitosti. . . . .	129
<b>Část druhá: Jednoduché systémy, symetrie a spin . . . . .</b>	<b>139</b>
<b>3. Volná částice . . . . .</b>	<b>141</b>
3.1 Stacionární a nestacionární řešení. Rozplývání klubka . . . . .	141
3.2 Svazek volných částic jako vstupní stav pro experiment . . . . .	154
3.3 Volná částice v neproměnném magnetickém poli . . . . .	171
3.4 Aharonovův-Bohmův jev . . . . .	179
<b>4. Pohyb v centrálním poli a moment hybnosti . . . . .</b>	<b>185</b>
4.1 Úvod . . . . .	185
4.2 Moment hybnosti v kvantové mechanice. . . . .	189
4.3 Maticová reprezentace momentu hybnosti . . . . .	192
4.4 Souřadnicová reprezentace momentu hybnosti. . . . .	194
4.5 Jednoduché systémy se sférickou symetrií – radiální pohyb . . . . .	196
4.6 Atom vodíku . . . . .	201
4.6.1 Energetické hladiny a spektrum . . . . .	201
4.6.2 Význam Keplerovy úlohy v kvantové teorii . . . . .	209
4.6.3 Atom vodíku v magnetickém poli. . . . .	215
<b>5. Symetrie . . . . .</b>	<b>219</b>
5.1 Zákony zachování . . . . .	219
5.2 Homogenita času . . . . .	222
5.3 Homogenita prostoru. . . . .	223
5.4 Izotropie prostoru . . . . .	228
5.5 Grupa rotací . . . . .	233
5.6 Skládání momentů hybnosti I . . . . .	235
5.7 Grupa symetrie Schrödingerovy rovnice . . . . .	240
<b>6. Spin . . . . .</b>	<b>245</b>
6.1 Spinová hypotéza . . . . .	245
6.2 Spinový formalismus . . . . .	247
6.3 Spin ve vnějším poli. Spinová rezonance. . . . .	249
6.4 Rotace spinové funkce . . . . .	254
6.5 Skládání momentů hybnosti II. . . . .	258

6.6	Korelace singletního dvouspinového stavu. . . . .	261
6.6.1	EPR paradox. . . . .	261
6.6.2	Bellova nerovnost. . . . .	264
<b>7.</b>	<b>Diracova rovnice. . . . .</b>	<b>269</b>
7.1	Úvod . . . . .	270
7.2	Volná částice . . . . .	272
7.3	Elektron ve vnějším poli. Pauliho rovnice . . . . .	275
7.4	Korekce řádu $(v/c)^2$ . . . . .	278
7.5	Rovnice kontinuity a její nerelativistická limita . . . . .	284
7.6	Hyperjenná interakce. . . . .	289
	<b>Dodatek A: Atomové jednotky . . . . .</b>	<b>295</b>
	<b>Dodatek B: Distribuce . . . . .</b>	<b>298</b>
B1	Tři zavedení $\delta$ -funkce . . . . .	298
B2	Nevlastní vlastní funkce. . . . .	299
B3	Definice distribuce . . . . .	301
B4	Základní vlastnosti temperovaných distribucí. . . . .	303
B5	Struktura prostoru temperovaných distribucí . . . . .	305
B6	$\delta$ -funkce – shrnutí. . . . .	308
	<b>Dodatek C: Lineární prostory kvantové mechaniky . . . . .</b>	<b>311</b>
C1	Vlnové funkce, stavové vektory, matice . . . . .	311
C2	Unitární a Hilbertovy prostory . . . . .	312
C3	Duální prostory, Diracova symbolika . . . . .	317
C4	Lineární ohraničené operátory . . . . .	318
C5	Spektrální teorie operátorů v konečné dimenzi. . . . .	323
C6	Zvláštnosti nekonečné dimenze. Neohraničené operátory. . . . .	327
C7	Diskrétní a spojité spektrum. . . . .	331
C8	Možnosti přesného zavedení vlastních funkcí ve spojitém spektru . . . . .	333
	<b>Dodatek D: Operátorová algebra . . . . .</b>	<b>339</b>
D1	Lineární operátory na unitárních prostorech jako celek . . . . .	339
D2	Funkce operátoru . . . . .	340
D3	Komutující operátory . . . . .	342
D4	Komutátor a antikomutátor . . . . .	344
D5	Stopa operátoru . . . . .	345
D6	Formule Bakerova-Cambellova-Hausdorffova. . . . .	349
	<b>Literatura . . . . .</b>	<b>352</b>
	<b>Rejstřík . . . . .</b>	<b>353</b>





