

$$|\psi|^2 = \sum_{i=1}^n |c_i|^2 |\psi_{\vec{p}_i}|^2 \quad (39)$$

kde $|c_i|^2 |\psi_{\vec{p}_i}|^2$ reprezentuje hustotu pravděpodobnosti výskytu částice v i-tém svazku.

Celková pravděpodobnost, že částice bude nalezena někde v i-tém svazku je

$$\int |c_i|^2 |\psi_{\vec{p}_i}|^2 d\tau = |c_i|^2 \quad (40)$$

a integrací obou stran (39) přes celý normalizační objem dostaneme

$$1 = \sum_i |c_i|^2, \quad (41)$$

neboť všechny funkce jsou normalizované v objemu L^3 .

Na uvedené zařízení můžeme v našem konkrétním případě pohlížet jako na experiment, postavený ke změření impulsu částice, která je ve stavu s vlnovou funkcí (36). Provedená úvaha vede k závěru, že můžeme naměřit jen některou z hodnot \vec{p}_i ($i=1,2,\dots,n$), přičemž pravděpodobnost, že naměříme hodnotu \vec{p}_i je $|c_i|^2$ (pravděpodobnost, že naměříme kterýkoliv z impulsů je podle (41) rovna 1, tj. jistotě).

Obecně můžeme tedy shrnout:

je-li jednočásticová vlnová funkce ψ vyjádřena jako superpozice možných a experimentálně rozlišitelných stavů ψ_i

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + \dots + c_i \psi_i + \dots, \quad (42)$$

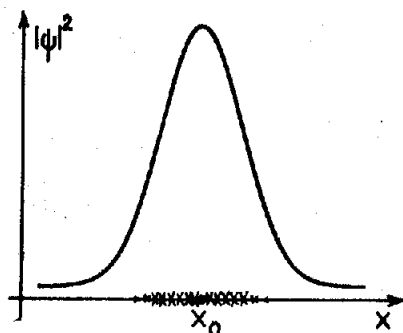
potom pravděpodobnost, že při měření bude částice nalezena ve stavu s vlnovou funkcí ψ_i je rovna $|c_i|^2$ ($i=1,2,\dots$) (všechny funkce předpokládáme normalizované).

5. Vlnová klubka a relace neurčitosti

5.1) Vlnová klubka

Postulovali jsme, že fyzikální stav částice je plně určen odpovídající vlnovou funkcí $\psi(\vec{r};t)$; tato funkce nabývá obecně komplexních hodnot, může mít nejrozmanitější tvar (průběh), musí však vždy splňovat podmínky shrnuté v odst. 3.4. Pravděpodobnost výskytu částice je velká tam, kde amplituda (přesněji: kvadrát absolutní hodnoty amplitudy) je velká. Periodické vlnové funkce (rovinné vlny), které jsme přiřazovali volným

částicím s daným impulsem, dávají konstantní hustotu pravděpodobnosti. V mnoha reálných situacích (experimentech) však víme, že částice (byť volná) se s velkou pravděpodobností nachází v nějaké, třeba i velmi malé, části prostoru; měla by jí proto být přiřazena vlnová funkce, jejíž amplituda je výrazně odlišná od nuly jen v této části prostoru (obr. 15).



Obr. 15.

Je-li částice s velkou pravděpodobností lokalizována ve vyšrafované oblasti na ose x , potom musí být $|\psi|^2$ velké jen v této oblasti, jak je schematicky znázorněno na obrázku.

Z nauky o vlnění víme (viz např. [5]), že vlnové útvary s velkou amplitudou jen v části prostoru - tzv. vlnová klubka - lze vytvořit vhodnou superpozicí (součtem) monochromatických vln, s různými vlnovými délkami. Protože princip superpozice jsme přijali i do základů kvantové mechaniky, můžeme stejným postupem vytvářet i prostorově lokalizované vlnové funkce.

Dosud jsme předpokládali, že příspěvky do superpozice stavů je možné rozlišit diskretně proměnným indexem (kvantovým číslem). Jestliže se však veličina rozlišující možné stavy (tj. kvantové číslo) může měnit v nějakém intervalu hodnot spojitě (příkladem je impuls p , který pro volnou částici může nabývat všechny hodnoty z intervalu $(-\infty, +\infty)$), můžeme vzít do superpozice všechny vlnové funkce z tohoto intervalu; sumace, která byla např. ve vztahu (36), pak přejde v integraci.

Volná částice, která se pohybuje jen po ose x , může tedy být ve stavu, který v daném časovém okamžiku (předpokládejme v $t=0$) lze obecně vyjádřit takto (rov. (36))

$$\psi(x;0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) dp \quad (43)$$

kde $c(p)$ je koeficient, s nímž do superpozice přichází stav s impulsem p (s normalizovanou vlnovou funkcí $(2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}$; $(2\pi\hbar)^{-1/2}$ je normalizační konstanta při normalizaci na δ -funkci (viz dod.D)). Protože p se mění spojitě, je $c(p)$ funkce proměnné p . Zobecníme-li závěr odst. 4.3 na tento případ, potom (předpokládáme, že $\psi(x;0)$ je normalizovaná pro $x \in (-\infty, +\infty)$) výraz

$$|c(p)|^2 dp \quad (44)$$

udává pravděpodobnost, že u částice ve stavu s vlnovou funkcí (43), bude při měření impulsu naměřena jeho hodnota v intervalu $(p, p+dp)$.

