

## Vlnovo časticové dilemy

Kvantová teória je na stole už storočie. Niekedy sa predstavuje ako nepochopiteľná a nevelmi pekná, ale je otázne čo sa tým myslí. Že ide proti mnohým predstavám hromadeným osobitne od zrodu modernej fyziky ťažko poprieť. Čo sa krásy týka, vrátili sa s ňou v istom zmysle úvahy o "hudbe sfér", tak netreba robiť unáhlené závery. Samozrejme aj táto teória je len model. Žiaden nie je taký pekný ako skutočná príroda.

Niekedy sa o tejto partii hovorí ako o fyzike mikrosвета - ale nie je dobré to chápať tak, že v makrosвете by jej prejavy nebolo vidno. Aj les si niekedy nevšimneme pre stromy. To, že sa všetko neprepadne ku stredu Zeme (vcelku makroskopický efekt) je prejav Pauliho vylučovacieho princípu, ktorý ani nie je ako formulovať len s pojmami klasickej fyziky. Strelka kompasu je makroskopický objekt, aj jej stáčanie k zemským pólom. Ale vysvetliť vlastnosti strelky nejde klasicky. Ešte aj prežitie pohľadu do ohniska či kuchynskej rúry bez ožiarenia tvrdými gama lúčmi je ťažko vysvetliť klasickou fyzikou (ktorá tu predpovedá nereálne tragický scenár).



Obr. 1: Udržať sa na povrchu, používať kompas a prežiť pobyt blízko zahriatych objektov môže byť podľa klasickej fyziky priveľký problém.

## Dvojštrbinový experiment

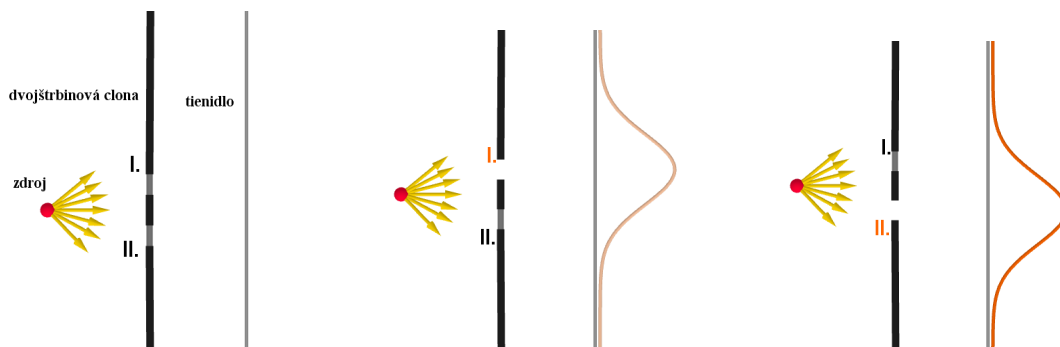
Na prelome 19. a 20. storočia bolo čerstvo objasnených mnoho javov. Ale práve pozorovaním nových a nových situácií začínalo byť zrejmé, že niečo s klasickým popisom je problém. Možno málokto čakal, aké základné predpoklady bude treba prehodnotiť, ale náznaky potreby nejakého prehodnotenia boli. Späťne si môžeme vyberať, ktorý z prejavov tejto skutočnosti použijeme na didaktické účely. Veľmi často sa používa práve **dvojštrbinový experiment** - možno práve kvôli jeho jednoduchosti je na ňom vidno zásadné prvky kvantovej mechnaniky bez rozptyľovanie mnohými detailmi.

Potrebuje nejaký zdroj objektov, ktorých vlastnosti skúmame. Môže sa jednať o elektrónové delo či lampu s podľa možnosti monochromatickým svetlom. Experiment bol skúšaný aj pre mnohomolekulové útvary, a predpokadá sa, že výsledky by platili aj keby sme použili nerozbitné meteority, s predpokladom príslušného nastavenia parametrov (pre náročnosť tohto nastavenia sa s nimi experiment nerobil). Budeme tu hovoriť o elektrónoch, ale nezabudnime, že zastupujú aj iné objekty, včítane fotónov svetla.

Pred zdrojom je umiestnená nepriestrelná clona s dvomi otvormi - povedzme rovnako veľkými, symetricky umiestnenými voči zdroju. Zdroj vypúšťa objekty veľmi veľkoryso, necieli špecificky na žiadnu štrbinu. V nejakej vzdialenosti od clony je tienidlo. Je celé pokryté detektormi. Každý detektor zaberá rovnakú malú plošku a všetky sú rovnako citlivé. Zaznamenávajú počet elektrónov, ktoré do nich dopadli a podielom tohto počtu k celkovému počtu dotávame **pravdepodobnosť** dopadu do danej oblasti tienidla. Je výhodné zaviesť aj pojem **hustoty pravdepodobnosti**. Táto vynásobená rozmerom príslušného detektora predstavuje pravdepodobnosť záchytu pre oblasť ním kontrolovanú. Vynásobená rozmerom nejakej oblasti (rozmeru dĺžky, plochy, objemu - podľa toho, kolkorozmerný problém uvažujeme) dáva pravdepodobnosť záchytu v danej oblasti.

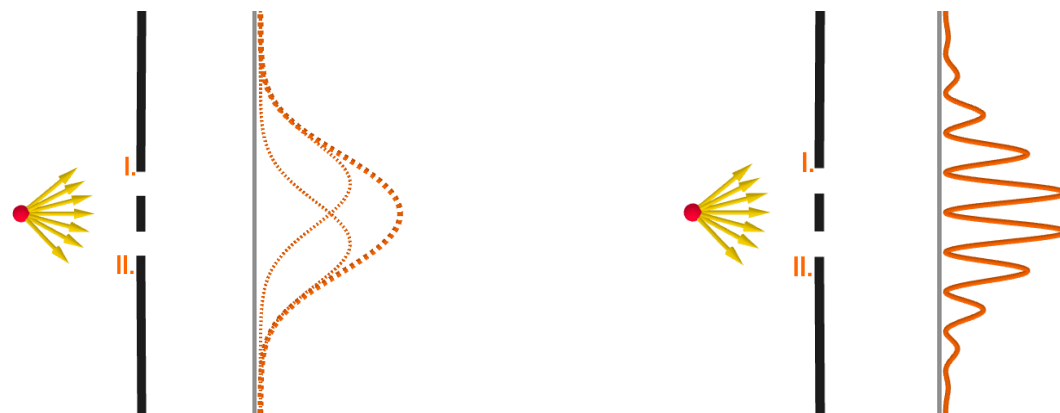
Začnime zaznamenávať elektróny naprv v situácii, keď štrbinu II. uzavrieme. Všetky, čo sa dostali na tienidlo, tak mohli prejsť len štrbinou I. Hneď si všimneme, že všetky záchyty sú rovnako intenzívne - elektrón do detektora buď príde celý, alebo nepríde vôbec. To vyzerá na veľmi *časticový charakter*. Pozrieme sa ešte na početnosť zachytených elektrónov v závislosti od polohy na tienidle, a pravdepodobnosť potom znázorníme pomocou krivky. Nijaké veľké prekvapenie - najviac elektrónov šlo do detektora práve oproti otvorenej štrbine, nejaké sa dostali trochu ďalej.

Zavrieme prvú štrbinu a otvoríme štrbinu II. Zopakujeme všetko ako bolo a dostávame veľmi podobný výsledok, akurát maximum výskytu elektrónov je teraz príslušne posunuté oproti stredu druhej štrbiny.



Obr. 2: Experimentálna zostava a priebeh pravdepodobnosti záchytu v závislosti od miesta pri otvorenej buď jednej alebo druhej štrbine.

Teraz otvoríme obe štrbiny. Naivná predstava nám hovorí, že teraz stúpne pravdepodobnosť záchytu všade, kam len elektróny mohli prísť pri otvorenej jednej alebo druhej štrbine. Pribudla predsa možnosť dostať sa tam cez štrbinu, ktorá bola predtým zatvorená. Ak elektrón príde do daného detektora buď po prechode cez jednu alebo druhú, potom celková pravdepodobnosť, že do detektora príde, by mala byť súčet tých dvoch čiastkových. Tak predsa funguje *skladanie pravdepodobností nezávislých udalostí*. Čakáme teda len súčet pravdepodobností. Napodiv však vidíme čosi výrazne iné.



Obr. 3: Naivne očakávaný a naozaj pozorovaný priebeh pravdepodobností pri oboch štrbinách otvorených. Prvý dostávame ako súčet štvorcov amplitúd. Druhý dostávame ako štvorec súčtu amplitúd.

