

Seriál: Kvantový

Přehoupli jsme se za polovinu tohoto seriálu, a proto bychom si měli zrekapitulovat, co už máme za sebou.

V prvním díle seriálu jsme podnikli velmi krátký a divoký nálet na teorii relativity a otázku kvantové gravitace. Speciální teorie relativity mluví o tom, jak různě rychlí pozorovatelé vidí věci odlišně. Prostor a čas už nejsou oddělené a pro různé pozorovatele se míchají – potřebujeme je popisovat jako jeden celek, *časoprostor*. Zároveň nám ale speciální teorie relativity říká, že *jsou některé věci, které se prostě nemění, ať se díváme, jak se díváme* (jako je například časoprostorový čtyřinterval $(\Delta s)^2$) a opravdová fyzika se nedá jiným pohledem obelhat. Obecná teorie relativity pak tyto myšlenky rozšiřuje a formuluje gravitaci pomocí zakřivení, zmačkání a pootáčení toho, co znamená čtyřinterval $(\Delta s)^2$ v různých bodech časoprostoru.

V díle druhém jsme uvedli důležitý nástroj každého teoretického fyzika – variační principy. Variační principy jsou nejbáječnější pomůcka při *hádání* fyzikálních zákonů, protože umožňují přirozeně rozšiřovat stávající teorie – třeba od bodu k řetízku nebo od částice ke struně. Ve druhém i třetím díle jsme viděli, že variační principy lze použít úplně všude, u statické rovnováhy, u lomu paprsků, u kmitů mechanických strun, u letů volných částic v relativitě i v klasické fyzice, a nakonec i u pohybu těch zvláštních provázkovitých objektů, kterým říkáme *relativistické struny*.¹

Co teď? Pokud jste si zatím nestihli pořádně pročíst složitá odvození z minula, nemusíte zoufat, protože k akci struny se vrátíme až příště. Po uvedení relativity a principu akce se nyní vrhneme na něco docela jiného – na principy kvantové fyziky. O to tady přeci od začátku jde, *nakvantovat* gravitaci. Co ale vůbec je to kvantování? Proč je potřeba mít kvantovou teorii? A jak se to dělá? To si vysvětlíme v tomto díle.

V roli slepce s nejistou rukou

Pokud sledujete objekt v každodenním životě, řekněme mokrou houbu vrženou po vás spolužákem, onu houbu bombarduje v každém okamžiku nespočet fotonů, ze kterých část pak vnímá vaše oko. V přímém přenosu tak můžete sledovat detailní pohyb houby a přesně předpovědět její pohyb tak, abyste se stihli včas vyhnout a ona nasáklá zapáchající houba zasáhla vašeho nic netušícího nebohého spolužáka (nedostaly se k němu přes vás fotony).

V mikrosvětě je všechno jinak, každý foton nadělá pěknou paseku a s předpovědí musíte být mnohem opatrnější. Situaci si můžete představit tak, že máte zavázané oči a značně roztřesenou ruku s hůlkou. Pokud chcete najít nějaký objekt, řekněme houbu nebo, abychom se trochu přiblížili tomu mikrosvětlu, elektron, musíte na něj narazit hůlkou. Ťuknutím předmět vždy trochu vyrušíte a rozpohybujete. Nicméně ruka se vám také třese tolik, že můžete omylem *překmitnout* přes celý hledaný předmět! Nad třasem ruky nemáte žádnou kontrolu, takže i když ucítíte dotek hůlky a objektu, nedokážete určit, jestli jste předmět třeba z půlky nepřekmitli a teprve pak do něj nenarazili.

¹Znovu opakujeme, že *mechanickou strunou* myslíme opravdovou strunu například na kytaru a *relativistickou strunou* jakousi jednorozměrnou úsečkou nebo smyčkou plující v časoprostoru.

Je ale jeden způsob, jak zjistit přesněji, kde se předmět v prostoru nachází, můžete svoji tyčku držet křečovitěji. Hůlka pak kmitá rychleji a do předmětu narazí dřív a s kratším překmitem. Je tu ovšem jedna nevýhoda – do předmětu při setkání narazíte rychleji a tím ho víc vyrušíte. Pokud bychom chtěli najít předmět úplně přesně, naše ruka by kmitala tak rychle, že by při nárazu předmět vystřelila někam úplně do neznáma (máme s tím třasem ruky opravdu docela problém).

Obrat Luího D Broje

Doopravdy ale nejsme slepci v mikrosvětě, ale místo roztřesené hůlky s rukou si můžete představit elementární částice, jako je foton nebo elektron. Jak to? Nebojte, hned se k tomu dostaneme.