Zobecněná podmínka (41) je

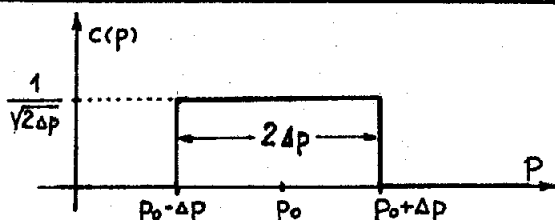
$$\int_{-\infty}^{\infty} |c(p)|^2 dp = 1 \quad (45)$$

Funkce $c(p)$ jednoznačně (pomocí vztahu (43)) určuje vlnovou funkci $\psi(x;0)$ a tím i stav částice v čase $t=0$. Rovněž její interpretace, vyjádřená vztahy (44), (45), je obdobná interpretaci vlnové funkce $\psi(x)$. Můžeme proto na ni pohlížet jako na druhou možnou reprezentaci stavu částice; říkáme, že $c(p)$ je vlnová funkce v impulsové reprezentaci. Student obeznámený s Fourierovou transformací (dod.D), v ní samozřejmě pozná Fourierovu transformaci funkce $\psi(x)$.

Vraťme se však k naší původní úloze, vytvořit prostorově lokalizovanou vlnovou funkci $\psi(x)$. Zvolme (obr. 16)

$$\begin{aligned} c(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\Delta p}} \quad \text{v intervalu } \langle p_0 - \Delta p, p_0 + \Delta p \rangle \\ &= 0 \quad \text{v } (-\infty, p_0 - \Delta p) \text{ a v } (p_0 + \Delta p, +\infty) \end{aligned} \quad (46)$$

Konstanta $(2\Delta p)^{-1/2}$ je zvolena tak, aby platilo (45).



Obr. 16.

Funkce $c(p)$ zadaná vztahem (46).

Vlnovou funkci (43) pak můžeme psát

$$\psi(x;0) = \frac{1}{2\sqrt{\pi\hbar\Delta p}} \int_{p_0 - \Delta p}^{p_0 + \Delta p} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x\right) dp; \quad (47)$$

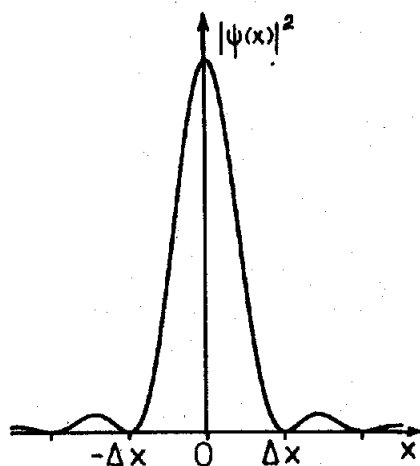
Integrál snadno vypočteme s výsledkem

$$\psi(x;0) = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi\Delta p}} \cdot \frac{\sin(\Delta p \cdot x/\hbar)}{x} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x\right) \quad (48)$$

O normalizaci $\psi(x)$ se přesvědčíme přímým výpočtem (integrál viz dod.A)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x;0)|^2 dx = \frac{\hbar}{\pi\Delta p} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\Delta p \cdot x/\hbar)}{x^2} dx = \frac{\hbar}{\pi\Delta p} \frac{\Delta p}{\hbar} \pi = 1$$

Hustota pravděpodobnosti $|\psi(x)|^2$ je v obr. 17.



Obr. 17.

Hustota pravděpodobnosti výskytu pro volnou částici na ose x , která je ve stavu s vlnovou funkcí (48); pravděpodobnost výskytu částice je velká v intervalu zhruba $(-\Delta x, \Delta x)$, kde $\Delta x = \pi \hbar / \Delta p$.

Budeme-li u částice, která je ve stavu s vlnovou funkcí (48) (v čase $t = 0$) určovat polohu, najdeme ji v intervalu šířky asi $2 \Delta x$ v okolí bodu $x = 0$. Cena, kterou jsme za tuto lokalizaci v prostoru x zaplatili, je částečná ztráta informace o impulsu částice. Budeme-li totiž měřit impuls částice, která je ve stavu s vlnovou funkcí (48), můžeme se stejnou pravděpodobností (rovnou $|c(p)|^2 = 1/2 \Delta p$) naměřit kteroukoliv hodnotu z intervalu $(p_0 - \Delta p, p_0 + \Delta p)$. Protože součin $\Delta x \cdot \Delta p$ je konstantní :

$$\Delta x \cdot \Delta p = \pi \hbar \quad (49)$$

bude každé zmenšení neurčitosti v poloze provázeno zvětšením neurčitosti v impulsu částice a obráceně.

Limitní případy jsou:

- (i) $\Delta p \rightarrow 0$ ($c(p)$ má charakter δ -funkce), $\Delta x \rightarrow \infty$: známe přesně impuls částice, nemáme žádnou informaci o její poloze (vlnová funkce je de Broglieho vlna $\psi(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(p_0 x/\hbar)$)
- (ii) $\Delta x \rightarrow 0$ ($\psi(x)$ má charakter δ -funkce), $\Delta p \rightarrow \infty$: částice je přesně lokalizována v x -prostoru, nemáme žádnou informaci o jejím impulsu.

5.2) Relace neurčitosti pro souřadnice a impuls

Hodnotu součinu $\Delta x \cdot \Delta p$ podle (49) jsme dostali pro funkci $c(p)$ znázorněnou na obr. 16. Protože velikost tohoto součinu závisí na volbě $c(p)$, můžeme formulovat úkol, nalézt takovou funkci $c(p)$, která by dávala minimální hodnotu součinu $\Delta x \cdot \Delta p$. Tím zřejmě také získáme odpověď na otázku, s jakými minimálními neurčitostmi je vůbec možné, naměřit současně souřadnici a impuls. Chceme-li však hledat minimum součinu $\Delta x \cdot \Delta p$, musíme nejprve jednoznačně definovat veličiny $\Delta x, \Delta p$ (obecně totiž nemusí funkce $|\psi(x)|^2, |c(p)|^2$ protínat osu x , resp. p , jako na obrázcích 16, 17).

Nejčastěji se $\Delta x, \Delta p$ definují jako střední kvadratické odchylky od středních hodnot, tj.

$$\begin{aligned}(\Delta x)^2 &= \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle 2x \langle x \rangle \rangle + \langle \langle x \rangle^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\(\Delta p)^2 &= \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2\end{aligned}\quad (50)$$

kde závorka $\langle \rangle$ značí střední hodnotu. Způsob výpočtu středních hodnot v kvantové mechanice budeme postulovat v kap.IV; veličiny $\Delta x, \Delta p$, definované vztahy (50), však mají běžný smysl, známý ze základů statistické teorie zpracování měření.

