Univerzita Karlova v Praze

Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Martina Lužová

Dvě nové relace neurčitosti a jejich využití

Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí bakalářské práce: prof. RNDr. Lubomír Skála DrSc.
Studijní program: Fyzika
Studijní obor: Obecná fyzika

Praha 2012

Děkuji prof. RNDr. Lubomíru Skálovi DrSc. za odborné vedení bakalářské práce a jeho ochotu a trpělivost. Děkuji své rodině za podporu a pomoc a v neposlední řadě také děkuji svému příteli Petru Holíkovi za neustálé povzbuzování.

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracovala samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V .... dne .... Podpis

Název práce: Dvě nové relace neurčitosti a jejich využití

Autor: Martina Lužová

Katedra: Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí bakalářské práce: prof. RNDr. Lubomír Skála DrSc., Katedra chemické fyziky a optiky

Abstrakt: V této práci je shrnut historický vývoj relací neurčitosti začínající prvními Heisenbergovými úvahami o principu neurčitosti. Po dokázání platnosti Schwarzovy nerovnosti je odvozena obecná relace neurčitosti pro dva hermitovské operátory a z této obecné verze je pak dokázána i platnost Heisenbergovy relace neurčitosti. Nejdůležitější částí práce je pak odvození dvou nových relací neurčitosti, silnějších než Heisenbergova či Robertson-Schrödingerova relace neurčitosti, a jejich konkrétní podoba pro dva příklady - volnou částici ve stavu popsaném Gaussovským vlnovým balíkem a lineární harmonický oscilátor s vlnovou funkcí ve tvaru Gaussovského klubka.

Klíčová slova: kvantová mechanika, relace neurčitosti, lineární harmonický oscilátor, Gaussovské vlnové klubko

Title: Two new uncertainty relations and their applications

Author: Martina Lužová

Department: Department of Chemical Physics and Optics

Supervisor: prof. RNDr. Lubomír Skála DrSc., Department of Chemical Physics and Optics

Abstract: The historical development of uncertainty relation, begining with first Heisenberg's thoughts of uncertainty principle is summed up in this thesis. After proving validity of Schwarz inequality general uncertainty relation for two hermitian operators is obtained, and from this general version the validity of Heisenberg uncertainty relation is than proved. The most important part of this work is the obtention of two new uncertainty relations, which are stronger then Heisenberg or Robertson-Schrödinger uncertainty relation, and their specific form for two examples – a free particle in a state discribed by the gaussian wave packet and the linear harmonic oscillator with a wave function in the shape of gaussian packet.

Keywords: quantum mechanics, uncertainty relations, linear harmonic oscillator, gaussian wave packet

Obsah

Úvod

Tato práce se zabývá obecnými relacemi neurčitosti a jejich konkrétní podobou pro operátory souřadnice a hybnosti.

Začátek práce se zaměřuje na prvotní Heisenbergovu formulaci principu neurčitosti a jeho další úvahy na toto téma. Dále je uvedeno odvození Schwarzovy nerovnosti, která je vzápětí využita v důkazu obecné relace neurčitosti pro libovolné dva hermitovské operátory. V kapitole 4 je pak zmíněn jiný matematický přístup k odvození relací neurčitosti a následně se dosazením do obecných relací neurčitosti přesouváme zpět k Heisenbergově relaci.

Od těchto základních myšlenek se pak dostáváme k odvození dvou silnějších relací neurčitosti pro operátory souřadnice a hybnosti a využití těchto relací v konkrétních příkladech – volné částice ve stavu popsaném Gaussovským vlnovým balíkem a částice v potenciálu lineárního harmonického oscilátoru taktéž ve stavu Gaussovského vlnového klubka.

Praktické důsledky relací neurčitosti jsou objasněny v deváté kapitole a na závěr jsou uvedeny některá odvození a myšlenky, které vedly k principu neurčitosti, jak jej známe dnes.

1. Heisenbergovo odvození relací neurčitosti

Již roku 1927 Heisenberg napsal článek [1] týkající se principu neurčitosti v kvantové mechanice. V této práci vycházel z tehdy již známé komutační relace:

$$pq - qp = \frac{h}{2\pi i} \qquad (1.1)$$

a objasňuje v ní tedy hlavně svůj pohled na definici impulzu p (případně rychlosti) a polohy q v kvantové mechanice (h je Planckova konstanta).

Heisenberg v [1] tvrdí, že je nutné zamyslet se nad tím, jestli nemusí být definice polohy v kvantové mechanice jiná, než v klasické fyzice:
„Pojem „pozice kvantového objektu“ lze definovat pouze tehdy, umíme-li ji změřit - jinak je takový pojem beze smyslu. Jak přesně jsme tedy schopni experimentálně určit pozici elektronu? Záleží hlavně na velikosti vlnové délky světla, kterým se na něj díváme. Teoreticky je možné postavit detektor gama záření, kterým můžeme zjistit polohu s libovolnou přesností (používá libovolně malou vlnovou délkou světla). Pak je ale nutné počítat s Comptonovým jevem a jakékoli pozorování odraženého světla přicházejícího od elektronu zahrnuje fotoelektrický jev. Dá se to brát i tak, že kvantum světla se od elektronu odrazí, či se na něm rozptýlí, a skokově změní hybnost elektronu. Světlo pak ještě bude odchýleno průchodem čočkou mikroskopu a pak konečně tříděné pomocí fotoelektrického jevu. Ale při takovém určování polohy se nespojitě změní velikost impulzu elektronu. Čím menší bude použitá vlnová délka, tím výraznější bude změna impulzu. Tedy čím přesněji známe polohu, tím méně můžeme říct o hybnosti částice a obráceně. A proto, bude-li změřena přesná poloha elektronu, hybnost můžeme určit maximálně s přesností odpovídající velikosti změny impulzu. Toto přímo a intuitivně potvrzuje vztah (1.1).

