

II. VLNOVÁ FUNKCE

1. Úvodem k nové kvantové teorii

Základy nové kvantové teorie, tj. dnešní kvantové mechaniky, byly položeny v období 1923-1927. V r.1925, takřka současně, byly uveřejněny dvě její formulace: Heisenbergova maticová mechanika a Schrödingerova vlnová mechanika.

Heisenbergova maticová mechanika (rozpracovaná především Bornem a Jordanem) operuje pouze s experimentálně zjistitelnými veličinami, jako jsou frekvence a intenzita záření emitovaného atomu; nevyskytují se v ní proto např. takové pojmy, jako je elektronová orbita. Protože měřitelným veličinám přiřazuje určité matice, je jejím matematickým aparátem maticový počet.

E.Schrödinger vyšel při formulaci své vlnové mechaniky z hypotézy L. de Broglieho, podle níž je korpuskulárně-vlnový dualismus fundamentálním rysem mikrosvěta. Výchozí ideou zde tedy byla vlna "spojená" s částicí; k ní adekvátním matematickým aparátem jsou parciální diferenciální rovnice.

Na první pohled se zdálo, že jde o dvě naprosto odlišné teorie. Již roku 1926 však Schrödinger dokázal, že jsou to jen dvě různé formulace (reprezentace) jediné teorie. Rozpracování zcela obecného formalismu této teorie bylo provedeno brzy poté P.A.M.Diracem. Tak vznikla nerekativistická kvantová mechanika mikročástic; po doplnění kvantovou teorií elektromagnetického pole (Dirac 1927, Jordan a Pauli 1928), představovala jedinou, logicky uzavřenou teorii, která umožňovala řešit, v nerekativistickém přiblížení, všechny problémy týkající se soustav mikročástic a jejich interakce s elektromagnetickým polem.

Obecný formalismus, vycházející z axiomatického základu, představuje bezesporu nejelegantnější a logicky nejuspokojivější způsob výkladu kvantové mechaniky. Pro naprosté začátečníky je v něm však skryto nebezpečí, že za abstraktním matematickým aparátem se začne vytrácet fyzikální podstata studovaných jevů. Odložíme proto úvod k tomuto přístupu až do kap.IV a do té doby se přidržíme historického Schrödingerova vlnového formalismu: v kap.II zavedeme základní pojmy a v kap.III je budeme aplikovat na řešení několika jednoduchých jednorozměrných úloh. Ostatně, Schrödingerova vlnová rovnice (Schrödingerova reprezentace kvantové mechaniky) je stále výchozím bodem pro řešení většiny konkrétních (jmenovitě chemických) kvantověmechanických úloh.

2. Částice a vlny

2.1) De Broglieho hypotéza

Na základě rozboru analogií mezi matematickým aparátem analytické mechaniky a vlnové optiky, dospěl v r. 1923, jedenatřicetiletý francouzský fyzik Louis de Broglie k přesvědčení, že korpuskulárně-vlnový dualismus by se neměl týkat jen světla, ale měl by být univerzálním projevem všech mikročástic (tehdy jmenovitě elektronů). Realizace této myšlenky ovšem vyžadovala nalezení vztahu mezi veličinami charakterizujícími částici i její pohybový stav (hmotnost, hybnost, energie) a charakteristikami přidruženého vlnění (především vlnová délka).

De Broglieho úvahy se týkaly pouze vlnných částic, tj. částic na něž nepůsobí vnější síly. Pro ně dospěl k závěru, že s každou částicí s klidovou hmotností m , hybností \vec{p} a energií E , má být spojena monochromatická rovinná vlna

$$\psi(\vec{r}; t) = C \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)] \quad (1)$$

kde C je konstanta (amplituda), \vec{k} je vlnový vektor ($|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$) a ω je frekvence, přičemž platí

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (2a)$$

a

$$E = \hbar \omega \quad (2b)$$

Vztahy (2) platí i pro fotony.

Pro vlnovou délku λ (tzv. de Broglieho vlnová délka) dostaneme z (2a)

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h \sqrt{1 - (v/c)^2}}{m v} \quad (3)$$

což v nerelativistickém přiblížení (pro částice s klidovou hmotností m a rychlostí $v \ll c$) dá

$$\lambda = \frac{h}{m v} \quad (4)$$

Pro elektrony s kinetickou energií T (v eV) je možné, po dosazení za m a h , upravit (4) na praktický tvar

$$\lambda = \sqrt{\frac{1,504}{T}} \quad [\text{nm}, \text{eV}] \quad (5)$$

2.2) Experimentální potvrzení vlnových projevů elektronu

Když de Broglie formuloval svoji hypotézu, neexistoval žádný experiment, prokazující vlnový charakter částic. Nemožnost pozorovat vlnové projevy částic v makrosvětě, vyplývá z odhadu velikosti λ podle (4): vezměme např. částici, kterou pozorujeme při sledování Brownova pohybu; její průměr může být $1\mu\text{m}$, hmotnost $m \approx 10^{-12}\text{g}$ a střední kinetická energie v rovnovážném stavu při teplotě T je $(3/2)\kappa T$ (κ je Boltzmannova konstanta). Potom

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3m\kappa T}} \approx 5 \cdot 10^{-7} \text{ nm} , \quad (6)$$

tedy veličina asi o 10 řádů menší než průměr částice. Nyní si připomeňme, že geometrická optika, pracující s trajektoriemi světelných paprsků, je použitelná, dokud zakřivení drah je malé ve srovnání s vlnovou délkou světla. Jakmile libovolné překážky (např. okraj stínítka) nebo nehomogenity prostředí (indexu lomu) vedou ke změně dráhy s poloměrem křivosti srovnatelným s vlnovou délkou, začne se výrazně uplatňovat vlnový charakter světla a zákony geometrické optiky přestanou platit. Obdobnou situaci můžeme čekat i u de Broglieho vln: klasická Newtonova mechanika, pracující s trajektoriemi částic, bude přitom analogií geometrické optiky pro světlo. Vlnová povaha částic se tedy může začít projevovat až v atomových dimenzích. Tak vzorec (6) nám při pokojové teplotě dá pro atom helia $\lambda \approx 0,09\text{nm}$, pro neutron $\lambda \approx 0,18 \text{ nm}$ a pro elektron $\lambda \approx 7,7 \text{ nm}$.