Úlohu o nalezení minimálního vlnového klubka (nalezení $c(p)$ pro minimální součin $\Delta x, \Delta p$) řešil r.1925 W.Heisenberg. Ukazuje se, že nejvhodnější klubko získáme s Gaussovou funkcí (dod.A)

$$c(p) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} \sqrt{\Delta p}} \exp \left[-\frac{(p - p_0)^2}{4 (\Delta p)^2} \right] \quad (51)$$

kde $p_0 = \langle p \rangle$ a disperse $\sigma = \sqrt{2} \Delta p$ je zvolena tak, aby disperse pro

$$|c(p)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \Delta p} \exp \left[-\frac{(p - p_0)^2}{2 (\Delta p)^2} \right] \quad (52)$$

byla právě Δp (statistické rozložení naměřených impulsů udává podle (44) $|c(p)|^2$). O tom, že tato $c(p)$ je normalizována podle (45), se přesvědčíme přímým výpočtem (integrál je v dod.A).

Dosazením do (43) dostaneme

$$\begin{aligned}\psi(x;0) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/4} \sqrt{\hbar \Delta p}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(p-p_0)^2}{4(\Delta p)^2}} e^{i \frac{p}{\hbar} x} dp = \\&= \frac{1}{(2\pi)^{3/4} \sqrt{\hbar \Delta p}} \cdot e^{-\frac{x^2 (\Delta p)^2}{\hbar^2}} \cdot e^{i \frac{p_0}{\hbar} x} \cdot \\&\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{4(\Delta p)^2} \left[p - \left(p_0 + i \frac{2(\Delta p)^2}{\hbar} x \right) \right]^2 \right\} dp\end{aligned}\quad (53)$$

Integrál v (53) je roven (dod.A) $2\sqrt{\pi} \Delta p$, takže

$$\psi(x;0) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} \sqrt{\Delta x}} e^{-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2}} \cdot e^{i \frac{p_0}{\hbar} x} \quad (54)$$

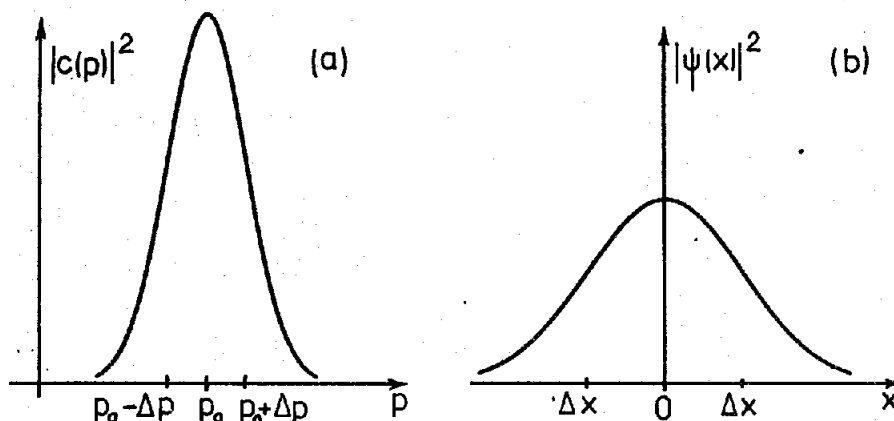
kde

$$\Delta x = \frac{\hbar}{2 \cdot \Delta p} \quad (55)$$

Protože

$$|\psi(x;0)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta x} \exp \left[-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2} \right] \quad (56)$$

je disperse naměřených hodnot x rovna Δx ; pro jednoduchost jsme zvolili $x_0 = \langle x \rangle = 0$ (lokalizace částice v okolí počátku), záměnou x na $(x-x_0)$ však snadno získáme lokalizaci v okolí libovolného bodu x_0 . Křivky $|c(p)|^2$, $|\psi(x;0)|^2$ jsou v obr.18.



Obr. 18. Hustota pravděpodobnosti výskytu (a) impulsu, (b) souřadnice, pro částici ve stavu s vlnovou funkcí (54); v obou případech jde o normalizované Gaussovy křivky s dispersí (a) Δp , (b) Δx . Disperse představují střední kvadratické odchylky (50).

Dává-li Gaussova funkce $c(p)$ minimální součin $\Delta x \cdot \Delta p$ rovný podle (55) $\hbar/2$, potom obecně můžeme psát

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (57)$$

kde $\Delta x, \Delta p$ jsou definovány vztahy (50).

Nerovnost (57) je známá Heisenbergova relace neurčitosti pro souřadnici a impuls v případě, že se částice pohybuje jen po ose x .

V trojrozměrném případě, kdy poloha částice je určována polohovým vektorem $\vec{r} = (x, y, z)$ a její impuls je vektor $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$, platí relace (57) pro každý souřadný směr zvlášť, takže

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \quad (58)$$

Vlnové klubko (43) v trojrozměrném případě bude

$$\psi(\vec{r};0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} c(\vec{p}) \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) dp_x dp_y dp_z \quad (59)$$

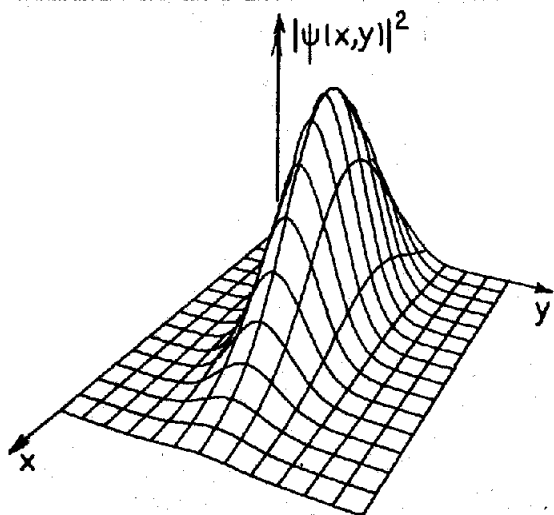
Je-li možné psát funkci $c(p)$ jako součin

$$c(\vec{p}) = c_1(p_x) \cdot c_2(p_y) \cdot c_3(p_z), \quad (60a)$$

pak, protože

$$e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} = e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p_y y} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p_z z}, \quad (60b)$$

je možné integrál (58) napsat jako součin tří, již vyřešených, jednorozměrných případů a závěr (58) je tím zřejmý; zdoluhavějším postupem však může být jeho platnost dokázána pro libovolná trojrozměrná klubka.