Na niektorých miestach, na ktorých bola pri otvorenej jednej či druhej štrbine nenulová pravdepodobnosť záchytu je teraz nulová. Ako mohli elektróny, ktoré by predtým boli ochotne pristáli na

danom mieste po prechode trebárs štrbinou I., vôbec vedieť, že štrbina II. je otvorená? A prečo by to malo mať za následok neprísť do toho miesta cez žiadnu? Pravdepodobnosť záchytu dopadne takto podivne ešte aj keď púšťame mnoho elektrónov po jednom, takže nemôžeme argumentovať tým, že sa azda nejako vzájomne vyrážali z dráhy. Pre naše bežné pochopenie časticového charakteru je toto nezmysel. Ak elektrón prechádza jednou alebo (výlučne) druhou štrbinou, potom prechod jednou alebo druhou sú nezávislé možnosti. Ak sa nejaká udalosť (príchod do istého miesta na tienidle) môže udiat dvomi nezávislými cestami, a každá má svoju pravdepodobnosť, potom pravdepodobnosť, že sa udalosť vôbec stane, je súčet tých jednotlivých pravdepodobností. Osobitne, pravdepodobnosti sú nezáporné čísla, teda ich vzájomná anihilácia neprichádza do úvahy. Pritom existencia jednoznačnej polohy a hybnosti (počas celej histórie pohybu, teda aj v čase prechodu clonou) je jedným z kľúčových predpokladov klasickej mechaniky. Ale taký predpoklad vedie k nezhode s pozorovaním. Predpoklad zrejme *nie je* splnený a elektrón *nemá* v každom okamihu presne priraditeľnú polohu a hybnosť.

Ešte tu poznamenajme, že pri *vlnách* by nás interferenčný obrazec neprekvapil. Pri vlne  $\psi$  postupujúcej v čase  $t$  pozdĺž osi<sup>1</sup>  $y$ , s amplitúdou  $A$ , vlnovou dĺžkou  $\lambda$  a periódou  $T$ , teda

$$\psi(y, t) = A e^{i\left(\frac{2\pi y}{\lambda} - \frac{2\pi t}{T}\right)}$$

detektor zachytáva energiu, ktorá je úmerná *druhej mocnine amplitúdy vlny*. Klasická vlna samozrejme prechádza oboma štrbinami naraz, nie je lokalizovaná ako klasická častica. Po prechode oboma štrbinami máme akoby dva sekundárne zdroje vlnenia zo štrbín, a takto môže vlna *interferovať sama so sebou*. Sekundárne vlnenia zo štrbín sa skladajú - zosilňujú, zoslabujú, prípadne celkom anihilujú. Detektor zachytáva *štvorec takejto sumy vln*, a samozrejme pri deštruktívnej interferencii na mnohých miestach budú nuly tam, kde pri jednej zatvorenej štrbine bola nenulová amplitúda a teda aj jej štvorec. Už-už by sme elektrón prehlásili za vlnu, nebyť skutočnosti, že čokoľvek stvára po ceste, dopadne v celku, do jedného detektora, nie pozdĺž celého tienidla.

*To zas klasická vlna nerobí.*



Obr. 4: Sme zvyknutí, že vlny dopadá na mnohé miesta a mušľa, kým sa nerozbije, na jedno.



Obr. 5: Sme zvyknutí, že dve vlny sa na mnohých miestach anihilovať, a že mušle také tendencie nemajú.

<sup>1</sup>Trochu netradične je teraz vodorovná os  $y$ , aby sme si pre polohy na zvislom tienidle rezervovali tradičnejšie  $x$

Ešte môžeme urobiť jeden chabý pokus. Púšťame elektróny po jednom, a pri štrbinách umiestnime dve lampičky. Chceme sa pozrieť, kade elektrón ide. Predstava je taká, že pri prechode štrbinou I. sa odrazí od elektrónu svetlo z prvej lampičky, pri prechode štrbinou II. svetlo z druhej. Prípadne môžeme dať štrbinu (a teda aj lampičky) ďalej od seba, aby sa ich dosah prekryval čo najmenej, použiť v každej lampičke svetlo trochu inej farby atď. Rozlišovacia schopnosť je lepšia pre krátke vlnové dĺžky, takže ak ich zvolíme priveľké, jednak nemusíme rozoznať jednu štrbinu od druhej, a svetlo ešte aj môže elektrón obísť, v zmysle nerozptýliť sa na ňom. *Ak však svietime svetlom dosť malých vlnových dĺžok na to, aby sme nič neprehliadli, interferenčný vzor sa stratí a elektróny idú buď jednou alebo druhou štrbinou.*

Naše pozorovanie bolo *interakciou*, prisilnou na to, aby sme z neho mohli robiť závery o situácii bez nášho zásahu. Svetlo tiež nesie hybnosť, a to s kratšími vlnovými dĺžkami ju má väčšiu. Pri rozptyle na elektróne dosť veľkú na to, aby ho mohlo odkopnúť z hypotetickej dráhy, na ktorej sme ho tak nasilu chceli špehovať. Sviatili sme svetlom s dostatočnou hybnosťou na to, aby sme elektrón príliš ovplyvnili. *Ak skúsime svetlo dlhších a dlhších vlnových dĺžok, interferenčný vzorec sa objaví, práve keď bude vlnová dĺžka prídĺhá na spoľahlivú detekciu elektrónov.* Jednoducho v kvantovom divadle sa buď nedá pozerieť, alebo sa treba pridať k hercom a priznať sa k vlastnej role.



Obr. 6: Klasické divadlo rozlišuje javisko a hľadisko. V kvantovom je hranica otázná.

Experimentálne máme **neurčitost' polohy**  $\Delta x$  pri prechode clonou (približne vzdialenosť medzi štrbinami) a **neurčitost' hybnosti**  $\Delta p$ , ktorá je spôsobená interakciou so svetlom z lampy zviazané nasledovne:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1)$$

teda cez redukovanú **Planckovu konštantu**  $\hbar \approx 1.05 \times 10^{-34} J.s$ . Toto je momentálne jedna z fundamentálnych konštant, ktorej hodnota nie je predpovedaná žiadnou teóriou, je jednoducho zistená experimentálne a teórie ju používajú ako daný parameter.

## Od klasického ku kvantovému popisu

Klasický popis je v ruinách (ruiny sú však skvelý zdroj stavebného materiálu). **Stav** systému, základná matematická entita reprezentujúca systém, bývala zadaná ako **bod vo fázovom priestore**, priestore **polôh a hybností**. **Časový vývoj** stavu bol reprezentovaný **krivkou vo fázovom priestore**, teda spojitou postupnosťou jeho konkrétnych bodov, parametrizovanou časom. Fyzikálne **veličiny** boli **funkciami na fázovom priestore**, teda jednalo sa o funkcie polohy a hybnosti<sup>2</sup>. Teraz sme narazili na to, že bod vo fázovom priestore, teda určitá poloha a hybnosť v danom okamihu, je niečo čo **nevieme systému priradiť** - ba že už aj *samotný predpoklad, že to možno urobiť, vedie ku sporu* s experimentom (viď úvaha o skladaní pravdepodobností). Nuž a tým padá základný predpoklad na predpovede o systéme na základe klasických pohybových rovníc, ktoré sú v podstate receptom, kam ísť vo fázovom priestore v nasledujúcom kroku, za predpokladu, že vieme, kde sme v ňom teraz.

Vo fyzike sa však revolúcie nedejú zavrnutím všetkého starého. Treba pozbierať čo fungovalo. Elektróny dopadali štýlom *celý alebo nič*. Časticovosť teda nie je celkom prázdny pojem. Ani detekcia niekde a niekedy nie je celkom prázdny pojem. Netreba sa zatiaľ lúčiť s časopriestorom. *Skladanie bolo ako u klasických vln*. Vlnovosť teda nie je celkom prázdny pojem. Skladanie amplitúd (treba premyslieť čoho) zrejme bude hrať veľkú rolu. Tieto črty potrebujeme spojiť v **novom matematickom modeli**, ktorý by mohol reprezentovať systém s takýmito vlastnosťami. Všimnime si, že sme sa nezriekli pojmu *stav systému* (ťažko povedať čo by potom ostalo popisovať), akurát ho ideme reprezentovať niečím iným.

## Stav systému v kvantovej mechanike

**Hustota pravdepodobnosti** sa v experimente pri oboch štrbinách otvorených správala ako energia klasickej vlny. Tá je úmerná **štvorcu amplitúdy**. Je teda namieste predpokladať, že tak ako odmocnina z energie vlny je entita sama osebe, možno aj **odmocnina z hustoty pravdepodobnosti** je entita sama osebe. Nazvime ju **amplitúda pravdepodobnosti**. Hustota pravdepodobnosti bola očividne funkciou miesta na tienidle, a keby sme elektróny počítali priebežne (a osobitne keby sme elektróny pušťali v nejakom špeciálnom časovom vzore), iste by sa prejavil aj na aktuálnom počte zachytených elektrónov v rozličných časoch. Ak hustota pravdepodobnosti je funkciou priestoru a času, potom je namieste to čakať aj pre amplitúdu pravdepodobnosti. Dajme tejto veličine nejaké označenie. V literatúre je veľmi rozšírené  $\Psi(x, y, z, t)$ . Amplitúde pravdepodobnosti sa často hovorí **vlnová funkcia**<sup>3</sup>. Predstavuje **stav systému** v kvantovej mechanike<sup>4</sup>. Fyzikálny význam je nasledovný:

$$\int_V |\Psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz = \text{pravdepodobnosť záchytu v objeme } V \text{ v čase } t \quad (2)$$

Amplitúda pravdepodobnosti môže byť **komplexná**. Nemeráme priamo ju, ale až jej veľkosť. Môžeme ju písať ako súčin veľkosti  $\Psi$  a fázového faktora  $e^{i\phi}$ , ako je často zvykom v komplexnej matematike

$$\Psi = |\Psi| e^{i\phi}$$

<sup>2</sup>kinetická, potenciálna energia, moment hybnosti,... ale ešte aj elektrický prúd preda súvisí s tým, kde sú elektróny s akou hybnosťou, tlak sa dá chápať ako funkcia hybností mnohých narážajúcich molekúl atď

<sup>3</sup>názov, ktorý azda niektorých matematikov vedie ku škripaniu zubami, ale museli už prehltnúť horšie, viď "delta funkcia".