K experimentálnímu důkazu vlnové povahy částic bylo nutné s nimi realizovat pokusy, jejichž výsledky dokážeme snadno interpretovat jen na základě vlnové představy; typickým představitelem takových pokusů je difrakce vlnění. Z vlnové optiky víme, že k provedení difrakčního pokusu potřebujeme systém rozptylových center, periodicky rozmístěných v prostoru s krokem srovnatelným s vlnovou délkou použitého vlnění. Pro viditelné světlo, s $\lambda \approx 500\text{nm}$, dokážeme takový systém - mřížku - vyrýt např. do skla. Je-li však vlnová délka srovnatelná s rozměry atomů, např. u rentgenového záření, tato možnost mizí a je třeba hledat soustavy rozptylových center - mřížky - vytvořené přírodou na atomové úrovni. Tato skutečnost přivedla v r.1912 Maxe von Laueho k myšlence, použít za difrakční mřížku pro rentgenové záření krystalovou mříž.

Protože záporně nabitě elektrony interagují s náboji v atomu, mohou atomy sloužit jako rozptylová centra pro elektrony a krystalová mříž by tudíž měla zastat roli difrakční mřížky i pro elektrony. Difrakce elektronů na krystalové mřížce niklu byla uskutečněna v r.1927 C.J.Davissonem a L.H.Germerem. Elektrony, které používali, měly energii kolem 100eV , takže jejich de Broglieho vlnová délka byla řádově shodná s mřížkovou konstantou Ni.

Prakticky ve stejné době (1928), provedl G.P.Thomson pokusy s elektrony urychlenými napětím desítky keV (vlnová délka je značně menší než

mřížková konstanta; k přesnému výpočtu λ je již nutné užít vztah (3), které nechal procházet tenkou folií (tloušťka asi 100nm) polykrystalického materiálu; šlo tedy o obdobu Debyeovy-Scherrerovy metody, vypracované r.1916 pro difrakci rentgenového záření.

Uvedené pokusy jednoznačně potvrdily de Broglieho hypotézu pro elektrony. V následujících letech pak byla postupně znovu a znovu potvrzována pro ostatní objekty v mikrosvětě - elementární částice, atomy, ionty, molekuly. Při této příležitosti je vhodné si uvědomit roli historického vývoje v utváření našich názorů na povahu mikročástic. Vlnové vlastnosti fotonu byly objeveny dříve než jeho korpuskulární vlastnosti. U elektronů tomu bylo naopak; všechny pokusy, které s nimi byly konány až do r.1927, neodporovaly představě, že elektron je částice, jejíž pohyb lze popisovat Newtonovými pohybovými rovnicemi. To vedlo k hluboce zakotvené představě o elektronu (a ostatních elementárních částicích též) jakožto jakési kulečnickové kouli extrapolované do velmi malých rozměrů. Obdobně se během XIX.století, podporována řadou sugestivních experimentů, zformovala představa o vlnové povaze světla. Mnoho potíží při studiu fyziky mikrosvěta proto vzniká, především v počátečních fázích, z neschopnosti zbavit se tohoto jednostranného pohledu na mikroobjekty.

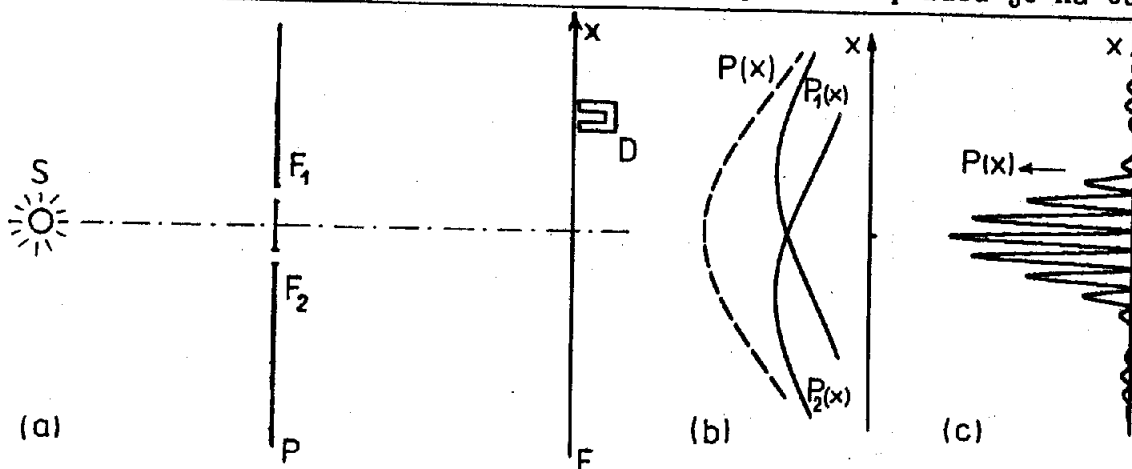
2.3) Částice nebo vlny ?

V předcházejícím výkladu jsme používali vžitý obrat "vlna spojená s částicí". Tento historicky podmíněný výraz nelze považovat za vhodný, neboť vytváří dojem, že jde o klasickou částici, která je doprovázena vlnou a tyto dva objekty jsou spolu nějakým způsobem vázány. Ve skutečnosti jde však o jediný objekt, který se v některých situacích (experimentech) chová jako vlna a v jiných jako klasická částice (zmíněná kulečnicková koule extrapolovaná do atomových rozměrů). Otázka: "Je elektron vlna nebo částice?" nemá prostě smysl.

Skutečností je, že mnoho nedorozumění a zdánlivých paradoxů vyplývá z nutnosti popisovat novou realitu, nepřístupnou přímo našemu smyslovému vnímání, pomocí pojmů zavedených při studiu makrosvěta. To vede k používání jakési dvojnásobné řeči, kdy střídavě používáme různé klasické pojmy, které by vedly nutně k rozporům, kdyby byly užity současně (např. vlna a částice). Mluví se o drahách elektronů, o hmotných vlnách a hustotě náboje apod; užívání takových klasických pojmů v oblasti mikrosvěta je však daleká extrapolace a nemělo by proto být překvapením, když se ukáže být neoprávněnou. Situace je však, vyjádřeno slovy N.Bohra, taková, že: "I když jevy překračují libovolně daleko možnost klasického objasnění, všechno jejich zkoumání musí být vedeno pomocí klasických pojmů".

Specifické chování mikročástic lze demonstrovat na klasickém Youngově pokusu s difrakcí na dvou štěrbinách. I když pokus, o němž bude řeč, nebyl v tak jednoduché podobě realizován, představuje podstatu mnoha technicky složitějších (a tím i méně přehledných) pokusů. Pro určitost

Jej budeme "provádět" s elektrony, naprosto stejně by však probíhal se všemi mikročásticemi, včetně fotonů. Schema uspořádání pokusu je na obr.8.



Obr. 8. (a) Schema uspořádání pro difrakci na dvou štěrbinách; rozměry štěrbin F_1, F_2 jsou menší než vlnová délka λ , jejich vzdálenost je srovnatelná s λ . (b) Výsledek pokusu při postupně otevřené štěrbině F_1 (zavřené F_2) a F_2 (zavřené F_1). (c) výsledek pokusu při obou štěrbinách otevřených.