Obr. 19.

Dvojměrné gaussové klubko.

Je-li ale možné při vytváření klubek uvažovat každý souřadný směr zvlášť, znamená to, že lokalizace částice v jednom směru (přesné určení některé ze souřadnic, např. x -ové) nebrání přesnému určení složky impulsu ve zbývajících dvou směrech (tedy např. určení p_y, p_z). V terminologii vlnových klubek: můžeme vytvořit trojrozměrné vlnové klubko $|\psi(x,y,z)|^2$ "úzké" např. ve směru x a "široké" v y a z , jestliže odpovídající funkce (klubko) $|c(p_x, p_y, p_z)|^2$ bude "široká" ve směru x a "úzká" ve směrech y, z .

Heisenbergovy relace neurčitosti (58) se obvykle objasňují takto: o dynamických proměnných (jako jsou souřadnice, impuls a další) má podle úvah z odst. 2 smysl mluvit tehdy, jestliže máme postaven experiment k jejich určení. Analýzou reálných experimentů pro měření v mikrosvětě, dojdeme k závěru, že každé měření ovlivňuje stav měřené mikrosoustavy; toto narušení soustavy je důsledkem interakce měřicího zařízení s měřeným objektem a je principiálně neodstranitelné. Tak např. pokus o přesné

určení souřadnice vede k takové změně stavu (a tedy odpovídající vlnové funkce, neboť právě ona určuje stav), že v tomto novém stavu bude zcela neurčitý impuls. Jinak řečeno: zařízení, které má přesně určit souřadnici, musí převést soustavu do stavu s vlnovou funkcí ψ silně lokalizovanou v okolí výskytu částice; víme však, že takovou funkci lze vytvořit jen s velice "širokou" funkcí $c(p)$. Opačně, každý pokus o přesné určení impulsu převede soustavu do stavu, v němž je naprostá neurčitost v poloze částice. Chceme-li současně určit polohu i impuls částice, potom se tato dvě měření budou tak ovlivňovat, že neurčitosti (střední kvadratické chyby) obou veličin budou splňovat relace neurčitosti (58).

Smysl relací neurčitosti je však obecnější a hlubší. Pojmy, jako poloha, impuls, trajektorie částice apod. , byly zavedeny v Newtonově mechanice na základě zobecněných poznatků z makrosvěta. Jsou to abstrakce, které podle předpokladů klasické mechaniky, mohou být určeny libovolně přesně. Používáme-li je v oblasti mikrosvěta (v dimenzích o mnoho řádů menších), kde nebyly nikdy předtím experimentálně ověřovány, je to extrapolace, která nemusí být v souladu s realitou; skutečně také všechny existující experimenty potvrzují neoprávněnost této extrapolace. Můžeme tedy na relace neurčitosti pohlížet jako na podmínky určující hranici, za níž již principy (a tedy i termíny) klasické fyziky nejsou použitelné.

Může jistě vzniknout otázka, proč tedy vůbec v oblasti mikrosvěta používáme pojmy jako poloha (souřadnice) a impuls, jestliže zde vlastně ztrácí svůj smysl. Předně proto, že nemáme jinou možnost, než se vyjadřovat jazykem (pojmy) vybudovaným na základě našeho smyslového vnímání okolního makrosvěta. Za druhé proto, že při kvantově-mechanickém popisu chování částic je možné zavést matematické objekty \vec{r} , \vec{p} , které v mnoha ohledech odpovídají klasickým proměnným souřadnice a impuls, nejsou však s nimi identické. Relace neurčitosti nám pak říkají, že při pokusu interpretovat tyto kvantově-mechanické veličiny jako klasickou souřadnici a impuls, existuje principiální omezení na přesnost určení této "souřadnice" a "impulsu".

Shrňme tedy:

Relace neurčitosti nejsou výsledkem analýzy procesu měření, prováděné v klasických pojmech. Tyto relace odrážejí experimentálně zjištěné vlastnosti přírody. Reálné mikročástice se nechovají jako malé klasické částice; mají jiné vlastnosti a proto, nechceme-li dospět k chybným závěrům, musíme být i při provádění myšlenkových experimentů ostražití a respektovat experimentální fakta. Obtíž spočívá v tom, že naše zkušenosti z makrosvěta nám mohou být při úvahách o mikrosvětě špatným rádcem.

5.3) Časový vývoj vlnového klubka

V předcházejícím odstavci jsme vytvořili prostorově lokalizované klubko v čase $t=0$; nyní nás zajímá, jak toto vlnové klubko bude vypadat v nějakém obecném čase t . Klubko pro libovolný čas t vytvoříme superpozicí rovinných monochromatických vln (1)

$$\psi(\vec{r}; t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} c(\vec{p}) \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)\right] dp_x dp_y dp_z \quad (61)$$

Pro $t = 0$ nám (61) dává výraz (59) pro $\psi(\vec{r}; 0)$. Energie E v (61) je, pro volnou částicí s hmotností m , funkcí impulsu

$$E(\vec{p}) = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \quad (62)$$

a frekvence $\omega(\vec{p}) = E(\vec{p})/\hbar$.