Asi dobře víte, že světlo lze stejně dobře popsat jak jako elektromagnetickou vlnu, tak i jako proud fotonů. Spojení mezi těmito dvěma obrazy poskytuje pozorování *fotoelektrického efektu*, kdy kov vystřeluje elektrony, pokud je vystaven světlu vysoké frekvence (například ultrafialovému) a vystřeluje elektrony o větších a větších rychlostech s rostoucí frekvencí světla.

Tento jev vysvětlil v roce 1905 Albert Einstein² pomocí představy, že existují malé balíčky oddělených vln, kde pro světlo o frekvenci f nese každý balík energii

$$E = hf, \quad (1)$$

kde h je nějaká konstanta, kterou dnes známe jako Planckovu. Lze však jít ještě dále, speciální teorie relativity přiděluje částici letící rychlostí světla c energii

$$E = pc, \quad (2)$$

kde p je hybnost částice.³ Když zkombinujeme rovnice (1) a (2) se vztahem pro vlnovou délku světla $\lambda = c/f$, dostáváme

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (3)$$

Ve své doktorské práci představil Louis De Broglie⁴ zajímavou hypotézu – když mají na mikroskopické úrovni vlny vlastnosti částic, neměly by mít mikroskopické částice vlastnosti vln? Pro výpočet vlnové délky takovýchto *hmotných vln* použil právě vztah (3) s použitím klasického $p = mv$.

Zajímavý, ale trochu zvláštní nápad, říkáte si. To ale ještě nevíte, že tři roky na to naměřili experimentátoři Davisson a Germer vlnovou difrakci elektronů na krystalové mřížce odpovídající vlnové délce (3) a De Broglieho hypotéza tím byla potvrzena!

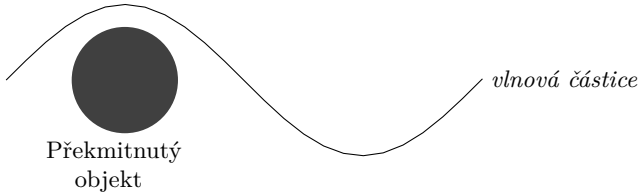
To je tedy ta naše slepecká hůlka – mikroskopické částice jako foton, elektron nebo proton, které vysíláme, aby narážely do předmětů. Nic lepšího prostě k dispozici nemáme. Třás hůlky odpovídá jejich vlnovému charakteru a délka překmitu vlnové délce. Na obrázku 1 můžete vidět ilustraci *překmitu* mikroskopického objektu.

Nesmíme ale zapomenout, že *na těchto škálách musí mít i pozorovaný objekt vlnový charakter*. Navíc vlastně dobře nevíme, co to znamená *srážka dvou vlnových částic*, takže je obrázek 1 pouze jakýmsi intuitivním přiblížením toho, proč jsou naše pozorování nepřesná.

²V roce 1921 pak dostal Einstein Nobelovu cenu za své služby teoretické fyzice a zejména za jeho objev zákona fotoelektrického jevu, za nic jiného!

³Fotony však nemají žádnou vlastní klidovou hmotnost m , proto nemůžeme říct $p = mv$!

⁴Byl to Francouz, takže se to čte Luí D Broj, viz nadpis.



Obr. 1: Ilustrace nepřesnosti při zkoumání mikrosvěta.

Síla sevření naší slepecké hůlky zvyšující frekvenci jejího trasu odpovídá energii částice nebo též její hybnosti. Zvýšená energie nebo hybnost částice pak vyruší jakoukoliv věc, kterou se náletem mikroskopické částice pokoušíme pozorovat.

Pokud si takto uvědomíme, že *polohu ani hybnost částice nemůžeme znát současně přesně*, dojdeme navíc k legrační zacyklenosti: *pomocí částic, jejichž přesnou polohu ani hybnost neznáme, se snažíme zjistit polohu a hybnost dalších částic, což bychom ani tak nemohli udělat přesně*.

Mikroskopický svět je prostě jako rozmlžená struktura, na kterou si nemůžeme sáhnout, ať se snažíme sebevíc. Rozmlženost *fázového prostoru* na mikroskopických škálách je pak nejlépe demonstrována pro chybu polohy Δx a hybnosti Δp takzvanými Heisenbergovými relacemi neurčitosti:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (4)$$

kde $\hbar = h/(2\pi)$ je redukováná Planckova konstanta.