Ze zdroje S vylétují monoenergetické (všechny se stejnou energií) elektrony a některé z nich dojdou přes překážku P se štěrbinami F_1, F_2 až do místa registrace, kde jsou registrovány detektorem D; v rovině E může být fotografická deska, pohybovat se ve směru Ox Geigerův-Millerův počítač (pro fotony fotonásobič) apod. Cílem experimentu je zjistit, po dopadu velkého počtu elektronů do roviny E, rozložení $P(x)$ počtu elektronů podél osy x v rovině E.

Uvažme nejdříve, jaký by měl být výsledek pokusu, tj. $P(x)$, jestliže by se elektrony chovaly jako klasické částice. V tomto případě by trajektorie elektronu procházela buď štěrbinou F_1 nebo F_2 a místo dopadu na E by zřejmě nezáviselo na tom, zda byla druhá ze štěrbin otevřená nebo zakrytá. Výsledná funkce $P(x)$ by měla být

$$P(x) = P_1(x) + P_2(x) \quad (7)$$

kde $P_1(x)$ ($P_2(x)$) značí rozdělení získané při otevřené štěrbině F_1 (F_2) a zakryté štěrbině F_2 (F_1).

Experiment však ukazuje, že při současném otevření obou štěrbin

$$P(x) \neq P_1(x) + P_2(x) \quad , \quad (8)$$

ale získá se funkce $P(x)$ schematicky znázorněná na obr.8c, což je známé rozdělení intenzity vlnění při difrakci na dvou štěrbinách [5].

Abychom udrželi částicovou představu, mohli bychom hledat vysvětlení (8) ve vzájemném ovlivňování elektronů, prošlých různými štěrbinami. Experiment v němž snížíme emisi elektronů z S natolik, že v prostoru mezi P a E bude průměrně vždy jen jeden elektron, nám však dá (za přiměřeně prodlouženou dobu) opět rozdělení podle obr. 8c. Vznik tohoto rozdělení dokážeme jednoduše vysvětlit jen na základě vlnové představy. Naproti tomu, při všech zmíněných pokusech, bude dostatečně citlivý detektor (s potřebnou rozlišovací schopností) registrovat pulsy oddělené časovými intervaly, svědčící o dopadu diskretních částic; přitom vždy registruje "celou částici", tzn. buď na něj elektron dopadne celý (náboj, hmotnost) nebo se neregistruje nic. Naprosto stejná situace nastane u světla dopadajícího na fotonásobič. Proces registrace tedy dokážeme snadno pochopit na základě korpuskulární představy. K objasnění celého experimentu tedy potřebujeme současně vlnovou i korpuskulární představu o mikročásticích emitovaných zdrojem S.

Vraťme se k interpretaci funkce $P(x)$, kterou jsme získali jako výslednici registrace velkého počtu částic v rovině E. Z hlediska jedné částice ji můžeme interpretovat jen jako pravděpodobnost, že tato částice, po emisi z S a průchodu štěrbinami, bude zaregistrována v místě se souřadnicí x . Obdobně $P_1(x)$ ($P_2(x)$) udává pravděpodobnost, že částice, po průchodu štěrbinou F_1 (F_2), při zakryté štěrbině F_2 (F_1), bude zaznamenána v bodě se souřadnicí x . Z rozboru difrakce vlnění víme, že funkce $P(x)$, $P_1(x)$, $P_2(x)$ udávají rozložení intenzity vlnění v rovině E; intenzita vlnění je však úměrná kvadrátu absolutní hodnoty amplitudy vlnění (amplituda může být komplexní). To nás vede k zavedení amplitud pravděpodobnosti $\varphi(x)$, $\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$ pro něž platí

$$P(x) = |\varphi(x)|^2, \quad P_1(x) = |\varphi_1(x)|^2, \quad P_2(x) = |\varphi_2(x)|^2 \quad (9)$$

Při obou štěrbinách otevřených pak musíme skládat amplitudy (nikoliv intenzity jako v (7)), takže

$$\varphi(x) = \varphi_1(x) + \varphi_2(x) \quad \text{a} \quad P(x) = |\varphi_1(x) + \varphi_2(x)|^2 \quad (10)$$

Můžeme tedy shrnout: elektrony (částice) jsou registrovány v diskretních, vždy stejných, porcích, podobně jako klasické částice, avšak pravděpodobnost dopadu elektronu (částice) na detektor v daném místě je dána funkcí určující intenzitu vlnění. V tomto smyslu je tedy nutné chápat korpuskulárně-vlnový dualismus.

Vraťme se ještě k experimentu z obr. 8a a modifikujme ho tak, abychom mohli rozhodnout, kterou štěrbinou elektron prošel. Realizovat to můžeme tak, že za stínítko se štěrbinami umístíme zdroj světla a budeme sledovat u které štěrbině dojde k rozptylu světla (fotonu), tj. budeme za štěrbinami sledovat Comptonův jev [6], [8]. Jiná možnost je, dát detektor za jednu ze štěrbin; elektrony které zde nebyly registrovány prošly zřejmě

druhou šterbinou a dopadly na E, zatímco zbývající byly absorbovány v detektoru u šterbiny. Tato alternativa je zřejmě ekvivalentní zakrytí jedné ze šterbin, takže výsledek pokusu již známe: $P_1(x)$ nebo $P_2(x)$. Dáme-li detektor napřed k jedné a potom k druhé šterbině, bude nakonec v místě E rozložení $P(x) = P_1(x) + P_2(x)$. Avšak i v provedení s Comptonovým jevem, kdy jsou otevřeny obě šterbiny a každý z prošlých elektronů u jedné z nich interagoval s fotonem, dá výsledek $P(x) = P_1(x) + P_2(x)$. Experiment tedy potvrzuje výsledek, který jsme odvodili z předpokladu, že známe trajektorie elektronů. Jinými slovy: experiment, který je uspořádán tak, aby prokázal korpuskulární vlastnosti mikročástic (existenci klasické trajektorie) dá očekávaný výsledek (7).

Odstraníme-li však zařízení, které má rozhodnout kterou šterbinou elektron prošel, potom dostaneme rozložení $P(x) = |\varphi_1(x) + \varphi_2(x)|^2$, odpovídající rozložení intenzity při difrakci na dvojšterbině.

Uspořádáme-li tedy pokus tak, aby prokázal vlnovou povahu částic (typickým představitelem jsou všechny difrakční experimenty), potom získáme výsledek očekávaný na základě vlnové představy o částicích.