Protože faktor $\exp(iEt/\hbar)$ má strukturu (60b), nemění nic na tvrzeních o redukci výrazu (59) na 3 jednorozměrné případy. Budeme proto opět uvažovat jen klubko

$$\psi(x; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar} (px - E(p)t)\right] dp \quad (63)$$

kde $E(p) = p^2/2m$ (index x u p_x vypouštíme).

Fázová rychlost vlny, příslušející stavu s impulsem p , je $(p=\hbar k)$ [5]

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} \quad (64)$$

a závisí tedy na p (protože $p = \hbar/\lambda$, závisí na vlnové délce, což je charakteristické pro disperzní prostředí). Z toho je bez počítání zřejmé, že klubko, které v čase $t=0$ bylo vytvořeno tak, aby bylo optimální (součin $\Delta x \cdot \Delta p$ byl minimální), v časech $t \neq 0$ takové nebude, neboť fázové posuny mezi jednotlivými složkami klubka se vlivem disperse s časem mění; říká se, že se vlnové klubko rozplývá.

Ověřme tuto skutečnost kvantitativně pro gaussové vlnové klubko (53)

$$\psi(x; t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/4} \sqrt{\hbar \Delta p}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(p-p_0)^2}{4(\Delta p)^2}} e^{\frac{i}{\hbar} (px - \frac{p^2}{2m} t)} dp \quad (65)$$

Stejně jako při výpočtu $\psi(x; 0)$, najdeme integrál v (65) úpravou na tvar (A.15); hustota pravděpodobnosti pak je

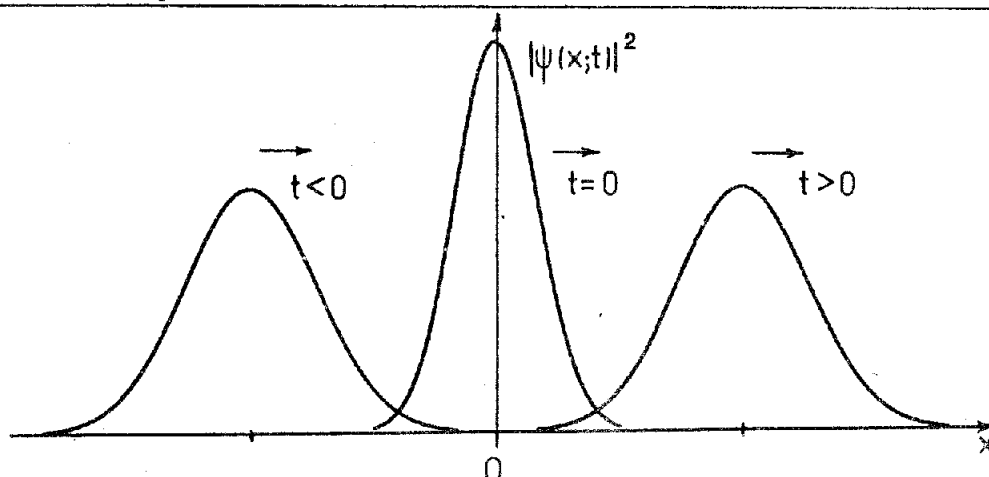
$$|\psi(x;t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta x_t} \exp \left\{ - \frac{(x - p_0 t/m)^2}{2(\Delta x_t)^2} \right\} \quad (66a)$$

kde

$$\Delta x_t = \Delta x_0 \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{2m(\Delta x_0)^2} \right)^2} = \sqrt{(\Delta x_0)^2 + \left(\frac{\Delta p}{m} t \right)^2} \quad (66b)$$

a $\Delta x_0 = \hbar / 2\Delta p$ je disperse (55) v čase $t = 0$.

Hustota pravděpodobnosti výskytu si tedy zachovává gaussovský tvar, její maximum v čase t však je v bodě $x_0 = p_0 t/m$ ($x_0 = \langle x \rangle$ v (50)) a disperse je Δx_t .



Obr. 20. Gaussovské vlnové klubko, optimální v $t=0$, ve třech časových okamžicích při postupu ve směru osy x . Z výrazu (66) je zřejmá symetrie vzhledem k $t=0$: tvar klubka bude stejný v časech $-t, t$.

Jestliže se maximum (těžiště klubka) posunulo za čas t o $(p_0 t/m)$, znamená to, že postupuje ve směru x s konstantní rychlostí

$$v_0 = \frac{p_0}{m}, \quad (67)$$

což je rychlost, s níž by se pohybovala klasická částice s hybností $p_0 = mv_0$, ale také tzv. grupová rychlost vlnového klubka ([5])

$$v_g = \left[\frac{d\omega(k)}{dk} \right]_{k=k_0} = \left[\frac{dE(p)}{dp} \right]_{p=p_0} = \frac{p_0}{m}, \quad (68)$$

udávající rychlost s níž postupuje těžiště klubka.

Rychlost rozplývání klubka je dána na čase závislou disperzí Δx_t . S výrazem (66b) lze spojit názornou klasickou představu:

nechť v čase $t=0$ je v intervalu velikosti Δx_0 , v okolí bodu $x=0$, skupina klasických částic, jejichž rychlosti leží v intervalu $\Delta v = \Delta p/m$ okolo hodnoty $v_0 = p_0/m$. Disperse v rychlostech vede k tomu, že částice, které se v čase $t=0$ nacházely v téže bodě, se v okamžiku t rovnoměrně rozdělí po intervalu $\Delta v t$; to má za následek, že původní koncentrace se nezachovává a rozměry oblasti v níž se soubor částic nachází, se zvětšují podle vztahu (66b).