Ještě než přejdeme k formulaci kvantové mechaniky, zmíníme jednu poslední poznámku – o částici tu mluvíme jako o vlně a naopak. Pravda je taková, že v řadě kontextů se mikroskopická částice chová výhradně vlnově, v dalších ale výhradně částicově, tj. jako hmotný bod. Je to právě tato podivná dualita, která zamotává hlavu vědcům již skoro století a neexistuje jasná shoda na tom, jak ji vysvětlovat.

Shoda však existuje na aparátu, který předpovídá výsledky experimentů, ten uvedeme záhy.

Hmotný bod je mrtev, ať žije stav!

V historii fyziky se ukázal být nesmírně plodný přístup: *Nemůžu to ani v principu změřit? Pak to není potřeba v žádných fyzikálních zákonech*. Takto například Albert Einstein vyškrtl z fyziky éter a absolutní souřadný systém, vůči kterému se mělo pohybovat světlo svojí konstantní rychlostí c , a získal speciální teorii relativity.

U kvantové mechaniky se jde ovšem ještě o krok dál – protože nemůžeme na mikroskopických škálách přesně znát polohu ani hybnost částice, prostě je zahodíme a fyzikální zákony budeme popisovat bez nich. Polohy a hybnosti, tj. bod ve fázovém prostoru, jsou nahrazeny *stavovým vektorem*, který budeme značit $|\Psi\rangle$. Smíříme se s tím, že v sobě nese pouze informaci o pravděpodobnosti různých hybností a poloh, nikoliv však jejich ostré hodnoty. Protože se obecně může částice s nějakou nenulovou pravděpodobností v principu nacházet v nekonečně mnoha bodech, bude stavový vektor obecně nekonečně-dimenzionální (bude mít nekonečně mnoho složek).

To však není všechno, protože nám experiment bezpodmínečně potvrzuje relace neurčitosti (4) pro všechny fyzikální situace, *musí být důsledkem nějaké fundamentální fyziky!* Jak to udělat se dozvíte až za pár odstavců.

O kvantové mechanice, která udává stavové vektory a jejich dynamiku, se přednáší celé semestry vysokoškolských přednášek. Pokud si ale chcete přečíst nějaký středně zevrubný úvod, můžete si v archivu na našem webu najít XX. ročník FYKOSího seriálu, který se právě kvantové mechanice výhradně věnuje.

My si tady řekneme pouze následující: informace o měřitelných veličinách se z kvantověmechanického stavového vektoru těží takzvanými *operátory*. Operátory si můžete představit jako matice skládající se z nekonečně mnoha čísel násobící nekonečně-dimenzionální stavový vektor (nekonečně dlouhý sloupcový vektor). Podívejte se, co udělá násobení maticí v následujícím případě:⁵

$$\begin{pmatrix} \lambda & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & \cdots & & \lambda \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Vidíte, že na sloupcový vektor působilo násobení čtvercovou maticí jako násobení číslem λ . Pokud máme čtvercovou matici M a nějaký vektor \mathbf{v}_λ , pro který platí

$$M\mathbf{v}_\lambda = \lambda\mathbf{v}_\lambda,$$

říkáme, že \mathbf{v}_λ je vlastním vektorem operátoru (čtvercové matice⁶) M s vlastním číslem λ . Právě takovýmto způsobem ale získáváme z kvantově-mechanického stavu měřitelné veličiny – pomocí jejich odpovídajících operátorů a vlastních čísel.

Co se ale stane, pokud stavový vektor není vlastním vektorem daného operátoru? Matematická teorie nám zajišťuje, že se na vlastní vektory dá každý vektor rozložit a podíl⁷ zastoupení jednotlivých vlastních vektorů je úměrný *pravděpodobnosti, s jakou nalezneme jeho vlastní hodnotu jakožto hodnotu sledované fyzikální veličiny!*

Legrační je, že pak máme operátory, jako je energie částice, které mohou v některých situacích nabývat pouze diskrétních hodnot a *nic mezi tím*.⁸ Můžeme tedy naměřit pouze jednu hodnotu energie a další až o nějaký kus, *kvantum*, dál.

Spousta z vás si doteď možná říkala, proč se kvantové mechanice říká *kvantová*, když se doteď zdála oproti klasické hlavně *vlnová*. Toto kvantování pozorovaných hodnot různých veličin název již osvětluje.