<sup>4</sup>Všimnime si, že sme ju zaviedli ako funkciu času a súradníc  $x, y, z$ , teda sme akoby uprednostnili konfiguračnú časť fázového priestoru pri dedení z klasickej fyziky. Jedná sa o tzv. x-reprezentáciu,  $\Psi_{\vec{r}}$ . Nie je jedinou voľbou. Môžeme si zvoliť hybnostnú, p-reprezentáciu  $\tilde{\Psi}_{\vec{p}}$ , a uvažovať stavy ako funkcie  $\tilde{\Psi}(p_x, p_y, p_z, t)$  Jedná sa o inú reprezentáciu toho istého, a  $\tilde{\Psi}_{\vec{p}}, \Psi_{\vec{r}}$  tvoria fourierovskú dvojicu, jedna je fourierovským obrazom druhej.

Pod štvorcem sa tu myslí "komplexný kvadrát", teda súčin  $\Psi$  a združenej<sup>5</sup>  $\Psi^\dagger$

$$|\Psi|^2 = \Psi \Psi^*$$

Už v klasickej mechnike a elektromagnetizme sa pri popise skladajúcich sa vektorových veličín či vln osvedčili komplexné čísla ako skvelá výpočtová skratka. V kvantovej mechanike je ich význam zdá sa fundamentálnejší<sup>6</sup>, potrebujeme buď komplexné čísla alebo nejakú im analogickú štruktúru, aby sme dostávali súhlas predpovedí teórie a experimentov.

Je tu aj istá zvláštnosť - stavu nezodpovedá jedna hodnota  $\Psi(x, t)$ , lebo ak zmeníme fázu, ktorej komplexný kvadrát je rovný 1, nezmení sa hodnota  $|\Psi|^2$ . Akurát treba dať pozor, ak skladáme viacero amplitúd, aby sme (ak už fázy posúvame) posunuli všetky konzistentne (lebo fáza síce nehrá rolu pri konečnom umocňovaní konečnej amplitúdy, ale pri priebežnom skladaní je kľúčová.)

Ak  $|\Psi|^2$  predstavuje hustotu pravdepodobnosti, potom musí spĺňať istú **normalizačnú podmienku**. Elektrón nemusí mať určitú polohu, ale ak raz existuje ako náš systém, celková pravdepodobnosť niekde ho nájsť v oblasti jemu dostupnej musí byť rovná jednej. V tomto je kvantová mechanika nemenej určitá ako klasická. Je zaujímavé, že práve táto *určitosť kvantovej mechaniky* je častokrát (z výpočtového hľadiska) dôvodom kvantovania hodnôt merateľných veličín. Dôsledok určitosti je tak asociovaný s teóriou, ktorá je asociovaná s neurčitosťou.

$$\int_{V_{\text{total}}} |\Psi|^2 dV = 1 \quad (3)$$

Zdôraznili sme tu integráciu cez celú dostupnú oblasť  $V_{\text{total}}$ , obvykle sa bude myslieť implicitne. Nie vždy sa jedná o trojrozmerný integrál, ale čítaním kontextu možno predísť zmätkom.

Upozorníme tu ešte ja širšiu interpretáciu: To, čo vidíme v (3) je istý druh **skalárneho súčinu**. Normovateľné vlnové funkcie (lepšie povedané **lúče** vlnových funkcií, kde pod lúčom sa mieni celá trieda  $\Psi e^{i\alpha}$ , danej funkcie a jej fázových posunutí) tvoria lineárny vektorový priestor vybavený skalárnym súčinom (**Hilbertov priestor**), ktorý nám umožňuje počítať nielen **velkosti**, ale aj **prekryvy**.

Skalárny súčin  $\langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle$  dvoch rôznych stavov  $\Psi_1, \Psi_2$  je

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int_V \Psi_1 \Psi_2^\dagger dV \quad (4)$$

Ak je taký súčin nulový, prekryv stavov je nulový a hovoríme, že sú dané stavy kolmé. Hilbertov priestor je štandardne nekonečnorozmerný, preto netreba násilu vizualizovať, ale **analógia s vektormi z lineárnej algebry** nie je na škodu (pokiaľ sa neľahá aj kam nesiahá.)

Zhráme túto časť prechodu od klasického ku kvantovému popisu:

**Stav systému klasicky: bod vo fázovom priestore**  $(\vec{r}, \vec{p})$

**Stav systému kvantovo: vlnová funkcia**  $\Psi(\vec{r}, t)$

## Fyzikálne veličiny v kvantovej mechanike

Keď už bod vo fázovom priestore nereprezentuje stav systému, potom treba premyslieť aj reprezentáciu **fyzikálnych veličín**. Už to nemôžu byť funkcie na fázovom priestore. Ale mali by to byť

<sup>5</sup>Všeobecnejšie hermitovsky združenej (transponuj a komplexne združ), preto značka  $\dagger$  namiesto  $*$ . Pri jednoduchých modeloch nie je čo transponovať a hviezdička označujúca komplexné združenie by stačila. Pri reálnej  $\Psi$  je aj hviezdička navyše - ale neškodí.

<sup>6</sup>Minimálne niektoré časti matematického formalizmu sa síce dajú prispôsobiť aj iným asociatívnym podielovým algebrám nad reálnymi číslami (sem patria reálne, komplexné a kvaterniónové čísla), ale je potom potrebné k nim dodať istú matematickú štruktúru. S komplexnými číslami sa počíta najľahšie, aj keď je to možno silou tradície a s tým spojených nájdených nástrojov.

matematické entity operujúce na stavoch. Nejaké **operátory**  $\hat{O}$  na vlnových funkciách  $\Psi$ . Naše stavy sú komplexné, operátory zodpovedajúce veličinám tiež nebudú mať komplexnosť zakázanú, s jednou výnimkou: **merateľné veci musia byť reprezentované reálnymi vecami**. Imaginárnu energiu, moment hybnosti či polohu by bolo ťažko interpretovať. Merateľnou vecou je **hodnota fyzikálnej veličiny**, napríklad energia je toľko a toľko joulov. Je to reálny údaj. Povedzme, že veličiny sú reprezentované operátormi na vlnových funkciách. Ako z operátora dostať číslo, osobitne číslo v súvislosti so stavom, na ktorom operuje? Tu sa veľmi ponúka myšlienka **vlastných stavov a vlastných čísel**. A hneď je naporúdzi aj skupina **hermitovských** operátorov, ktoré, pri všetkej svojej komplexnosti, majú výlučne reálne vlastné čísla. Podobne ako vlnové funkcie sú analógmi vektorov z lineárnej algebry, sú operátory analógmi matíc (matice tiež mali svoje rodiny vlastných vektorov a čísel), a hermitovské operátory sú **analógmi symetrických matíc s reálnymi vlastnými číslami**. Sú tiež symetrické v nasledovnom zmysle:

$$\begin{aligned}\langle \hat{O}\Psi_1 | \Psi_2 \rangle &= \langle \Psi_1 | \hat{O}\Psi_2 \rangle \\ \int_V (\hat{O}\Psi_1) \Psi_2^\dagger dV &= \int_V \Psi_1 (\hat{O}\Psi_2)^\dagger dV\end{aligned}\tag{5}$$

Skrátene <sup>7</sup>

$$\hat{O}^\dagger = \hat{O}\tag{6}$$

Hermitovské operátory majú aj tú krásnu vlastnosť, že ich vlastné stavy<sup>8</sup>  $\Phi_n$ , ktorým priradzujú reálne vlastné hodnoty  $\lambda_n$

$$\hat{O}\Phi_n = \lambda_n\Phi_n\tag{7}$$

tvoria často **úplný systém** v Hilbertovom priestore, ktorý je pre daný problém relevantný. Môžeme ich pre násobením vhodným faktorom normovať, prípadne pre degenerované spektrum vlastných hodnôt (viac stavov prislúcha tej istej) nájsť ortogonálne kombinácie príslušných vlastných stavov a použiť celý systém ako **ortonormálnu bázu**

$$\langle \Phi_n | \Phi_m \rangle = \int_V \Phi_n \Phi_m^\dagger = \delta_{nm}\tag{8}$$

Všetky ostatné stavy možno vyjadriť ako ich **komplexnú lineárnu kombináciu**<sup>9</sup>

$$\Psi = \sum_n c_n \Phi_n\tag{9}$$

**Velkosti koeficientov**  $|c_n|$  **predstavujú mieru zastúpenia daného bazového stavu**  $\Phi_n$  v stave  $\Psi$ , prekryv daný skalárnym súčinom

$$\langle \Psi | \Phi_n \rangle = \sum_m c_m \langle \Phi_m | \Phi_n \rangle = \sum_m c_m \delta_{mn} = c_n\tag{10}$$

Pre normovaný stav  $|\Psi_i| = 1$  platí, že súčet kvadrátov koeficientov sa sčítava na 1:

$$1 = \langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_m \sum_n c_m c_n^\dagger \langle \Phi_m | \Phi_n \rangle = \sum_m \sum_n c_m c_n^\dagger \delta_{mn} = \sum_m |c_m|^2\tag{11}$$

<sup>7</sup>Z matematického hľadiska sme tu na zaplkanie neporiadni, k definícii patrí ešte požiadavka na hustú definíciu a správny prekryv definičných oborov  $\hat{O}^\dagger, \hat{O}$ .