Rozplývání vlnového klubka nemá vliv na normalizaci (norma nezávisí na čase). Rovněž střední hodnota impulsu $\langle p \rangle = p_0$ a jeho disperse Δp jsou na čase nezávislé; časovou závislost v (63) můžeme totiž připojit k $c(p)$ a zavést na čase závislé koeficienty

$$c(p; t) = c(p) e^{-iE(p)t/\hbar} \quad (69)$$

a psát

$$\psi(x; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p; t) e^{ipx/\hbar} \quad (70)$$

Pravděpodobnost, že v čase t bude naměřen impuls v intervalu $(p, p+dp)$ je pak dána

$$|c(p; t)|^2 dp \quad (71)$$

Z (69) je však zřejmé, že tento výraz nezávisí na čase, neboť

$$|c(p; t)|^2 = |c(p; 0)|^2 = |c(p)|^2 \quad (72)$$

Tato skutečnost ovšem nevyjadřuje nic jiného, než zachování impulsu u volné částice.

5.4) Příklady použití relací neurčitosti

Na několika příkladech si ukážeme, jak lze relace neurčitosti použít nejen k odhadu některých veličin, ale i k pochopení např. stability atomu.

(a) Odhad neurčitostí pro makrosvět

Mějme prachovou částici (viz též (6)) jejíž průměr je $1\mu\text{m}$, hmotnost $m \approx 10^{-15} \text{ kg}$ a rychlost $v = 10^{-3} \text{ m/s}$. Její hybnost je

$$p = mv \approx 10^{-18} \text{ Js/m} \quad (73)$$

Určíme-li její polohu s chybou $0,01 \mu\text{m}$, potom neurčitost ve stanovení hybnosti bude (bereme $\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar$)

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{\Delta x} \approx \frac{10^{-34}}{10^{-8}} \approx 10^{-26} \text{ J.s / m} \quad (74)$$

Relace neurčitosti tudíž nepředstavují žádné omezení, neboť měření hybnosti je prakticky nemožné s relativní přesností 10^{-8} . Relace neurčitosti

tudíž nepovedou k žádným rozporům s našimi empiricky získanými poznatky o makrosvětě, i když jsou v rozporu s některými závěry klasických teorií, které byly na základě těchto poznatků vybudovány.

(b) Relace neurčitosti v mikrosvětě

Uvažujme elektron v atomu vodíku. Bohrova teorie ho popisovala jako klasickou částici, pohybující se po kruhových orbitách, jejichž poloměry R vyhovují podmínce (I.9)

$$p R = n \hbar \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (75)$$

Aby však bylo možné použít klasické představy, musely by neurčitosti poloměru ΔR a hybnosti Δp být malé ve srovnání s R , resp. p , tj. muselo by platit

$$\Delta R \ll R, \quad \Delta p \ll p \quad (76a)$$

neboli

$$\frac{\Delta R}{R} \cdot \frac{\Delta p}{p} \ll 1 \quad (76b)$$

Podle relací neurčitosti však musí platit

$$\frac{\Delta R}{R} \cdot \frac{\Delta p}{p} \geq \frac{\hbar}{R \cdot p} \quad (77a)$$

Dosadíme-li na pravou stranu za $R \cdot p$ z (75), dostaneme, že musí platit

$$\frac{\Delta R}{R} \cdot \frac{\Delta p}{p} \geq \frac{1}{n} \quad (77b)$$

Porovnáním s (76b) vidíme, že klasické představy by byly použitelné pouze pro $n \gg 1$, tj. pro orbity s velkými poloměry. Při této příležitosti je možné připomenout také princip korespondence (odst.I.2.3), který také vyžadoval, aby pro $n \rightarrow \infty$ výsledky splývaly se závěry klasických teorií.

(c) Velikost a stabilita atomu

Pokračujme v úvaze o vodíkovém atomu, tj. o elektronu s nábojem $-e$ v poli protonu s nábojem $+e$. Potenciální energie elektronu ve vzdálenosti r od protonu je

$$V(r) = - \frac{q^2}{r} \quad (78a)$$

kde

$$q = e / \sqrt{4\pi\epsilon_0} \quad (78b)$$

Nechť stav elektronu je dán sféricky symetrickou vlnovou funkcí, jejíž amplituda je velká v oblasti s lineárním rozměrem r_0 (tzn., že pravděpodobnost nalézt elektron ve vzdálenosti např. $3r_0$ od protonu je zanedbatelná). Potenciální energie elektronu v tomto stavu je řádově rovna

$$V_0 \approx - \frac{q^2}{r_0} \quad (79)$$

Musíme ovšem vzít v úvahu i kinetickou energii. Je-li elektron v oblasti

s lineárním rozměrem r_0 , bude neurčitost v jeho hybnosti přinejmenším řádu \hbar/r_0 . Jinými slovy, i když střední hodnota hybnosti $\langle \vec{p} \rangle$ je rovna nule, kinetická energie T bude v uvažovaném stavu nenulová a větší nebo rovna

$$T_0 = \frac{(\Delta p)^2}{2m} \doteq \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \quad (80)$$

Zmenšujeme-li r_0 , klesá V_0 (znaménko -!), avšak roste T_0 . Nejnižší celková energie, kompatibilní s relacemi neurčitosti, bude určena minimem funkce

$$E = T_0 + V_0 = \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} - \frac{q^2}{r_0} \quad (81)$$

Z podmínky $(\partial E / \partial r_0) = 0$ dostaneme minimum pro

$$r_0 = a_0 = \frac{\hbar^2}{mq^2} \quad (82)$$

Tomu odpovídá energie

$$E_0 = - \frac{mq^4}{2\hbar^2} \quad (83)$$

Skutečnost, že r_0 je právě poloměr 1. Bohrovovy orbity (I.18) a E_0 energie základního stavu (I.19), je nutné považovat za náhodu, neboť jsme prováděli pouze řádový odhad. Poučení, vyplývající z provedeného odhadu, je v tom, že základní stav atomu je výsledkem kompromisu mezi kinetickou a potenciální energií: čím menší je oblast v níž je lokalizován elektron, tím menší je jeho potenciální energie a větší energie kinetická.