Souvislost mezi vlnovostí a kvantováním můžeme přiblížit následovně – asi dobře víte, že struna uchycená na houslích zní při daném utážení jen jedním tónem, kmitá s jednou frekvencí. To ale není tak úplně pravda, na strunu se vejdou i *vyšší módy* nebo *vyšší harmonické*, které kmitají s *celočíslnými násobky hlavní frekvence* a trochu pozměňují vyznění tónu a dodávají mu jeho specifické zabarvení.⁹

⁵Pokud neumíte násobit matice a vektory, pak vezte, že se to provádí tak, že výsledný sloupcový vektor postupně plníte skalárním součinem násobeného sloupcového vektoru s řádky násobící matice. Jako první tedy do výsledného sloupcového vektoru napíšete součin původního sloupcového vektoru s prvním řádkem matice atd.

⁶Všimněte si, že čtvercová matice vždy násobením vektor jen *přeoperuje* – stane se z něj opět sloupcový vektor stejné délky.

⁷přesněji druhá mocnina jeho absolutní hodnoty

⁸Vzpomeňte na úlohu od Nielse Bohra k druhému dílu seriálu.

⁹To odpovídá diskrétnímu systému řešení vlnové rovnice z úlohy k minulému dílu seriálu.

Pozorujeme tedy vlnění, které se děje pouze na určitých frekvencích, které jsou od sebe vzdáleny o nějaká kvanta. Proto, když je částice někde nějakým způsobem *uchycená* nebo též *vázaná* (jako třeba elektron v atomu), pozorujeme jeho energie v nějakých diskrétních hladinách.

Zpátky ke kvantové mechanice, jako všechny fyzikální veličiny, má i poloha x svůj operátor \hat{X} a hybnost p operátor \hat{P} . Heisenbergovy relace neurčitosti (4) jsou zajištěny postulátem, že působení operátorem polohy na stav $|\Psi\rangle$ a pak operátorem hybnosti dá jiný výsledek než při prohozeném pořadí. Tj. měření polohy a poté až hybnosti dá jiný výsledek než při prohozeném pořadí daných měření. Matematické zkoumání požadavku Heisenbergových relací vede na požadavek rovnice

$$\hat{X}\hat{P}|\Psi\rangle - \hat{P}\hat{X}|\Psi\rangle = i\hbar|\Psi\rangle.$$

Protože zmíněná rovnost musí platit pro libovolný stav, zkráceně se též tato tzv. *komutační relace* zapisuje jako

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar. \quad (5)$$

Teď tedy konečně víte, co je to kvantování – opustí se dosavadní popis pomocí přesného stavu fyzikálního systému a začne se popisovat objektem, kterému říkáme stavový vektor. Ze všech veličin, jako je poloha nebo hybnost, se stanou operátory, a jako náš hlavní průvodce pro jejich identifikaci nám slouží komutační relace (5). Tento postup však není úplně jednoznačný, zvlášť u složitějších systémů, a proto se říká, že *kvantování je spíš umění, než matematický postup*. Nakvantování systému musí proto vždy ještě potvrdit experimentální pozorování.

Průměty v nekonečných dálavách a prostorech

Mohli jste si všimnout, že jsme doteď nepoužívali složky polohy nebo hybnosti. To je proto, že budeme pro jednoduchost uvažovat pouze částici, která se může pohybovat pouze v jednom rozměru a ne ve třech, jako jsme zvyklí. Složka hybnosti i polohy je pak jen jedna a značíme ji x a p . K tomu, abychom popsali stavový vektor, si musíme vybrat něco jako souřadný systém, ve kterém vyjádříme složky vektoru. Zatímco u prostorových vektorů volíme složky podle průmětů do celých os x, y, z , v případě stavového vektoru je vše úplně jinak. Musíme totiž promítat stavový vektor *do vlastních vektorů nějakého operátoru*, kterých může být nekonečně mnoho.

Jedním z nejčastějších operátorů, do jehož vlastních vektorů se stavový vektor promítá, je operátor polohy \hat{X} . Jeho vlastní vektory jsou dost podivné, protože jsou to stavy, ve kterých částice zcela určitě nalezneme na nějaké naprosto přesné pozici x . Pokud se ale podíváte na Heisenbergovy relace (4), je jasné, že pak neurčitost hybnosti takové částice musí být *nekonečná*. U vlastních vektorů operátoru \hat{X} prostě nevíme, jakou rychlostí se částice v odpovídajícím stavu pohybuje. Tím si ale nebudeme lámat hlavu a přejdeme ke složkám stavového vektoru.