<sup>8</sup>Teraz budeme číslovať vlastné stavy indexom  $n$  evokujúcim diskretnosť, ale zatiaľ ju nasilu nepredpokladajme.

<sup>9</sup>V prípade spojitého spektra treba integrovať namiesto sumovania

Teraz si to dajme dokopy s interpretáciou hermitovského operátora ako fyzikálnej veličiny. Vlastné stavy takého operátora zrejme predštatujú stavy systému, ktorým daný operátor jednoznačne priradí reálne číslo. Hovoríme im **čisté stavy**. Má teda zmysel uvažovať o tejto hodnote ako o hodnote danej veličiny v danom stave. Ak tento operátor pustíme na nie vlastný stav, ale stav daný ako lineárne kombinácia vlastných stavov (**zmiešaný stav**), hermitovský operátor dodá čísi takého<sup>10</sup>:

$$\hat{O}\Psi = \hat{O} \sum_n c_n \Phi_n = \sum_n c_n \hat{O}\Phi_n = \sum_n c_n \lambda_n \psi_n \quad (12)$$

Teda nedostali sme tu jedno vlastné reálne číslo zo spektra, ale ich komplexnú kombináciu. Žiaden merací prístroj nám neukáže imaginárny násobok nejakého počtu joulov, metrov a pod. Ale spomeňme si, že koeficient  $c_n$  vyjadruje prekryv stavu  $\Psi$  s vlastným stavom  $\Phi_n$ . Tiež že suma štvorcov koeficientov dáva jednotku ako pravdepodobnosť. Že ak by niektorý z koeficientov sám mal veľkosť 1, potom by ostatné boli nevyhnutne nulové a operátor by jednoznačne priradil príslušné vlastné číslo ako hodnotu veličiny, ktorú operátor predstavuje. Toto všetko nám napovedá nasledovné:

Pri meraní nejakej veličiny  $\mathcal{O}$  môžeme nájsť **len hodnoty zo spektra vlastných čísel** operátora  $\hat{O}$ , ktorý danú veličinu reprezentuje. Ak meriame veličinu  $\mathcal{O}$  na vlastnom stave jej príslušajúceho operátora, napríklad  $\Phi_n$ , potom môžeme namerať len hodnotu k nemu príslušnej vlastnej hodnoty  $\lambda_n$ . Ak prevádzame meranie na všeobecnom stave  $\Psi$ , zmiešanom z vlastných, potom stále môžeme namerať len jednu z vlastných hodnôt operátora. Pravdepodobnosť, že nameriame práve konkrétnu  $n$ -tú hodnotu je daná kvadrátom veľkosti koeficientu, s ktorým  $n$ -ta vlastná funkcia vystupovala v rozvoji  $\Psi$ .

$$\Psi = \sum_n c_n \Phi_n \rightarrow \text{pravdepodobnosť namerať hodnotu } \lambda_m \text{ je } |c_m|^2 \quad (13)$$

Zmieňme sa tu ešte o možnosti spojitého spektra. V takom prípade treba integrovať namiesto sumovania. Nespočítateľná báza má svoje matematické háčiky, ktorým sa tu nejdeme venovať.

Zhrňme túto časť prechodu od klasického ku kvantovému popisu:

**Fyzikálna veličina klasicky: funkcia  $f$  na stavoch (bodoch fázového priestoru)  $(\vec{r}, \vec{p})$**   
**Fyzikálna veličina kvantovo: operátor  $\hat{O}$  na stavoch (vlnových funkciách)  $\Psi(\vec{r}, t)$**

## Existujú nezmyselné otázky

Toto je zaujímavá situácia. Jednak pokiaľ má operátor diskrétne spektrum, potom môžeme namerať len diskrétne hodnoty veličiny, ktorú reprezentuje. A aby nebolo prekvapení málo: Nie každému stavu prislúcha jednoznačná hodnota danej veličiny! Neznamená to, že sa nedá merať - ale že ak máme niekoľko identicky pripravených stavov, meranie na nich môže dopadnúť rôzne. Deterministická predikčnosť klasickej mechaniky (kde znalosť stavu implikovala aj znalosť všetkých relevantných hodnôt fyzikálnych veličín v tom stave) tu končí. Fyzika sa doteraz spoliehala na pravidlo rovnaké začiatky vedú k rovnakým koncom (ak sa prevádzajú so systémom rovnaké veci), tu to neplatí. Upozorníme však na jednu vec. Nameranie danej veličiny v nejakom stave predstavuje nevratný zásah do systému. Hovoríme tomu kolaps vlnovej funkcie. Ak meranie dopadlo hodnotou  $\lambda_n$ , potom systém už je v čistom stave  $\Phi_n$ . Ďalšie meranie tej istej veličiny už dopadne rovnako. Nenameriame teda na tom istom zmiešanom stave viac hodnôt (lebo meraním ho zmeníme, a ďalšie meranie už nerobíme na tom, čo bolo). Dostaneme však vo všeobecnosti viac hodnôt na mnohých kópiách toho istého stavu. Pred meraním stav nemá konkrétnu hodnotu danej veličiny. V istom zmysle ju má, len ak je čistým stavom operátora, ktorý danú veličinu reprezentuje.

<sup>10</sup>Zase sme pohnali matematickú korektnosť kamsi ďaleko. Nekomentujeme tu podrobne predpoklady za ktorých možno vymeniť azda nekonečnú sumu a operátor, ani nekomentujeme problémy keď je báza nespočítateľná.



Tu sa dostávame k ďalšej zaujímavosti. Ešte sme si žiaden operátor neuviedli, ale z lineárnej algebry vieme, že vlastné vektory jednej matice nemusia byť vlastnými vektormi inej. Aby tomu tak bolo, musia matice komutovať. Podobne vlastné funkcie jedného operátora nemusia byť vlastnými funkciami iného. Aby tomu tak bolo, musia tie operátory komutovať. To ale znamená, že stav, v ktorom máme istú trebárs hybnosť, bude mať neurčitú polohu, ak operátory polohy a hybnosti nekomutujú. Ak by sa nám polohu podarilo hypoteticky presne zmerať, dostali by sme ho do čistého stavu polohy, ale to už by bol iný ako pôvodný stav, teda informácia o hodnote hybnosti by sa nieže "skryla", ale otázka na ňu by v tomto novom stave už ani nemala zmysel. Nemalo by význam spýtať sa aká je pred meraním hybnosti. A po ňom by zas šlo o iný stav...



Obr. 7: Ak by sme sa pri pohľade na pieskovec ešte nedotknutý dlátom sochára pýtali, či je jeho dielo podarené, aj záporná aj kladná odpoveď by bola typu "ani len zle", kým neexistuje socha, ktorej krásu by bolo možné posúdiť. Analógia je slabá, ale to sa pri klasickom komentári kvantových javov dá očakávať.

Skutočnosť, že niektoré otázky nemajú význam, možno nie je taká nezvyčajná alebo ťažko prijateľná. Otázka, či sa má pozorovateľná veličina spájať so *systémom ako takým* alebo s *meraním na tomto systéme*, mohla byť nastolená už na úrovni klasickej mechaniky. Aj tam by človek po chvíli poctivého uvažovania uznal, že hovoriť o určitej hodnote pozorovateľnej veličiny bez vzťahu k pozorovaniu je dosť nevedecký koncept. Preto je zmysluplnosť otázok typu *Aká je hodnota pozorovateľnej veličiny X, ak ju nepozorujeme?* dosť pochybná už v klasickej fyzike. Akurát že tam nám nuansy unikajú vďaka tomu, že klasická fyzika nepoužíva v tomto smere taký jemný hrebeň ako kvantová teória. Tá môže byť neintuitívna v mnohých ohľadoch, ale v niektorých je pri troche veľmi obyčajného uvažovania logickejšia.