Uvědomme si, že tento kompromis, který je důsledkem relací neurčitosti, se diametrálně liší od závěrů klasické mechaniky. Jestliže by se elektron pohyboval po klasické orbitě s poloměrem r_0 , jeho potenciální energie by byla

$$V_{kl} = - \frac{q^2}{r_0}$$

Odpovídající kinetickou energii dostaneme z podmínky rovnosti přitažlivé coulombovské síly a síly odstředivé:

$$\frac{q^2}{r_0^2} = \frac{mv^2}{r_0} \quad \text{což dá} \quad T_{kl} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2} \frac{q^2}{r_0}$$

Celková energie by pak byla

$$E_{kl} = T_{kl} + V_{kl} = - \frac{1}{2} \frac{q^2}{r_0^2}$$

takže minimum bychom dostali pro $r_0 \rightarrow 0$.

(d) Odhad velikosti jaderných sil

Uvažujme nukleon s hmotností $M \approx 10^{-27}$ kg v jádře, které si představíme jako kouli s poloměrem $r_0 \approx 10^{-15}$ m. Z relací neurčitosti plyne, že impuls nukleonu je řádově $p \approx \hbar / r_0$, takže jeho kinetická energie

$$T \approx \frac{1}{2M} \frac{\hbar^2}{r_0^2} \approx 10^{-11} \text{ J} \approx 30 \text{ MeV}$$

Protože nukleon je v jádře vázán, musí být střední hodnota jeho potenciální energie záporná a v absolutní hodnotě větší než energie kinetická. Provedený odhad je velice hrubý, dává však uspokojivý řádový odhad velikosti jaderných sil.

(e) Stopy ve Wilsonově mlžné komoře

Na první pohled se může zdát, že relace neurčitosti jsou v rozporu se skutečností, že "dráhy" částic můžeme pozorovat ve Wilsonově mlžné komoře, nebo ve fotografické emulsi. Rozpor je to však jen zdánlivý. Dráhu elektronu v mlžné komoře vyznačují kapičky kapaliny kondenzované na iontech, které elektron na své cestě vytvořil. Rozměr kapiček určuje přesnost stanovení polohy elektronu; protože rozměr kapek je $\approx 10^{-6}$ m, je neurčitost v poloze elektronu téhož řádu. Neurčitost v odpovídající složce hybnosti (řekněme x-ové) $\Delta p_x \approx \hbar / \Delta x \approx 10^{-28}$ kg.m/s. Protože hmotnost elektronu je $\approx 10^{-30}$ kg, bude neurčitost složky rychlosti kolmé ke stopě elektronu $\Delta v_x = \Delta p_x / m \approx 100 \text{ m/s}$. Stopy ve Wilsonově komoře však zanechávají jen elektrony s dostatečně velkou kinetickou energií, odpovídající rychlosti $v \gg 10^7 \text{ m/s}$. Pak ovšem je $\Delta v_x \ll v$ a můžeme proto s dobrou aproximací mluvit o dráze elektronu v mlžné komoře.

5.5) Relace neurčitosti pro energii a čas

Zatím jsme se zajímali o tvar vlnového klubka (přesněji: o rozložení hustoty pravděpodobnosti) v celém prostoru v daném časovém okamžiku. Je však možná i druhá situace, blízká mnoha reálným experimentům: pozorovatel je v určitém místě prostoru a kolem něho prochází vlna (- částice), kterou pozorovatel registruje jako amplitudu (nebo častěji kvadrát modulu amplitudy) $f(t)$ nějakého fyzikálního procesu. Např. $f(t)$ může být amplitudou elektromagnetické vlny; byla-li emitována atomem, bude blízká kvazimonochromatické vlně podle obr.12. Takovou vlnu lze vytvořit superpozicí monochromatických vln s různými frekvencemi [5].

Platí

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (84a)$$

kde

$$g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt \quad (84b)$$

Z matematického hlediska jde o známý Fourierův rozklad (Fourierovu analýzu) funkce $f(t)$ na harmonické složky (dod.D).

Nemusíme se již podrobně těmito klubky zabývat, neboť základní výsledky o něž nám jde, máme již vlastně odvozeny. Stačí si jen uvědomit, že u de Broglieho vln je svázána frekvence s energií částice vztahem (2b) - $E = \hbar\omega$ - takže vztahy (84) přejdou v

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} g(E) \cdot \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right) dE \quad (85a)$$

$$g(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cdot \exp\left(i \frac{E}{\hbar} t\right) dt \quad (85b)$$

Na $f(t)$ je možné pohlížet jako na funkci $\psi(x;t)$ vyjádřenou vztahem (63), v němž je x pevné. Protože z matematického hlediska vystupuje v (63) dvojice (p,x) v naprosto stejném postavení jako dvojice (E,t) , dojdeme pro veličiny E, t ke stejným závěrům, jako pro p, x . Tak dostaneme, že pro vlnová klubka (85) platí

$$\Delta E \cdot \Delta t \gtrsim \hbar \quad (86)$$

Tato relace (kterou z důvodů jež budou snad zřejmé z následující diskuse neuvádíme ve tvaru (58), ale pouze s $\gtrsim \hbar$) se zpravidla nazývá též Heisenbergova relace neurčitosti. Její interpretace však není tak snadná, jako např. u dvojice souřadnice-impuls. Důvod je v tom, že zatímco souřadnice i impuls jsou dynamické proměnné určující stav soustavy, v relaci (86) má takovéto postavení jen energie E ; čas t není dynamická proměnná, ale pouze parametr. Měření času samo o sobě nedává žádnou informaci o fyzikálním systému, pouze údaje o ostatních fyzikálních veličinách obvykle v sobě implicitně obsahují fakt, že jsou stanoveny pro určitý časový okamžik. Jednoduše: částice má hybnost \vec{p} , souřadnici x , energii E , ale nemá čas t . Jsou ovšem i veličiny, které se zachovávají, jako je třeba celková energie izolované soustavy, jejíž hodnota nezávisí na čase. Několik možných použití relace (86) si uvedeme v následujících příkladech.