Stejně jako vektor \mathbf{v} má obvykle tři složky v_x, v_y, v_z , tak stavový vektor $|\Psi\rangle$ má složky v této takzvané x -reprezentaci $\psi(x)$, kde x indexuje průmět na vlastní stav, který se určitě nachází v bodě x . Vidíte, že složky $\psi(x)$ můžeme vlastně chápat jako funkci polohy, která v našem případě nabývá obecně komplexních hodnot. Této funkci se často říká *vlnová funkce*. Hustota pravděpodobnosti, že částice nalezneme v daném bodě, je pak dána kvadrátem velikosti vlnové funkce v daném bodě

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2.$$

Když působíme operátorem \hat{X} na náš stavový vektor $|\Psi\rangle$, promítne se na vlastní stavy operátoru a každý z průmětů je vynásoben vlastním číslem operátoru. V tomto případě jsou vlastní hodnoty polohy částice x a vlastní vektory jsou zmíněné zcela přesně lokalizované stavy v těchto

polohách. Proto, když působíme operátorem \hat{X} na náš stav, každý průmět neboli složka vektoru se vynásobí odpovídající hodnotou polohy x :

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &\rightarrow \hat{X}|\Psi\rangle, \\ \psi(x) &\rightarrow x\psi(x). \end{aligned}$$

Napůl mrtvé kočky a jejich spektra

Geometricky si představovat promítání na nekonečně mnoho vektorů může být docela fuška, ale zatněte zuby, protože se už dostáváme k závěru tohoto dílu seriálu. V druhém dílu jsme zmiňovali, že celková energie částice je součet její kinetické energie $T = mv^2/2$ a potenciální energie $V(x)$. Pokud vztah přepíšeme pomocí hybnosti $p = mv$ získáváme¹⁰

$$E \equiv H = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (6)$$

V kvantovém případě stačí tedy jen přejít do x -reprezentace a počítat energetické hladiny jako vlastní stavy tohoto operátoru. Operátor potenciálu bude na složky stavového vektoru $\psi(x)$ působit násobením svojí hodnotou $V(x)$ stejně jako operátor \hat{X} , protože závisí jen na poloze. Horší už je to s operátorem \hat{P} , pro jehož identifikaci máme jen komutační relaci (5). V podúloze a) k seriálu si můžete ověřit, že v x -reprezentaci splňuje komutační relace operátor

$$(\hat{P})_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (7)$$

Když tedy chceme hledat energetické hladiny nějakého fyzikálního systému, jako je třeba elektron v atomu vodíku, vezmeme definici energie (6), vložíme do ní operátor hybnosti vyjádřený v x -reprezentaci (7) (potenciál není třeba měnit) a řešíme diferenciální rovnici¹¹

$$(\hat{H})_x \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

kde E už je ovšem obyčejné číslo – možná měřená hodnota energie, kterou ovšem neznáme. Získáme tak vlnovou funkci, a tudíž i rozložení pravděpodobnosti výskytu částice, ale co nás většinou zajímá více, možné energetické hladiny daného systému.

Částice jako například elektron v atomu, který pak přechází mezi dvěma oddělenými energetickými hladinami, se nějak musí zbavit *celého rozdílu energie najednou*, v jednom kvantu. Forma energie, kterou se elektron energie zbavuje, je vyzářený foton. Proto, když ionizujeme atomy, pozorujeme u nich diskrétní hodnoty frekvencí (a tudíž energií), na nichž vyzařují při rekombinaci elektronů (jejich návratu do *slupek* atomu).

Jinak řečeno, pozorujeme při ionizaci a následné rekombinaci diskrétní spektrum. Protože byla kvantová mechanika používána nejdříve v kontextu spekter atomů a molekul, říká se často úloze nalezení energetických hladin daného problému *hledání spektra hamiltoniánu*.

Tím protentokrát končíme. Kvantová mechanika je divná, a jak říkal Richard Feynman, kvantové mechanice nerozumí nikdo. Její výhoda je v tom, že ačkoliv jsme v mikrosvětě jako slepci s roztřesenou rukou, kvantová mechanika dokáže v těchto oborech přesto poskytovat

¹⁰Celkové energii se též někdy říká hamiltonián, proto se též kromě E značí jako H .

¹¹Této rovnici se někdy říká bezčasová Schrödingerova rovnice.

neuvěřitelně přesné experimentální předpovědi. A o tom fyzika je, o tom, co můžeme změřit. Více ke kvantové mechanice příště a v posledním díle nakvantujeme strunu – je se na co těšit.

Fyzikální korespondenční seminář je organizován studenty MFF UK. Je zastřešen Oddělením pro vnější vztahy a propagaci MFF UK a podporován Ústavem teoretické fyziky MFF UK, jeho zaměstnanci a Jednotou českých matematiků a fyziků.

Toto dílo je šířeno pod licencí Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 Unported.
Pro zobrazení kopie této licence, navštivte <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>.