### Konkrétna reprezentácia: hybnosť, poloha, energia

Doteraz sme hovorili veľmi všeobecne. Fyzikálnym veličinám majú prislúchať nejaké hermitovské operátory pôsobiace na vlnových funkciách. Ale hermitovských operátorov je veľa. Ako z nich vyberať? Tu nám opäť prichádza na pomoc zásada revolúcií vo fyzike nevyhadzovať čo bolo dobré na staršej teórii. Nedá sa poprieť, že energia, poloha, hybnosť, moment hybnosti atď z klasickej fyziky fungujú v istom priblížení veľmi efektívne. Pokúsime sa preto zachovať spojitosť s klasicou fyzikou všade, kde táto funguje, bez zanedbania toho, čo nás naučil trebárs dvojštrbinový experiment, kde táto teória zlyhala. Spomínaný experiment nám napríklad hovorí, že hybnosť a poloha sú spojené nejakou vzájomnou neurčitou. Čím viac okrešeme interval hybnosti, tým viac nám narastie interval polohy. To napovedá, že operátory polohy a hybnosti nebudú komutovať pri pôsobení na vlnové funkcie. Šlo by to napríklad takýmto priradením (v jednorozmernom prípade):

$$\text{Poloha} \leftrightarrow \hat{x} : \Psi \rightarrow \hat{x}\Psi := x\Psi(x, t) \quad (14)$$

$$(15)$$

$$\text{Hybnosť} \leftrightarrow \hat{p} : \Psi \rightarrow \hat{p}\Psi := -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)$$

Prečo takto? Argumentov je dost, ale treba rozumieť, že keď sa vytvára nová teória, nedá sa odvodiť zo starej (nebola by *nová*), nanajvýš sa ňou dá inšpirovať. Vhodnosť inšpirácie je potom rozhodnutá experimentálne. Fyzika sa nerobí v zrkadlovej miestnosti, treba sa pozeráť von oknom a konfrontovať s realitou.

Jednou z motivácií definovať operátor polohy ako obyčajné násobenie súradnicou je jednoduchosť. Takto definovaný operátor má svoje asociácie s argumentom vlnovej funkcie  $\Psi(x, t)$ , ktorý je interpretovaný ako súradnica konfiguračného priestoru. Prečo potom aj operátor hybnosti nedefinovať ako násobenie hybnosťou? Tu by sme narazili na požiadavku pre tieto operátory, aby nekomutovali. Teda hľadáme nejaký operátor, ktorý nekomutuje s  $x$ , pričom hodnota komutátora operátorov by mala byť úmerná Planckovej konštante, tak napovedá dvoštrbinový experiment<sup>11</sup>. Naša voľba tu dáva naozaj konštantu, dokonca úmernú Planckovej<sup>12</sup>:

$$[\hat{x}, \hat{p}]\Psi = \hat{x}(\hat{p}\Psi) - \hat{p}(\hat{x}\Psi) = x \left( -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) - (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} (x\Psi) = i\hbar\Psi \quad (16)$$

Operátory hybnosti a polohy sú dôležité, nakoniec v klasickej mechanike im asociované veličiny  $x$ ,  $p$  tvorili súradnice fázového priestoru klasických stavov. Ostatné veličiny boli funkciami týchto, a stojí za to sa po tejto analógii pustiť aj v kvantovom prípade. Napríklad kinetická energia častice s hmotnosťou  $m$  bola v klasickom prípade daná ako  $E_k = \frac{p^2}{2m}$ . Potenciálna bola funkciou polohy  $U(x)$ . Potom v kvantovej verzii môžeme vyskúšať možnosť

$$\text{Kinetická energia} \leftrightarrow \hat{E}_k : \Psi \rightarrow \hat{E}_k\Psi = \frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi$$

$$\text{Potenciálna energia} \leftrightarrow \hat{U} : \Psi \rightarrow \hat{U}\Psi = U(\hat{x})\Psi = U(x)\Psi$$

Operátor celkovej energie má svoje špeciálne meno, **hamiltonián**, a veľmi osobitné postavenie

$$\text{Celková energia} \leftrightarrow \hat{H} : \Psi \rightarrow \hat{H}\Psi = \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}) \right) \Psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \Psi \quad (17)$$

Upozorníme tu, že vo viacerých rozmeroch by bol hamiltonián daný ako

$$\hat{H}\Psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x) \right) \Psi \quad (18)$$

<sup>11</sup>Ďalší argument je z teórie symetrie a zákonov zachovania, ktorá nám hovorí, že translačná invariantnosť v nejakom smere súvisí so zachovaním hybnosti v tom smere, a že operátor hybnosti je generátorom translácií. Generátor translácií v nejakkej premennej je úmerný derivácii podľa tej premennej. V súvislosti s týmto je odporúčané konzultovať texty o tom pojednávajúce.

<sup>12</sup>Imaginárna jednotka nás nemusí znepokojovať. Operátory nemusia byť reálne, dôležité je, aby tie, ktoré zodpovedajú nejakkej merateľnej veličine, mali reálne vlastné hodnoty. Imaginárne jednotky v definícii operátorov môžu práve zachrániť splnenie tejto požiadavky.

Laplacián je geometricky veľmi kľúčový operátor. Niekedy sa hovorí o relativite ako krásnej geometrickej teórii a o kvantovej mechanike ako o niečom nevelmi ladiacom. Nejaké problémy tam sú, ale kvantová mechanika má očividne s geometriou mnoho dočinenia.

Samozrejme, je namieste otázka či takáto konštrukcia operátorov bude fungovať vždy. Naozaj stačí len vziať klasické vyjadrenie fyzikálnej veličiny ako funkcie polohy a hybnosti, a v ňom zameniť klasickú polohu a hybnosť za naše operátory (15), (16)? Apriori nemáme právo predpokladať, že takýto jednoduchý recept bude fungovať, ale oplatí sa ho vyskúšať v rámci Occamovej britvy, a upraviť, ak sa potom predpovede nezhodnú s experimentom. Napodiv (alebo očakávane?) jednoduchý recept veľmi často funguje. Nie celkom vždy, a je to do istej miery očakávateľné aj preto, že kým  $x, p$  klasicky komutujú, ich kvantové verzie  $\hat{x}, \hat{p}$  nie. Ak nejaká klasická veličina obsahuje člen úmerný súčinu  $xp$ , je to zároveň člen úmerný súčinu  $px$ . Ale v kvantovom prípade  $\hat{x}\hat{p} \neq \hat{p}\hat{x}$ . Niekedy sa vec dá ošetriť veľmi jednoducho: prepíšeme klasický výraz tak, aby bol explicitne symetrický na permutáciu, a kvantový urobíme podľa toho vzoru

$$px = \frac{px + xp}{2} \longleftrightarrow \frac{\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p}}{2}$$

## Časový vývoj

Už máme kvantovú verziu reprezentácie stavu systému ako vlnovej funkcie (amplitúdy pravdepodobnosti), a reprezentáciu niekoľkých veličín ako operátorov na vlnových funkciách. Ako budeme reprezentovať **časový vývoj**?

V tomto prípade sa veľmi oplatí poznať hamiltonovský formalizmus v klasickej mechanike. Zdôraznime, že sa nejedná o inú teóriu, ale o iný, stále klasický, formalizmus. Veľmi stručne ho tu predstavme aspoň nakoľko bude potrebné pre ďalšie účely. Pozrime sa, čo vlastne klasická mechanika robí. Zo znalosti stavu systému teraz nám pohybové rovnice poskytujú predpoveď pre stav neskôr (alebo aj spätne). Časový vývoj systému predstavuje postupnosť (parametrizovanú časom) jednotlivých stavov. **Pohybové zákony** nám umožňujú zrekonštruovať túto postupnosť zo znalosti jedného jej člena. Ako sme už spomínali, stav systému v klasickom prípade je pre veľmi jednoduchý systém (ako hmotný bod hmotnosti  $m$  v jednom rozmere) daný jeho polohou  $x$  a hybnosťou  $p = m\dot{x}$  (tradične bodka značí časovú deriváciu).

Newtonov druhý zákon pre toto teleso

$$m\ddot{x} = F \tag{19}$$

je diferenciálna rovnica druhého rádu.  $F$  je externá sila pôsobiaca na teleso, nezávislou premennou je čas  $t$  (parameter vývoja), závislou je súradnica polohy telesa  $x(t)$ . Takáto rovnica druhého rádu vyžaduje dve počiatočné podmienky - hodnotu neznámej funkcie a jej prvej derivácie v nejakom konkrétnom (obvykle počiatočnom) čase. Inými slovami stav v nejakom čase.

Prepíšme rovnicu (19) do tvaru, v ktorom vystupujú kľúčové pojmy (**stav, energia, vývoj**) tak explicitne ako sa dá. Hybnosť súvisí s časovou deriváciou polohy, zmena hybnosti súvisí so silou

$$\dot{p} = F \tag{20}$$

$$\dot{x} = \frac{p}{m}$$

Vidíme tu neoficiálny zákon zachovania formálnej zložitosti - máme dve rovnice prvého rádu (20) namiesto jednej rovnice druhého rádu (19).