V uvedených závěrech není nic paradoxního, uvědomíme-li si, že jde o dva různé experimenty; vliv měřicího zařízení pro určení, kterou šterbinou elektron prošel, není zanedbatelný, ale naopak, mění zásadním způsobem funkci $P(x)$. Jak tedy máme nerozporně uvažovat a vyjedřovat se o dějích v mikrosvětě ? O trajektorii částice (o průchodu šterbinou F_1 nebo F_2) můžeme uvažovat a mluvit pouze tehdy, jestliže jde o experiment, který je schopen rozlišit (je postaven tak aby rozlišil) průchod šterbinou F_1 a F_2 . O trajektorii částice (o průchodu šterbinou) však nesmíme uvažovat při rozboru experimentů, které jsou postaveny tak, že nedovolují rozhodnout, kterou šterbinou elektron prošel. Jedině tak nebudete docházet k rozporům a chybným závěrům.

3. Interpretace vlnové funkce

Vlnové projevy částic i univerzální platnost de Broglieho vztahu $\lambda = h/p$, jsou přesvědčivě experimentálně prokázány. S každou částicí je tedy třeba "spojovat" nějakou vlnu, jejímž matematickým vyjádřením je vlnová funkce

$$\psi(x, y, z; t) \quad (\psi(\vec{r}, t)),$$

závislá na prostorových souřadnicích x, y, z ($\vec{r} = (x, y, z)$) a čase t . Pro vlnou částicí je to rovinná vlna, jejíž analytické vyjádření je dáno (1); jak se získá $\psi(\vec{r}, t)$ pro částice v silových polích, uvidíme v kap. III.

Před námi však nyní stojí otázka, jak fyzikálně interpretovat vlnovou funkci. Tento problém byl žhavý především v počátcích kvantové

mechaniky. Tak např. de Broglie zprvu předpokládal, že jde o vlnu-pilota, která unáší částici, podobně jako vlna na vodě unáší plovoucí těleso. Velice přirozenou se zdála být Schrödingerova interpretace, podle níž kvadrát modulu vlnové funkce - $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ - měl charakterizovat hustotu hmoty; hmota a náboj nebyly v tomto pojetí zkoncentrovány do bodu, ale "rozmazány" v nějaké části prostoru s hustotou úměrnou $|\psi|^2$ (samotná vlnová funkce nebyla použitelná, neboť může nabývat kladných i záporných hodnot). Brzy se však ukázalo, že tyto interpretace vedou k rozporům v rozvíjené teoretické stavbě kvantové mechaniky, nebo neodpovídají experimentálním faktům. Tak např. Schrödingerova interpretace vedla k rozštěpení částice při průchodu potenciálovou bariérou (kap.III), což nebylo nikdy pozorováno.

3.1) Bornova pravděpodobnostní interpretace

Dnes je takřka všeobecně přijímanou Bornova pravděpodobnostní interpretace vlnové funkce. Nutno však říci, že neexistuje obecný důkaz nemožnosti nalézt interpretaci jinou, která by stejně jako Bornova, byla konsistentní (nevedla k rozporům) s existující stavbou kvantové mechaniky a experimentálními poznatky. Práce v tomto směru se proto objevují i dnes, rovnocenný partner pravděpodobnostní interpretace však zatím neexistuje (podrobnější informace, včetně rozboru hypotézy o tzv. skrytých parametrech, viz [7], [9]).

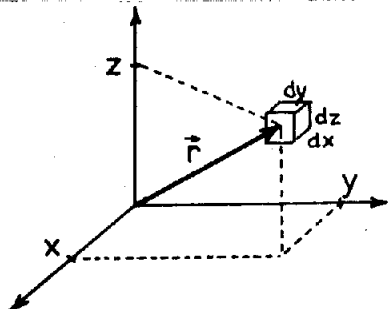
Pravděpodobnostní interpretaci vlnové funkce navozoval již rozbor difrakce na dvojštěrbíně; zavedli jsme tam amplitudy pravděpodobnosti (vlnové funkce), jejichž kvadrát modulu určoval pravděpodobnost výskytu částice.

V kvantové mechanice se postuluje, že vlnová funkce ψ plně určuje dynamický stav částice; to znamená, že ve vlnové funkci jsou obsaženy všechny informace, které je možné o částici získat.

Podle Maxe Borna se ψ interpretuje jako amplituda pravděpodobnosti výskytu částice; výraz

$$dP(x, y, z; t) = |\psi(x, y, z; t)|^2 dx dy dz \quad (11)$$

udává pravděpodobnost nalezení částice, v čase t , v infinitesimálním objemu $dx dy dz$, opsaném kolem bodu se souřadnicemi (x, y, z) .



Obr. 9

Pravděpodobnost, že v čase t bude částice nalezena v infinitesimálním objemu $dx dy dz$ opsaném kolem bodu se souřadnicemi (x, y, z) je $|\psi(x, y, z; t)|^2 dx dy dz$ (nebo vektorově: $|\psi(\vec{r}; t)|^2 d\tau$)

Z toho plyne:

Pravděpodobnost, že v čase t bude částice v nějakém konečném objemu V , se získá integrací přes V :

$$\iiint_{(V)} |\psi(x,y,z;t)|^2 dx dy dz \quad (12)$$

Pravděpodobnost, že v čase t je částice kdekoli v prostoru, se získá integrací přes celý prostor:

$$\iiint_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,y,z;t)|^2 dx dy dz \quad (13)$$

Zopakujme vše ještě pro jednorozměrný prostor (částice se pohybuje pouze ve směru jedné souřadné osy, řekněme po ose x); v tomto případě máme pouze funkci $\psi(x;t)$ a :

Pravděpodobnost, že částice bude v čase t nalezena v infinitesimálním intervalu $\langle x, x+dx \rangle$ je (obr.10a)

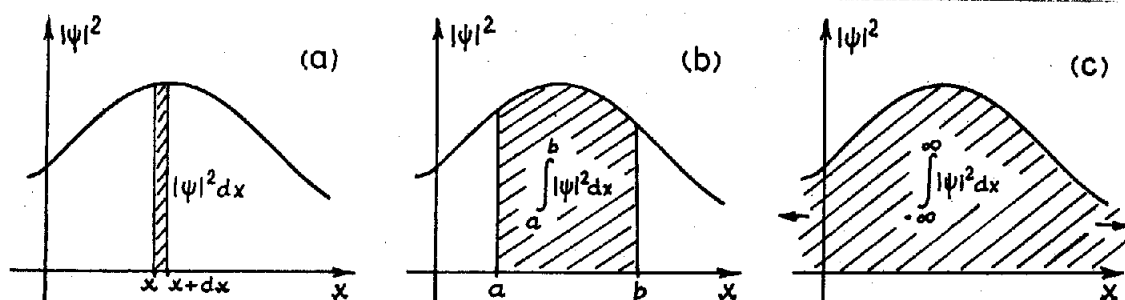
$$dP(x;t) = |\psi(x;t)|^2 dx \quad (14)$$

Pravděpodobnost, že částice bude v čase t nalezena v konečném intervalu $\langle a,b \rangle$ na ose x je (obr.10b)

$$\int_a^b |\psi(x;t)|^2 dx \quad (15)$$

Pravděpodobnost, že částice bude v čase t nalezena na ose x je (obr.10c)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x;t)|^2 dx \quad (16)$$



Obr. 10. Pravděpodobnost, že částice bude v čase t nalezena: (a) v infinitesimálním okolí bodu x , (b) v intervalu $\langle a,b \rangle$, (c) kdekoli na ose x (geometricky je integrál roven (pravděpodobnost úměrná) vyšrafované ploše pod křivkou).