(a) Doba průchodu vlnového klubka

Uvažujme volnou částici ve stavu s vlnovou funkcí vyjádřenou vlnovým klubkem, s disperzí Δx a grupovou rychlostí v_g , která postupuje podél osy x . Okamžik průchodu klubka daným bodem x nemůže být určen přesně: neurčitost ve stanovení okamžiku průchodu bude řádu $\Delta t \approx \Delta x / v_g$. Vlnovému klubku odpovídá však také neurčitost v impulsu částice Δp a s tím spojená neurčitost v energii částice

$$\Delta E \approx \frac{\partial E}{\partial p} \cdot \Delta p = v_g \cdot \Delta p$$

Potom však

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx \Delta x \cdot \Delta p$$

a s využitím relace $\Delta x \cdot \Delta p \gg \hbar$ dostáváme nerovnost (86), která dává odhad spodní hranice velikosti součinu šířky energiového spektra částice ΔE neurčitosti Δt v určení doby průchodu částice nějakým bodem na ose x .

(b) Přechody mezi stavy s různou energií

Vlnová funkce, která má tvar

$$\psi(\vec{r}; t) = \varphi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar} \quad (87)$$

kde $\varphi(\vec{r})$ je funkce závislá jen souřadnicích, přísluší stavu částice s přesně určenou energií E ; tento stav je stacionární, neboť hustota pravděpodobnosti výskytu částice

$$P(\vec{r}) = |\varphi(\vec{r})|^2 \quad (88)$$

nezávisí na čase.

Mějme nyní částici ve stavu, který se dá vyjádřit jako superpozice dvou stacionárních stavů s energiemi E_1, E_2 . Vlnová funkce pro takový stav je

$$\psi(\vec{r}; t) = \varphi_1(\vec{r}) \exp\left(-i \frac{E_1}{\hbar} t\right) + \varphi_2(\vec{r}) \exp\left(-i \frac{E_2}{\hbar} t\right) \quad (89)$$

Hustota pravděpodobnosti výskytu

$$P(\vec{r}; t) = |\varphi_1(\vec{r})|^2 + |\varphi_2(\vec{r})|^2 + 2 \operatorname{Re} \left[\varphi_1^*(\vec{r}) \varphi_2(\vec{r}) e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \right] \quad (90)$$

v tomto případě osciluje mezi dvěma krajními hodnotami

$$(|\varphi_1| - |\varphi_2|)^2, \quad (|\varphi_1| + |\varphi_2|)^2$$

s periodou

$$\tau = \frac{\hbar}{|E_1 - E_2|} \quad (91)$$

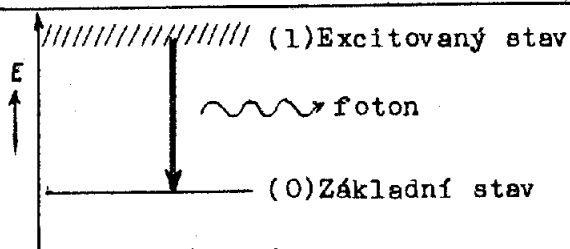
Čas τ charakterizuje evoluci fyzikálních vlastností soustavy; výsledky měření, provedených na soustavě ve dvou různých časech t_1, t_2 budou prakticky stejné, jestliže $\Delta t = |t_1 - t_2|$ bude malé ve srovnání s τ .

Jinými slovy: aby se vlastnosti soustavy za čas Δt výrazně změnily, musí pro součin Δt a neurčitost v energii $\Delta E = |E_1 - E_2|$ platit opět (86). K tomuto závěru je možné dojít i tehdy, když je vlnová funkce superpozicí libovolného počtu stacionárních stavů.

(c) Doba života excitovaných stavů a přirozená šířka energiových hladin

Energie soustavy, která je ve stacionárním stavu, může být určena s libovolnou přesností, neboť doba měření může být libovolná; uvědomme si, že k tomu, abychom bezpečně rozlišili přesně monochromatickou vlnu (příslušející stavu s přesně určenou energií) od kvazimonochromatické, museli bychom provádět měření nekonečně dlouho (od $t = -\infty$ do $t = +\infty$). Má-li být energie stanovena s neurčitostí ΔE , musí měření trvat alespoň $\Delta t \approx \hbar / \Delta E$.

Excitované stavy kvantové soustavy mají konečnou dobu života, během níž soustava přejde do základního stavu. Jestliže např. atom přechází z excitovaného stavu 1 do základního stavu 0 (obr. 21), není energie hladiny 1 přesně určena, neboť atom se v tomto stavu nachází jen konečnou dobu. Typická doba života atomových excitovaných stavů je $\tau \approx 10^{-9}$ s.



Obr. 21.

Neurčitost v energii excitovaného stavu, tzv. přirozená šířka energiové hladiny, je

$$\Delta E \approx \frac{\hbar}{\tau} \approx 10^{-25} \text{ J} = 6 \cdot 10^{-7} \text{ eV} \quad (92a)$$

Skutečnost, že energie excitovaných stavů není přesně určena, se

zřetelně projevuje např. v emisní i absorpční spektroskopii jako tzv. přirozená šířka spektrálních čar (mechanismů, které mohou vést k rozšíření spektrálních čar je ovšem celá řada a výsledek jejich působení může zcela překrýt přirozenou šířku čáry). Budeme-li fotografovat spektrální čáru spektrometrem s extrémně vysokou rozlišovací schopností, zjistíme, že má konečnou šířku. Frekvence emitovaného nebo absorbovaného světla není přesně nějaké ω_0 , ale zaznameneáme i frekvence v okolí ω_0 , přičemž

$$\Delta \omega \approx \Delta E / \hbar \approx 1/\tau \quad (92b)$$

kde ΔE je dáno (92a) a τ je doba života excitovaného stavu. Věříme-li v zákon zachování energie a existenci fotonu (a zatím nemáme žádný důvod nevěřit), potom z toho nutně musíme vyvodit závěr, že energiové hladiny excitovaných stavů mají konečnou šířku, nepřímou úměrnou době života těchto stavů.