# Úvod

Kvantová teorie je historicky neúspěšnější fyzikální teorií. Za téměř 90 let od svého vzniku dovolila popsat nebo dokonce předpovědět množství různorodých jevů o imponující 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<sup>1</sup>. Dostupná, nyní již v druhém vydání, je tak především dvoudílná učebnice prof. J. Formánka<sup>2</sup>, která svou náročností a celkovou koncepcí je určena hlavně teoretickým fyzikům. Konečně nedávná kniha prof. L. Skály<sup>3</sup> 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 zařízením. 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.<sup>1</sup> Na jeho praxi 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. Doplnkový 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<sup>2</sup>. 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 dovozovala 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:  $e = 4\pi\epsilon_0 = \hbar = m_e = 1$ . 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 jejich 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 mnohačasticového 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 teorii 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.<sup>1</sup> 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**



# Matematický aparát a principy kvantové mechaniky

## I.1 ÚVOD

I když v této knize budujeme formální aparát kvantové teorie systematicky a od začátku, předpokládáme, že čtenář je již obeznán 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 srozumitelně 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 nabitě částice v konstantním magnetickém poli.

## I.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,  $\mathbf{r}(t)$ , 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 naši 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  $\psi_1$  a  $\psi_2$  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<sup>1</sup> budeme tyto *stavové vektory* nazývat ket-vektory a značit  $|\psi\rangle$ , 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.<sup>2</sup>

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<sup>1</sup> 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:

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

Tyto operátory splňují fundamentální – takzvané kanonické – komutační relace

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

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

<sup>1</sup> Jak dále podrobněji uvedeme, vlastní vektory i těch nejjzákladnějších 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 intuitivní. 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<sup>BIS</sup> o stavovém vektoru:** každý vektor Hilbertova prostoru popisuje přípustný stav.

**Postulát II<sup>BIS</sup> 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<sup>BIS</sup> vyplývá princip superposice (Postulát I (b)) jako korolár. Zanedbáváme tedy možnost supervýběrových pravidel<sup>1</sup>, která ovšem v nerelativistické oblasti fyziky atomů a jejich konglomerátů má mizivý význam. Postulát II<sup>BIS</sup> 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  $\hat{A}$

$$\hat{A}|u\rangle = \lambda|u\rangle, \quad (2.3)$$

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. Známy 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 obvyčejná 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  $\lambda$  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):

$$\hat{I}|\psi\rangle = |\psi\rangle = 1 \cdot |\psi\rangle \quad (2.4)$$

Jak naznačeno, má tedy jediné vlastní číslo,  $\lambda = 1$ .<sup>1</sup>

☛ 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<sup>2</sup>

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  $\mathbf{n}$  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  $\mathbf{n}$  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 ortogonalita 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  $\Omega$ , 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

$$\langle f|g\rangle = \int_{\Omega} f^*(x)g(x) dx. \quad (3.1.1)$$

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<sup>1</sup> a značit  $\langle f|$ . Platí tudíž

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

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  $\mathcal{S} \subset L^2$  tvořený funkcemi, které exponenciálně klesají v nekonečno, bude duální prostor  $\mathcal{S}'$  nejen větší než původní prostor  $\mathcal{S}$ , 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  $\mathcal{S}$ . Právě v tomto smyslu vystupují v kvantové teorii i zobecněné funkce, jako je Diracova  $\delta$ -funkce; podrobnější analýzu nalezneme čtenář v dodatku B a C.

Všiměme si, že de Broglieho vlna,  $\psi(x) = Ae^{ikx}$ , 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<sup>2</sup>, ale čas dal za pravdu P. A. M. Diracovi, který formuloval kvantovou mechaniku<sup>3</sup> 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 Grundlagen der Quantenmechanik*. Berlin: Springer Verlag 1932.

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