Znovu zdůrazněme, že vlnová funkce je obecně komplexní (nabývá komplexních hodnot), tj.

$$\psi(x,y,z;t) = \psi^{(r)}(x,y,z;t) + i \psi^{(i)}(x,y,z;t) \quad (17)$$

kde $\psi^{(r)}$ je její reálná část ($\psi^{(r)} = \text{Re } \psi$) a
 $\psi^{(i)}$ je její imaginární část ($\psi^{(i)} = \text{Im } \psi$).

Proto stále mluvíme o kvadrátu modulu vlnové funkce

$$|\psi(\vec{r};t)|^2 = \psi^*(\vec{r};t)\psi(\vec{r};t) = |\psi^{(r)}(\vec{r};t)|^2 + |\psi^{(i)}(\vec{r};t)|^2 \quad (18)$$

kde $\psi^*(\vec{r};t) = \psi^{(r)}(\vec{r};t) - i \psi^{(i)}(\vec{r};t)$ je funkce komplexně sdružená.

Je-li funkce reálná ($\text{Im } \psi \equiv 0$), potom pochopitelně $|\psi(\vec{r};t)|^2 = \psi^2(\vec{r};t)$.

Z přijaté interpretace vlnové funkce a její role v integrálech (12), (13) (resp. (15), (16)) vyplývá název hustota pravděpodobnosti pro výraz

$$|\psi(\vec{r};t)|^2 \quad (19)$$

3.2) Normalizace vlnové funkce

V matematice se zavádí pravděpodobnost jako funkce, která nabývá hodnoty z intervalu $\langle 0, 1 \rangle$; nula znamená, že jev jistě nenastane a jednička znamená, že jev jistě nastane. Protože tuto konvenci přijímáme i pro naše funkce $P(\vec{r};t)$, měl by integrál (13), resp. (16), být roven jedné, neboť vyjadřuje pravděpodobnost (rovnou jistotě), že částice vůbec někde v prostoru je. Může se ovšem stát, že funkce ψ (kterou pro částici získáme např. řešením Schrödingerovy rovnice) tuto podmínku nesplňuje; říkáme, že funkce není normalizovaná. V takovém případě můžeme vždy provést její normalizaci jednoduše tak, že ji vynásobíme takovou normalizační konstantou C , aby platilo

$$N = |C|^2 \iiint |\psi(x,y,z;t)|^2 dx dy dz = 1 \quad (20)$$

Normalizační konstantu C určíme z takto získané rovnice.

Splňuje-li funkce ψ normalizační podmínku (20), říkáme, že je normalizovaná. Integrál na levé straně (20) se nazývá normalizační integrál a definuje normu N vlnové funkce ψ . Je možné ukázat ([11 - 14]), že přijatá interpretace ψ vede k požadavku nezávislosti normy vlnové funkce na čase.

3.3) Vlnová funkce soustavy částic

Dosud jsme mluvili o vlnové funkci pro jednu částici. Vše co o ní bylo řečeno je možné zobecnit na vlnovou funkci kvantové soustavy, která je tvořena více částicemi.

Postuluje se, že

||| stav kvantové soustavy je plně určen vlnovou funkcí, závislou na všech souřadnicích, nutných pro popis soustavy.

Tak např. pro soustavu dvou částic (jakou je třeba atom vodíku složený z protonu + elektronu) je to vlnová funkce

$$\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2; t) \quad (\text{nebo: } \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)) \quad (21)$$

kde $\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ je polohový vektor 1-té částice ($i = 1, 2$).

Interpretuje se takto:

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)|^2 d\tau_1 d\tau_2 \quad (d\tau_i = dx_i dy_i dz_i ; i=1,2) \quad (22)$$

udává pravděpodobnost, že v čase t je částice 1 v elementu $d\tau_1$ v okolí bodu \vec{r}_1 a současně částice 2 v elementu $d\tau_2$ v okolí bodu \vec{r}_2 .

Tato interpretace vyžaduje určitou modifikaci v případě, že jde o systém stejných částic (např. soubor elektronů v atomu); podrobně se touto otázkou budeme zabývat v kap.VI.

Uveďme si ještě normalizační podmínku (20) pro funkci (21)

$$|\psi|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)|^2 d\tau_1 d\tau_2 = 1 \quad (23)$$

Zobecnění vztahů (21)-(23) na soustavu N částic by již nemělo činit potíže.

Z pověděného je zřejmé, že vlnová funkce ψ není nějakou vlnou v 3-rozměrném prostoru. V případě soustavy N částic je to funkce $3N$ proměnných a představuje tedy vlnu v $3N$ -rozměrném prostoru. V kap.V zavedeme pro částice ještě spinovou proměnnou σ , takže 1 vlnová funkce jedné částice bude záviset na čtyřech souřadnicích; obecně vždy, když se ukáže potřeba zavést nové souřadnice pro úplnější určení soustavy, projeví se to závislostí ψ na těchto nových souřadnicích.

Upozornění:

Nebudeme-li v dalším textu pro přehlednost vypisovat u vlnových funkcí proměnné (budeme psát např. jen ψ , φ apod.) rozumí se, že závisí na všech souřadnicích nutných k určení stavu kvantové soustavy.