Ak je sila konzervatívna, môžeme ju vyjadriť ako záporne vzatý gradient potenciálnej energie  $U$ . Ale keďže kinetická energia závisí od hybnosti, nie od polohy, môže byť beztriestne vsunutá do

”pozičného gradientu”:

$$F = -\partial_x U = -\partial_x(U + E_k) = -\partial_x E$$

Týmto prepisom sily ako záporným gradientom energie máme polovicu (20) vyjadrenú s energiou na pravej strane. Aby sme podobnú vec dosiahli aj pre druhú polovicu, všimnime si, že pravá strana môže byť prepísaná ako derivácia kinetickej energie ( $E_k = p^2/2m$ ) podľa hybnosti. Tentoraz využijeme skutočnosť, že potenciál nezávisí na hybnosti v prípadoch ktoré tu uvažujeme, a teda môžeme do derivácie bezpečne popri kinetickej energii prepašovať aj potenciálnu:

$$\frac{p}{m} = \partial_p E_k = \partial_p(E_k + E_p) = \partial_p E$$

. A ešte všetko dokopy:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} p \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\partial_x E \\ \partial_p E \end{pmatrix} \quad (21)$$

Teda **časová zmena stavu** súvisí s energiou<sup>13</sup>, resp. so vzťahom energie a stavových veličín  $(x, p)$ .

Ako teraz nájsť kvantovomechanickú verziu zákonov pre časový vývoj? Ako už bolo spomenuté, keby sa dali odvodiť z klasického prípadu, bola by kvantová mechanika len špeciálnym prípadom klasickej. Je čas múdro hádať kým nepríde zhoda s experimentami.

Skúsme sa však inšpirovať klasickým prípadom (21): Časový vývoj stavu bude zrejme čosi úmerné časovej derivácii vlnovej funkcie,  $\partial_t \Psi$ . Vzťah energie a stavu môže byť čosi úmerné  $\hat{H}\Psi$ . Analógia klasickej verzie teda môže byť  $\hat{H}\Psi = k\partial_t \Psi$ . Konštanta úmernosti by mala byť volená tak, aby bola zhoda predpovedí s experimentom, aby bol operátor časového vývoja hermitovský v zmysle (6), čo súvisí s komplexnou jednotkou, a vhodne uhádnuť zvyšok pomáha aj pohľad na Planckovu konštantu v definícii hamiltoniánu a požiadavka rozmerovej konzistentnosti.

$$i\hbar \partial_t \Psi(x, t) = \hat{H}\Psi(x, t) \quad (22)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \Psi(x, t)$$

Pre viacrozmerný prípad je rozšírenie triviálne (na napísanie, nie nevyhnutne doriešenie)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}, t) \quad (23)$$

To je známa **Schrödingerova rovnica** pre časový vývoj stavu (amplitúdy pravdepodobnosti) v  $x$ -reprezentácii. Je to parciálna diferenciálna rovnica, prvého rádu v časovej derivácii a minimálne druhého v priestorovej, keďže kinetická časť hamiltoniánu zahŕňa laplacián. Treba ešte v závislosti od konkrétneho prípadu doplniť **počiatočnú podmienku** a **okrajové podmienky**. Náročnosť nájdenia riešenia závisí do veľkej miery od konkrétneho tvaru potenciálu  $U(\vec{r})$ . Ukážeme si neskôr jednoduchý príklad kde je riešenie ľahké a zároveň na ňom vidno aj trochu toho slávneho kvantovania.

Najprv však komentár k časovej závislosti. Uvažujme, ako súvisí vlnová funkcia v nejakom čase  $t$  s jej podobou v čase o  $\epsilon$  neskôr:

$$\Psi(x, t + \epsilon) \approx \Psi(x, t) + \epsilon \partial_t \Psi(x, t) = (1 - i\hbar \epsilon \hat{H}) \Psi(x, t)$$

<sup>13</sup>V klasickej mechanike v lagrangeovskom a hamiltonovskom formalizme energia súvisí s generátorom posunutí v čase, a tie sa reprezentujú deriváciami podľa času. Zákon zachovania energie súvisí práve so symetriou systémov voči posunutiam v čase.

Hamiltoniánu sa preto hovorí **generátor časového vývoja**, keďže je úmerný časovej derivácii, a táto diktuje prvý krok v Taylorovom rozvoji. Operátor takto súvisiaci s **časovým vývojom**, s predmetom, ktorý fyzika skúmala azda vo všetkých svojich etapách, bude mať **klúčový význam**, a s ním samozrejme aj veci čo s ním súvisia, napríklad **vlastné čísla a vlastné funkcie**. Tieto tvoria úplný systém a často sa volia ako báza. Okrem ich význačného postavenia aj pre svoju jednoduchosť. Vlastné čísla hamiltoniánu teraz budeme volať sugestívne  $E$  namiesto  $\lambda$ . Ak je spektrum diskkrétne, bude aj rodina vlastných fukcií diskrétna, vtedy sa často označujú aj spodným indexom.

Pre **vlastné stavy hamiltoniánu**  $\Phi(\vec{r}, t)$  platí

$$i\hbar \partial_t \Phi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Phi(\vec{r}, t) = E \Phi(\vec{r}, t) \quad (24)$$

To sú vlastne dve rovnice

$$i\hbar \partial_t \Phi(\vec{r}, t) = E \Phi(\vec{r}, t)$$

$$\hat{H} \Phi(\vec{r}, t) = E \Phi(\vec{r}, t)$$

**Časová závislosť jednotlivých vlastných stavov hamiltoniánu** (samozrejme zmiešané stavy na tom môžu byť inak, keďže kombinácia jednoduchých vecí môže nabráť zložitejší charakter) je veľmi jednoduchá - exponenciálna funkcia  $\exp(-iEt/\hbar)$ . Vlastný stav hamiltoniánu  $\Phi(\vec{r}, t)$  sa teda dá napísať ako súčin časovej exponenty a funkcie priestoru  $\phi(\vec{r})$ , ktorá je riešením **bezčasovej Schrödingerovej rovnice**

$$\hat{H} \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r}) \quad (25)$$

$$\Phi(\vec{r}, t) = B e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \phi(\vec{r}) \quad (26)$$

$B$  je konštanta, vo všeobecnosti komplexná. Jej veľkosť súvisí s normovaním. Voľnosť prípadnej fázy  $e^{i\alpha}$  súvisí s tým, že stav je daný ako lúč, množina vlnových funkcií líšiacich sa len fázou. Niekedy sa vynecháva prívlastok "bezčasová", treba si však uvedomiť že sa jedná len o skratkovité vyjadrovanie. Podobne ako v klasickej mechanike, aj v kvantovej riešime časový vývoj stavu, a podobne ako tam, je tento vývoj fundamentálne spätý s energiou. Bezčasová Schrödingerova rovnica je medzikrok vo výpočte, a kým časová platí pre všetky stavy ktoré môžu nastať (akurát pri zmiešaných nemožno apriori očakávať takú jednoduchú časovú závislosť ako pri čistých), bezčasová platí len pre čisté, vlastné stavy hamiltoniánu. Bezčasová rovnica má však s časovou závislosťou čistých stavov veľmi mnoho. Totiž *riešením bezčasovej Schrödingerovej rovnice dostávame konkrétne povolené hodnoty energie, ktoré potom dosádzame do exponenty popisujúcej časovú závislosť čistého stavu.*

**Všeobecný, zmiešaný stav**  $\Psi(\vec{r}, t)$  sa potom dá napísať ako **lineárna kombinácia viacerých vlastných stavov hamiltoniánu**  $\Phi(\vec{r}, t)$ . Ak je spektrum diskkrétne, je diskrétna aj rodina vlastných funkcií a treba sumovať.

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \Phi_n(\vec{r}, t) = \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \phi_n(\vec{r}) \quad (27)$$

V prípadoch, keď je spektrum hamiltoniánu spojité, treba namiesto sumy vziať integrál.

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int_E dE \mathcal{C}(E) \Phi_E(\vec{r}, t) = \int_E dE \mathcal{C}(E) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \phi_E(\vec{r}) \quad (28)$$

V takomto prípade hrajú spojito rozložené hodnoty váhy  $C(E)$  úlohu analogickú ako koeficienty  $c_n$  z diskkrétnej verzie.