3.4) Vlastnosti vlnových funkcí

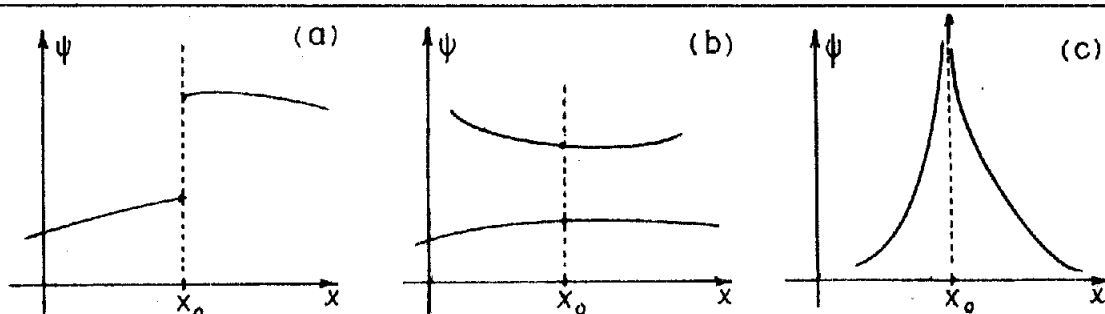
Z přijaté fyzikální interpretace vyplývají následující požadavky na vlnové funkce; vlnová funkce musí být :

- (i) všude spojitá i se všemi svými prvními derivacemi,
- (ii) jednoznačná,
- (iii) konečná,

(iv) kvadraticky integrovatelná, tj. musí existovat (konvergovat) normalizační integrál

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 d\tau$$

Vyjma požadavek spojitosti prvních derivací, který se ozřejmí v kap. III, jsou důvody pro zbývající požadavky nasnadě: nespojitá funkce (obr. 11a) by v bodě nespojitosti dávala nejednoznačnou pravděpodobnost výskytu částice; totéž by (i když z jiného důvodu) dávala funkce mnohoznačná (obr. 11b); funkce, která by pro nějaké x_0 šla do nekonečna (obr. 11c), by dávala v tomto bodě nekonečně velkou hustotu pravděpodobnosti výskytu částice; možnost normalizovat vlnovou funkci, vyplývající z požadavku (iv), je nezbytným předpokladem pro zavedení pravděpodobnostní interpretace.



Obr. 11. Schematické znázornění funkce $\psi(x)$: (a) nespojité v bodě x_0 , (b) víceznačné (má více větví; k jednomu x máme více funkčních hodnot), (c) jdoucí pro $x \rightarrow x_0$ do ∞ (nejčastěji budeme muset vylučovat funkce, které pro $|x| \rightarrow \infty$ divergují).

4. Princip superpozice

4.1) Superpozice kvantových stavů

Základní ideou každé vlnové teorie je: jsou-li ψ_1 , ψ_2 možné vlnové funkce, potom libovolná lineární kombinace

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \quad (24)$$

kde c_1 , c_2 jsou libovolné konstanty, je též možnou vlnovou funkcí.

Toto tvrzení je známo jako princip superpozice. Je to základní hypotéza, potřebná k objasnění interference vlnění, která byla úspěšně aplikována v mnoha oblastech klasické fyziky (elektromagnetické pole, akustika apod) a v odst. 2.3 (vztah (10)) jsme ji užili i pro skládání amplitud pravděpodobnosti.

Princip superpozice kvantových stavů se rovněž bere za základní princip kvantové mechaniky. Zformulujeme ho takto:

Jestliže ψ_1, ψ_2 jsou vlnové funkce příslušející dvěma možným stavům kvantové soustavy, potom soustava může být také ve stavu s vlnovou funkcí

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \quad (25)$$

kde c_1, c_2 jsou libovolná komplexní čísla.

Opětovným opakováním tohoto tvrzení dojdeme k závěru, že vlnová funkce možného stavu soustavy, může být vytvořena z libovolného počtu možných vlnových funkcí:

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + \dots + c_i \psi_i + \dots = \sum_i c_i \psi_i \quad (26)$$

Z hlediska matematického formalismu má přijetí principu superpozice významný důsledek: rovnice, kterým mají vyhovovat vlnové funkce, musí být lineární. Pro lineární rovnici totiž platí: jsou-li ψ_1, ψ_2 řešení rovnice, potom také libovolná lineární kombinace $(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2)$ je řešením této rovnice.

Např. diferenciální rovnice

$$\frac{d}{dx} \psi(x) + a \psi(x) = 0 \quad (a \text{ je konstanta})$$

je lineární, neboť této podmínce vyhovuje, zatímco např. rovnice

$$\left[\frac{d}{dx} \psi(x) \right]^2 + a \psi(x) = 0, \quad \frac{d}{dx} \psi(x) + a \psi^2(x) = 0$$

jsou nelineární.

4.2) Normalizace de Broglieho vlnové funkce

Podle de Broglieho hypotézy je volné částici s hybností \vec{p} , přiřazena vlnová funkce (1) - rovinná monochromatická vlna. Pro jednoduchost budeme uvažovat jednorozměrný případ (částice je stále na ose x); po dosazení ze vztahu (2)

$$\psi_p(x;t) = C \exp \left[\frac{i}{\hbar} (px - Et) \right] \quad (27)$$

Index p u ψ značí, že jde o vlnovou funkci pro částici ve stavu s hybností p ; je to speciální případ tzv. kvantového čísla. Obecně kvantovými čísly nazýváme veličiny, kterými rozlišujeme možné stavy (odpovídající vlnové funkce) kvantové soustavy. U volné částice to může být např. právě \vec{p} , častěji však se užívá vlnový vektor $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$ (v 3-rozměrném případě vektor \vec{k} představuje 3 kvantová čísla - složky \vec{k}).

Funkce (27) dává konstantní hustotu pravděpodobnosti

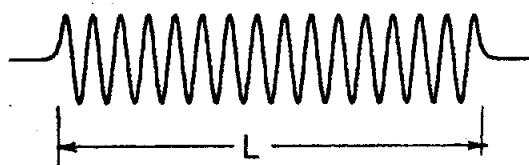
$$\psi_p^*(x;t) \psi_p(x;t) = C^* C = |C|^2 \quad (28)$$

To znamená, že volná částice s přesně známým impulsem \vec{p} , není nikde v prostoru lokalizovaná, neboť se stejnou pravděpodobností může být nalezena v okolí kteréhokoli bodu x . Rovinná vlna je ovšem abstrakce fyzikálně nerealizovatelná. Ostatně i normalizační integrál

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_p(x;t)|^2 dx$$

diverguje, takže vlna (27) nemůže odpovídat realizovatelnému stavu (viz podmínku (iv) v odst. 3.4).

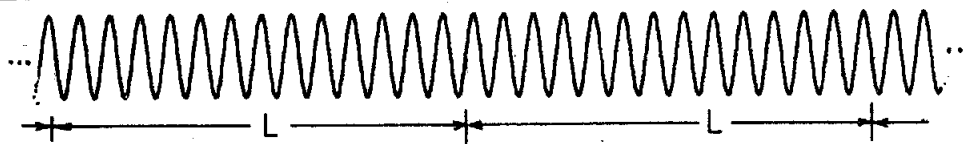
Fyzikálně reálná je kvazimonochromatická vlna, která v libovolně velké, avšak konečné, části prostoru má průběh (27) a vně tohoto intervalu, tj. pro $|x| \rightarrow \infty$, jde k nule (obr.12) (normalizační integrál bude existovat, jestliže pokles k nule je rychlejší než u funkce $1/x$).



Obr. 12.

Kvazimonochromatická vlna. Vně intervalu délky L , pro $|x| \rightarrow \infty$, jde ψ k nule, uvnitř L má průběh (27) (nakreslena je Re část (27)).

Abychom zachovali výhody, které přináší práce s monochromatickými vlnami, můžeme postupovat takto: představíme si, že monochromatická vlna (která se rozprostírá od $-\infty$ do $+\infty$) byla vytvořena "naskládáním" reálných vln z obr.12 (vně intervalu L klademe $\psi = 0$) vedle sebe (obr.13). Nebo obráceně: monochromatickou vlnu si představíme rozdělenou na úseky délky L , z nichž každý splývá s kvazimonochromatickou vlnou z obr.12.



Obr. 13. Periodické okrajové podmínky: výslednou monochromatickou vlnu získáme "naskládáním" vln z obr.12 vedle sebe; spojitě napojení na hranicích intervalu periodičnosti délky L zaručují periodické okrajové podmínky (29).

Budeme-li potom požadovat, aby ve všech těchto úsecích - oblastech periodicity - byla v každém okamžiku fyzikální situace stejná, stačí se omezit na řešení úlohy pouze v jedné z nich. Právě uvedený požadavek vyjádříme matematicky tak, že požadujeme, aby vlnová funkce splňovala tzv. periodické okrajové podmínky.

V jednorozměrném případě, je-li délka intervalu periodicity L , je můžeme vyjádřit takto

$$\psi(x + L) = \psi(x) \quad (29)$$

(vlnová funkce musí být stejná v každých dvou bodech vzdálených o L).

V trojrozměrném prostoru se zpravidla volí za objem periodicity krychle s hranou L a (29) přejde v

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z) \quad (30)$$

Přijmeme-li periodické okrajové podmínky, potom i vlnovou funkci (27) normalizujeme v oblasti periodicity tak, aby platilo

$$\int_0^L \left| C \exp \left[\frac{i}{\hbar} (px - Et) \right] \right|^2 dx = 1 \quad (31)$$

Odtud $C = L^{-1/2}$ a vlnové funkce $\psi_p(x; t)$, normalizované v oblasti periodicity, jsou

$$\psi_p(x; t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cdot \exp \left[\frac{i}{\hbar} (px - Et) \right] \quad (32)$$

V trojrozměrném případě ($\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$)

$$\psi_{\vec{p}}(x, y, z; t) = C \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_x x + p_y y + p_z z - Et) \right] \quad (33)$$

a normalizace v krychli s hranami L vede k výpočtu integrálu

$$\begin{aligned} \int_0^L \int_0^L \int_0^L \left| C \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_x x + p_y y + p_z z - Et) \right] \right|^2 dx dy dz = \\ = |C|^2 \int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^L dz = |C|^2 \cdot L^3 \end{aligned} \quad (34)$$

Normalizované vlnové funkce (33) pak jsou ($\vec{r} = (x, y, z)$)

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}; t) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} - Et) \right] \quad (35)$$

Zvětšováním oblasti L se můžeme s libovolnou přesností přibližovat ke stavu, kterému odpovídá monochromatická vlna. Provedení limitního přechodu $L \rightarrow \infty$ vede k tzv. normalizaci na δ -funkci; zmínka o této možnosti je v dod.D.

4.3) Interpretace koeficientů v superpozici stavů

Podle principu superpozice je možný každý stav, jemuž přísluší vlnová funkce, která je superpozicí (lineární kombinací) nějakých možných stavů, jak je to vyjádřeno v (26). Předpokládejme pro určitost, že máme částici ve stavu s vlnovou funkcí $\psi(\vec{r};t)$, která je superpozicí vln (33) pro n různých impulsů $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_n$

$$\psi(\vec{r};t) = c_1 \psi_{\vec{p}_1}(\vec{r};t) + c_2 \psi_{\vec{p}_2}(\vec{r};t) + \dots + c_n \psi_{\vec{p}_n}(\vec{r};t) \quad (36)$$

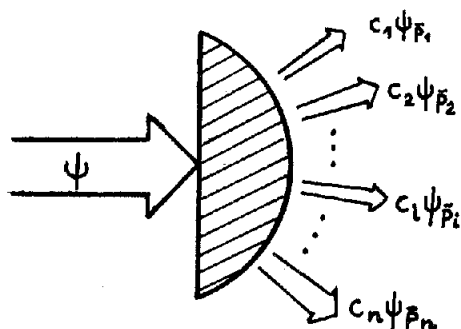
Všechny funkce v (36) nechť jsou normalizované v krychli s hranou L , takže platí

$$\iiint_{(L^3)} |\psi(\vec{r};t)|^2 d\tau = 1 \quad ; \quad \iiint_{(L^3)} |\psi_{\vec{p}_i}(\vec{r};t)|^2 d\tau = 1 \quad (i=1,2,\dots,n) \quad (37)$$

Hustota pravděpodobnosti výskytu částice ve stavu (36) je

$$\begin{aligned} |\psi(\vec{r};t)|^2 &= (c_1^* \psi_{\vec{p}_1}^* + \dots + c_n^* \psi_{\vec{p}_n}^*) (c_1 \psi_{\vec{p}_1} + \dots + c_n \psi_{\vec{p}_n}) = \\ &= |c_1|^2 |\psi_{\vec{p}_1}|^2 + |c_2|^2 |\psi_{\vec{p}_2}|^2 + \dots + |c_n|^2 |\psi_{\vec{p}_n}|^2 + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^n (c_1 c_j^* \psi_{\vec{p}_1} \psi_{\vec{p}_j}^* + c_1^* c_j \psi_{\vec{p}_1}^* \psi_{\vec{p}_j}) \end{aligned} \quad (38)$$

Představme si nyní, že částice ve stavu ψ dopadají na měřicí přístroj (fungující podobně jako spektrometr), který dokáže dopadající svazek rozložit na jednotlivé komponenty podle (36) (obr.14).



Obr. 14.

Schematické znázornění zařízení, které rozkládá dopadající svazek ψ na jednotlivé složky.

Výraz na levé straně (38) se vztahuje k situaci před vstupem do zařízení, výraz na pravé straně k situaci, která je v obr.14 vpravo od zařízení. Protože předpokládáme dokonalou separaci, bude každá z $\psi_{\vec{p}_i}$ vpravo, různá od nuly pouze v té části prostoru, kde zbývající jsou rovny nule; potom ovšem jsou součiny $\psi_{\vec{p}_i} \cdot \psi_{\vec{p}_j}^*$ ($i \neq j$) v (38) rovny nule a zbývá nám jen (za aparaturou)

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

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

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

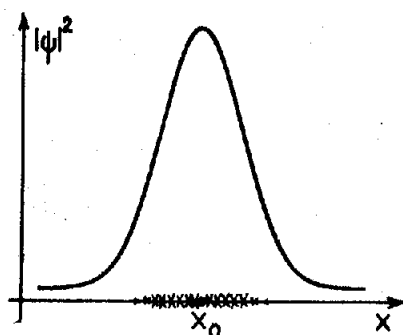
potom pravděpodobnost, že při měření bude částice nalezena ve stavu s vlnovou funkcí ψ_i je rovna $|c_i|^2$ ($i=1,2,\dots$) (všechny funkce předpokládáme normalizované).