Zhrňme túto časť prechodu od klasického ku kvantovému popisu:

**Časový vývoj systému klasicky:**

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} p \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\partial_x E \\ \partial_p E \end{pmatrix}$$

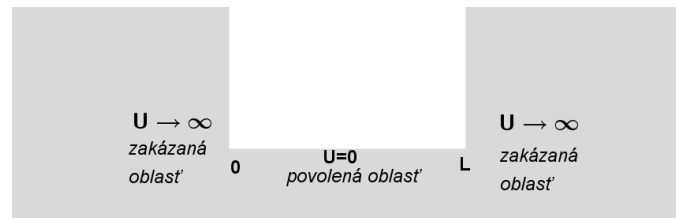
**Časový vývoj systému kvantovo:**

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t)$$

Teda takto sa rieši časový vývoj stavov v kvantovej mechanike. Upozorníme tu však, že Schrödingerova rovnica predpovedá časový vývoj pre nerušený systém, a predpovedá ho určito - s dodaním počiatočnej a okrajových podmienok máme jednoznačné riešenie pre amplitúdu, až na možnú komplexnú fázu. Akurát že ak prevedieme na systéme meranie, Schrödingerova rovnica už s ním prinesený kolaps vlnovej funkcie nepopisuje. Ale pre útekom nám ešte zanechá pravdepodobnosti pre výsledok. Ako sa deje kolaps je dosť nejasné na to, aby sme fyziku nepovažovali za čo i len blízku hotovej.

## Tóny z hlbiny

Všetko vyššie napísané bolo zatiaľ formulované všeobecne, a pri takej prezentácii často hrozí, že sa zo zreteľa stratí, čo je vlastne známe, čo neznáme, a v akom poradí treba výpočty prevádzať. Ukážme si teda notoricky známy príklad kvantového systému, elektrónu v potenciálovej jame. Ako to súvisí s hudbou by mohlo byť jasnejšie o chvíľu. Elektrón je, ako sme videli na dvojštrbinovom experimente, akási entita javiaca vlnové a časticové vlastnosti. Tendencia vyhľadávať preferenčne oblasti s nižšou potenciálnou energiou platí aj v kvantovej mechanike<sup>14</sup>. Pod potenciálovou jamou sa myslí oblasť, kde je potenciál nízky (najjednoduchšie bude dať tam jeho nulovú hladinu) oproti situácii v okolí. Ako náš prvý príklad vezmime predpoklad, že v okolí je potenciál dosť veľký na to, aby sme ho efektívne mohli považovať za nekonečný. Teda že elektrón je naisto v ohraničenej oblasti, kde je potenciál nulový.



Obr. 8: Jednorozmerná nekonečne hlboká potenciálová jama. Steny si treba predstaviť do nekonečnej výšky. Elektrón je viazaný na jednorozmernú úsečku, plošný obrázok používame, aby sme naznačili aj hodnoty funkcií na osi.

<sup>14</sup>Len okrajovo tu spomeňme, že ani v klasickej ani kvantovej teórii nejde len o energetickú agendu, ale o akúsi rovnováhu medzi snahou minimalizovať energiu a maximalizovať entropiu. V tomto jednoduchom systéme si vystačíme s úvahou o energii.

Pre hamiltonián máme

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$$

kde  $m$  je hmotnosť elektrónu a potenciálna energia je skokovitá funkcia

$$\begin{aligned} U(x) &= 0 & x &\in (0, L) \\ U(x) &\rightarrow \infty & x &\in (-\infty, 0) \cup \langle L, \infty \rangle \end{aligned}$$

Efektívne je elektrón viazaný na úsečku. Náš model je extrémne idealizovaný, z reálnych objektov sa mu blížia niektoré dlhé molekuly s elektrónmi slabo viazanými na konkrétne jadro, ale s pohybom obmedzeným na molekulu.

Pre všetky možné stavy elektrónu  $\Psi(x, t)$  má platiť Schrödingerova rovnica

$$i\hbar \partial_t \Psi(x, t) = \hat{H} \Psi(x, t)$$

Nájďme však bázu. Pre čisté stavy  $\Phi(x, t)$ , vlastné funkcie hamiltoniánu, má platiť

$$i\hbar \partial_t \Phi(x, t) = \hat{H} \Phi(x, t) = E \Phi(x, t)$$

teda postupne

$$\hat{H} \Phi(x, t) = E \Phi(x, t)$$

$$i\hbar \partial_t \Phi(x, t) = E \Phi(x, t)$$

Časová závislosť sa navrhne jednoducho

$$\Phi(x, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}(t-t_0)} \phi(x)$$

kde  $t_0$  závisí od počiatočných podmienok. Tu ho pre jednoduchosť vezmeme nulové. Nevieme ešte, aké  $E_n$  patrí do exponentu. To však získame dosadením do priestorovej časti a jej doriešením:

$$\hat{H} \left( e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \phi(x) \right) = E e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \phi(x)$$

$$\begin{aligned} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \left( e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \phi(x) \right) &= E e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \phi(x) \\ \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \phi(x) &= E \phi(x) \end{aligned}$$

Teraz je čas uvážiť konkrétnu podobu potenciálu a interpretáciu vlnovej funkcie. Ak je potenciál na intervaloch  $x \in (-\infty, 0) \cup \langle L, \infty \rangle$  nekonečný, elektrón tam naisto nebude. Amplitúda pravdepodobnosti tam bude nulová v každom čase, teda jej priestorová časť spĺňa

$$\phi(x) = 0 \quad x \in (-\infty, 0) \cup \langle L, \infty \rangle$$

Na zvyšnom intervale  $x \in (0, L)$  je potenciál nulový, a bezčasová Schrödingerova rovnica pre priestorovú časť vlastných stavov je veľmi jednoduchá:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \phi(x)$$

s všeobecným riešením

$$\phi(x) = A \cos\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x\right) + B \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x\right)$$

Pozrime, koľko nám tu ostalo neznámych parametrov: konštanty  $A$ ,  $B$  a vlastné číslo  $E$ . Koľko rovníc máme k dispozícii na ich nájdenie? Máme tu jednak normovaciau podmienku na amplitúdu pravdepodobnosti (pravdepodobnosť nájsť elektrón na intervale  $(0, L)$  je rovná jednej), a dve okrajové podmienky pre nulovú hodnotu vlnovej funkcie  $\Phi(x, t)$  na okrajoch povoleného intervalu v každom čase (a to tu vie zabezpečiť len jej priestorová časť  $\phi(x)$ ).

Podmienka  $\phi(0) = 0$  nám zakáže kosínusovú časť

$$0 = \phi(0) \quad \rightarrow \quad A = 0$$

a podmienka  $\phi(L) = 0$  nám obmedzí možnosti na argument sínusu

$$0 = \phi(L) = B \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L\right) \quad \rightarrow \quad \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L = n\pi$$

pre nejaké celé číslo  $n$ . Nula je zakázaná, lebo taká voľba by viedla k identicky nulovej amplitúde pravdepodobnosti v celej jame, čo je v protiklade s predpokladom, že tam nejaký elektrón naisto je. Našu podmienku možno splniť mnohými, avšak len veľmi špeciálnymi hodnotami energie, diskkrétne rozloženými. Označme ich ako

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

Im prislúchajúce vlastné stavy hamiltoniánu budú

$$\Phi_n(x, t) = B_n \sin\left(\sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}} x\right) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$$

Pre jamu nejakej fixnej šírky máme povolené len tie hodnoty energie, ktoré sú úmerné prevrátenej štvorcovej šírky. Najnižšia je

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Ostatné sú jej násobkami. Nie sú ekvidištančné; vyššie sú jej  $n^2$ - násobkom, teda máme postupnosť

$$E_1, 4E_1, 9E_1, 16E_1, 25E_1, \dots$$

Ešte nájdime konštanty  $B_n$  z normovacej podmienky. Akýkoľvek prípustný stav, čisté nevynímajúc, má spĺňať interpretáciu ako amplitúda pravdepodobnosti a z toho plynúce dôsledky. Komplexný kvadrát preintegrovaný cez celý dostupný interval je rovný jednej, čo nám dá potrebnú podmienku pre konštantu  $B_n$ . Pri výpočte sa zide skutočnosť, že

$$\sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}} = \frac{n\pi}{L}$$



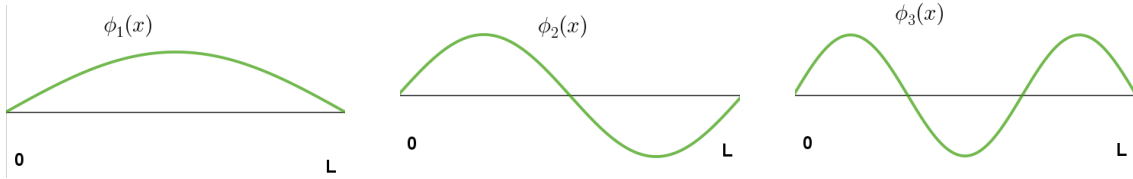
$$\begin{aligned}
1 &= \langle \Phi_n | \Phi_n \rangle = \int_0^L dx \Phi_n \Phi_n^\dagger \\
&= \int_0^L dx B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} B_n^\dagger \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{+i\frac{E_n}{\hbar}t} \\
&= |B_n|^2 \int_0^L dx \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = |B_n|^2 \frac{L}{2}
\end{aligned}$$

Toto je obmedzenie na veľkosť  $B_n$ , nie na pripadanú komplexnú fázu  $e^{i\alpha}$ . V tomto prípade normovacia konštanta je pre všetky  $n$  rovnako veľká. Môžeme pre jednoduchosť voliť