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

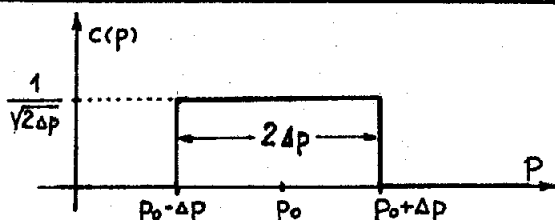
$$\int_{-\infty}^{\infty} |c(p)|^2 dp = 1 \quad (45)$$

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

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

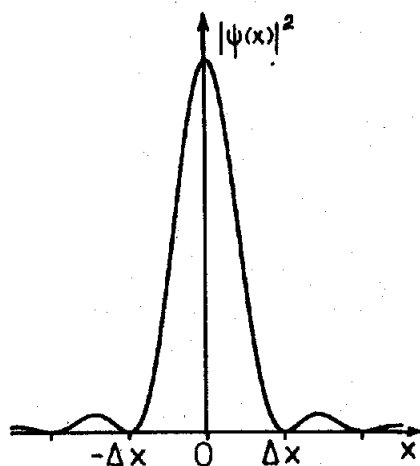
Integrál snadno vypočteme s výsledkem

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

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 vlnou 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 $\Delta x \cdot \Delta p$) 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

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

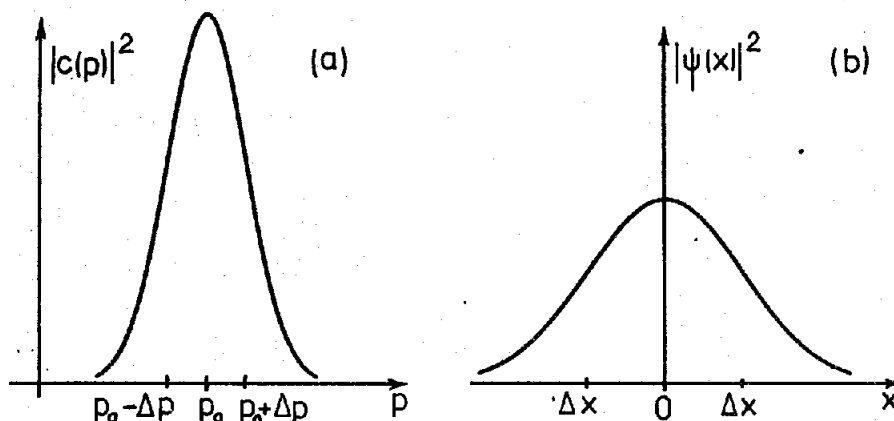
kde

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

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

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

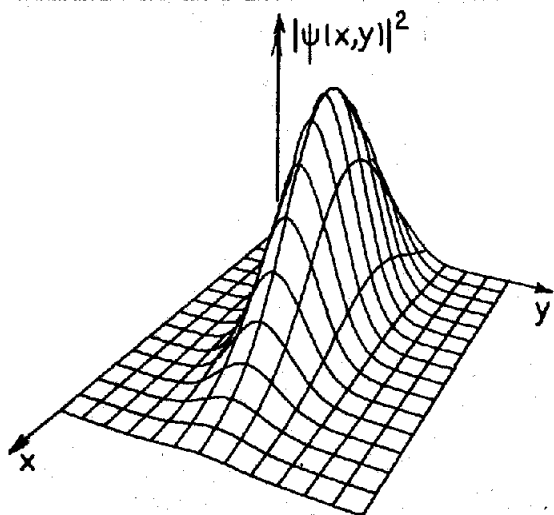
Je-li možné psát funkci $c(p)$ jako součin

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

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

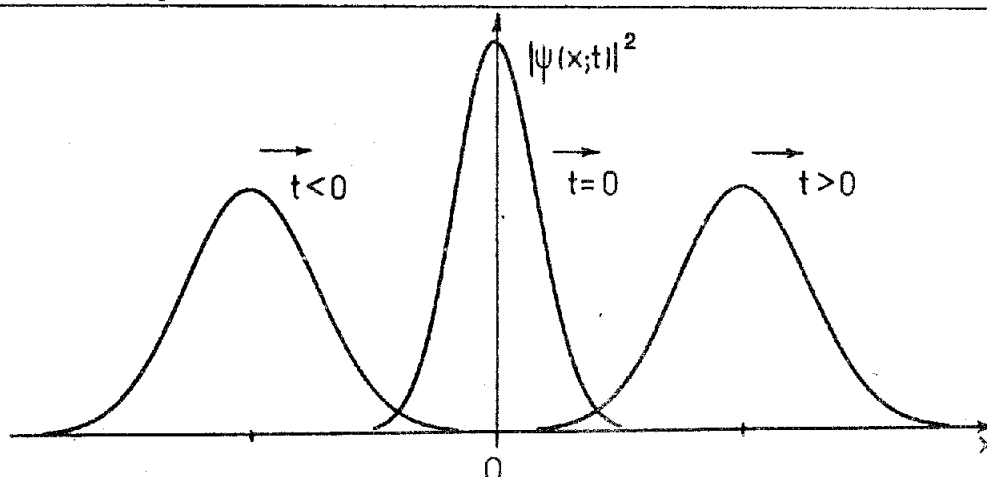
$$|\psi(x;t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta x_t} \exp \left\{ - \frac{(x - p_0 t/m)^2}{2(\Delta x_t)^2} \right\} \quad (66a)$$

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

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

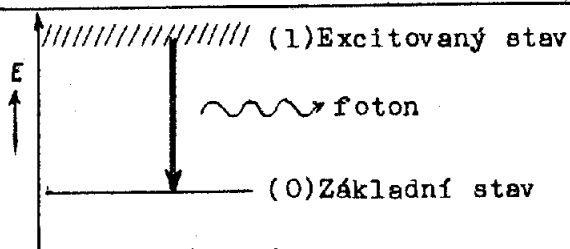
Čas τ charakterizuje evoluci fyzikálních vlastností soustavy; výsledky měření, provedených na soustavě ve dvou různých časech t_1, t_2 budou prakticky stejné, jestliže $\Delta t = |t_1 - t_2|$ bude malé ve srovnání s τ .

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, nepřímo úměrnou době života těchto stavů.