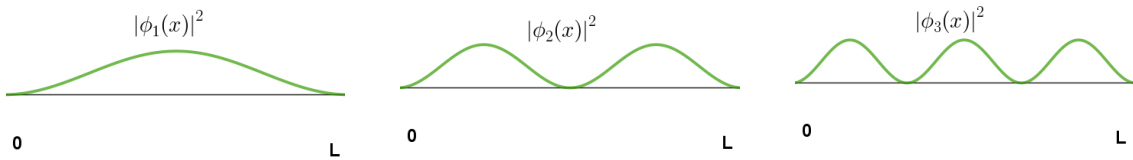
$$B_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Teda sme dostali takéto vlastné stavy hamiltoniánu pre elektrón na úsečke, bázu na vyjadrenie všetkých ostatných:

$$\Phi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}} x\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)}$$



Obr. 9: Priestorová časť amplitúd pravdepodobnosti pre prvé tri stavy s ostrou hodnotou energie



Obr. 10: Hustoty pravdepodobnosti pre prvé tri stavy s ostrou hodnotou energie

Čistý stav elektrónu na úsečke veľmi pripomína momentku klasickej struny chvejúcej sa v čistom tóne. Aj v prípade elektrónu ide o momentku, lebo je znázornená len priestorová časť. Podobne ako sa struna chveje s nejakou frekvenciou, jednou z povolených dĺžkou struny, aj elektrónová amplitúda prekmitáva s frekvenciou  $E_n/\hbar$ , pričom táto tiež nadobúda len jednu z hodnôt povolených rozmerom priestoru, na ktorý je viazaná.

## Poučenia pomedzi rovnicami

Pozbierajme záverom nejaké úvahy, ktoré je ľahko zabudnúť pri slepom počítaní. Toto bola len malá exkurzia do kvantovej mechaniky. Nepreskúmali sme problém merania, ani relativistické rozšírenia takého hračkárskeho modelu ako bol prezentovaný a mnoho iného. Ale aj po málo krokoch

sa dá robiť aspoň lokálne posúdenie vývoja.

O *vlnovo časticovom dualizme* sa už povedalo tolko, že samotná notorickosť niekedy môže budiť dojem porozumenia. Bolo by omylom domnievať sa, že sa jedná o otázku týkajúcu sa až kvantovej fyziky. O vlnových aj časticových (korpuskulárnych) vlastnostiach svetla sa sporili fyzici už za Newtona, pričom obe stránky mali argumenty v prospech svojho názoru. Špeciálna relativita tiež vykazuje veľmi silné črty tohto dualizmu. To, že vo význačných - inerciálnych - vzťažných sústavách rýchlosť svetla nezávisí od pohybu jeho zdroja, poukazuje na vlnový charakter svetla. Rýchlosť šírenia vln na hladine jazera alebo zvukových vln vo vzduchu má takúto vlastnosť. Rýchlosť signálu je daná parametrami prostredia, ktoré ho nesie. Na druhej strane, to, že rýchlosť svetla vnímajú ako izotropnú všetci inerciálni pozorovatelia, poukazuje na balistickú, časticovú teóriu. Ak človek na hladko sa pohybujúcom vlaku hodí od seba na dve opačné strany (jednu v smere pohybu vlaku, druhú proti smeru) dve loptičky rovnako veľkou silou, budú sa v sústave spojennej s vlakom pohybovať rovnako veľkou rýchlosťou. A špeciálna relativita túto vlastnosť pripisuje aj svetlu. Teda časticovo vlnová povaha svetla bola dávnou otázkou. Azda trochu novšou bola časticovo vlnová povaha aj hmotných objektov ako elektróny. Nakoniec však možno to bolo treba očakávať - ak podľa relativity synchronizovanie hodín na rôznych miestach môžeme robiť buď hmotnými objektmi (ako loptičky spomenuté vyššie) alebo svetelnými signálmi, poukazuje to na podobné previazanie s časopriestorom ako u svetla, tak u hmotných častíc. Vlnovosť a časticovosť sú tiež v podstate pojmy nemysliteľné bez časopriestoru, a teda nie je taký absurdný predpoklad, že sa elektróny a svetlo budú podobáť aj v tomto.



Obr. 11: Častica aj vlna sú len modely. Modely sú použiteľné až kým takými neprestanú byť.

Je dobré ujasniť si v súvislosti s akými javmi sú užitočné, a možno ďalej používať bežný jazyk, hovoriaci o morských vlnách ako vlnách a malých kúskoch hmoty ako o časticách. Ale jedná sa len o užitočný efektívny model. Morské vlny sú plné častíc, ktoré by pod drobnohľadom javili vlnové vlastnosti na ďalšej úrovni. Slogany typu "podľa kvantovej mechaniky sa častica môže vyskytovať na dvoch miestach naraz" sú, zjemnene povedané, trochu nešťastné. Ich "šokujúcosť" je v tom, že používajú pojem ("častica") ako ho ľudia majú zafixovaný z klasickej mechaniky, a predstavia ho v situácii, ktorá je v tej klasickej mechanike nemysliteľná. Experimenty vedúce ku kvantovej mechanike však nehovoria o tom, čo robí klasická častica, ale že klasická častica neexistuje. Respektíve ak hej, nie je to nič z toho, čo bežne označujeme ako "časticu". S vlnami je to podobne. Ani svetlo nie je "elektromagnetické vlnenie" v klasickej zmysle.

Asociácia kvantovej mechaniky s *neurčitostou* môže niekedy narobiť veľa škody, ak sa nerozumie poriadne. Podobne ako relativita netvrdí, že všetko je relatívne (naopak), ani kvantová mechanika netvrdí, že všetko je viac či menej neurčité (naopak). Neurčitosť ako taká nebola poprvýkrát prinesená kvantovou mechanikou. Fourierova transformácia bola známa sto rokov pred ňou, a táto viaže dve veličiny vzťahom neurčitosti veľmi podobným tomu Heisenbergovmu. Znovu staroveké úvahy o probléme existencie či neexistencie pohybu v jednom okamihu (keď je poloha

určená presne) možno chápať v súvislosti so zmyslupnosťou či nezmyslupnosťou pojmu okamih, teda možnosti spojitého delenia časového intervalu na menšie donekonečna - a tiež v súvislosti s nekompatibilitou súčasného poznania hybnosti a polohy, teda "heisenbergovskou" neurčitostou. Opäť, poučením kvantovej mechaniky je, že niektoré pojmy (ako napríklad stav a hodnota konkrétnej veličiny) nemožno k sebe slepo priradovať. Neurčité môžu byť niektoré veci z tých, ktoré sme za také nepovažovali. Ale sú veci, ktoré kvantová mechanika berie ako *isté*. Napríklad pravdepodobnosť musí byť normovaná. Práve požiadavka tejto istoty (ktorá okrem iného naznačuje, že niektoré veci jednoducho nemiznú) vedie ku kvantovaniu energie v mnohých systémoch - požiadavka istoty, nie neurčitosti. Schrödingerova rovnica tiež nie je neistá v zmysle nedeterministická. Stav systému sa podľa nej vyvíja veľmi jednoznačne. Zo stavu teraz rovnica povie stav neskôr. Akurát že ten stav má pravdepodobnostný charakter, prejavujúci sa v situácii, keď Schrödingerova rovnica priebeh prestane popisovať - pri meraní. Netvárame sa však, že determinizmus nedostal s príchodom kvantovej mechaniky ťažkú ranu. Problém merania, kolapsu vlnovej funkcie, je stále ešte otvorená vec (ako nakoniec mnoho vecí vo fyzike), ale nevyzerá pravdepodobné, že by ešte bolo treba sa obávať determinizmu v zmysle, akým bol niekedy prezentovaný.

Kvantová fyzika sa často tiež spomína v súvislosti s diskretnými, *nespojitémi spektrami*. Nakoniec má to aj v mene. Na jav kvantovania a absurdity kontinua v niektorých prípadoch však narážali ľudia už dávno. Bezzvyškové zreagovanie chemických látok, ak ich množstvá boli v pomere vhodných celých čísel, bola nápoveda k atomárnej teórii, čo možno považovať za kvantovanie hmoty. Toto bolo na stole dávno pred dvadsiatimi rokmi dvadsiateho storočia. Výšky harmonických tónov na strune ako celočíselné násobky základnej výšky boli známe hádam tak dlho ako strunové nástroje, čo možno považovať za kvantovanie hudby. Prekvapenie kvantovej mechaniky však bolo v tom, že kvantované boli aj veci, o ktorých to málokto čakal.



Obr. 12: Hudbe pomáha kvantovanie jej krokov, na cestách je niekedy nevyhnutné. Priepasť sa neprekoná na mnoho malých skokov.

Možno aj úspech diferenciálneho počtu viedol ľudí k mienke, že "príroda nerobí skoky". Zdá sa, že ich robí ochotne. Poučenie z kvantovej mechaniky okrem iného je, že priepasť sú aj tam, kde si namýšľame spojitý prechody. Možno ich je viac ako si myslíme, alebo je to ešte celé inak.

This project No. 2259/02/01 has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No. 945478.