Nechť q_1 je přesnost, do které jsme schopni určit polohu q (q_1 je přibližně průměrná hodnota chyby q), nebo zde vlnová délka světla a nechť p_1 je přesnost, s jakou můžeme určit hybnost p, nebo v tomto případě nespojitá změna impulzu během Comptonova jevu. Dle základní rovnice pro Comptonův jev je vztah mezi p_1 a q_1:

$$p_1 q_1 \simeq h \quad , \qquad (1.2)$$

Vztah (1.2) má přímou matematickou souvislost s komutační relací (1.1) jak je ukázáno níže.“

Heisenberg také došel k závěru, že tento problém s přesností měření přetrvá, i když se budeme snažit zjistit polohu elektronu jinými způsoby (více viz [1]).

V praktickém měření pak ale dle Heisenberga narazíme i na jiné problémy - například když chceme zjistit dráhu elektronu. Již v době, kdy psal článek [1], věděl, že elektron má (dle jistých pokusů zmíněných v [1]) velikost maximálně 10^{-12} m. Zjistíme, že nelze zkoumat jeho dráhu, pokud je vázaný v atomu. Jako příklad uvádí nesmyslnost výrazu „orbital 1-S u vodíkového atomu“ často používaného ve smyslu dráhy elektronu, protože při ozáření světlem o vlnové délce menší než 10^{-8} m dojde k uvolnění elektronu z atomového obalu a přesněji tedy jeho polohu v atomu nezjistíme. Z tohoto pohledu tedy zmíněný výraz skutečně nedává smysl.

Z jeho závěrů plyne, že pokud pro popis kvantového systému budeme chtít použít klasické veličiny, které jsou kanonicky provázané (jako polohu, rychlost, hybnost), a klasické vztahy mezi nimi, ukáže se, že experimenty vedoucí k zjištění konkrétních hodnot těchto veličin pro daný kvantový systém způsobí jistou neurčitost jen samotným měřením. Jde především o definici pojmů „poloha“, či „rychlost“ elektronu. Jakkoli je v kvantové mechanice chceme definovat, nevyhneme se neurčitosti plynoucí z rovnice (1.2). Heisenberg v [1] přirovnal tento proces ke snaze definovat současnost v teorii relativity. Řekneme-li, že se signál šíří nekonečnou rychlostí a v souladu s tím definujeme současnost, je zřejmé, že teorie relativity neplatí. Podobně neplatí kvantová mechanika, použijeme-li definici polohy a hybnosti, díky níž bychom je mohli určit přesněji, než plyne z relace neurčitosti (1.2).

Dále Heisenberg upozorňuje na to, že měření také ovlivňuje systém a že dráha elektronu, která se naměří, by vlastně byla úplně jiná, kdybychom ji neměřili.

Heisenbergův výpočet potvrzující relaci (1.2) (viz [1]):

„Relaci (1.2) lze odvodit z Dirac-Jordanovy formulace pomocí malého zobecnění. Pokud pro jistou hodnotu η libovolného parametru můžeme určit polohu q elektronu v q' s přesností q_1, pak lze tento fakt vyjádřit pomocí amplitudy pravděpodobnosti $S(\eta, q)$, která bude znatelně různá od nuly pouze v oblasti o přibližné velikosti q_1 kolem q'. Konkrétněji můžeme tedy říct:

$$S(\eta, q) \propto e^{\frac{-(q-q')^2}{2q_1^2} - \frac{2\pi i}{h} p'(q-q')} \text{, tzn.} \quad S S^* \propto e^{\frac{-(q-q')^2}{q_1^2}} \qquad (1.3)$$

(Pozn.: $S S^*$ je pravděpodobnost s jakou se elektron nachází v poloze q).

A tak budeme mít pro amplitudu pravděpodobnosti odpovídající hybnosti p:

$$S(\eta, p)=\int S(\eta, q) S(q, p) dq \quad . \tag{1.4}$$

Ve shodě s Jordanem můžeme říct, že pro $S(q, p)$ platí:

$$S(q, p)=e^{\frac{2\pi i p q}{h}} \quad . \tag{1.5}$$

V tom případě, podle vztahu (1.4), bude $S(\eta, p)$ znatelně různá od nuly pouze pro hodnoty p, pro něž $2\pi(p-p')q_1/h$ není výrazně větší než 1. Speciálně v případě (1.3) dostaneme:

$$S(\eta, p)\propto\int e^{\frac{2\pi i(p-p')q}{h}-\frac{(q-q')^2}{2q_1^2}} dq \quad , \tag{1.6}$$

to jest:

$$S(\eta, p)\propto e^{\frac{-(p-p')^2}{2p_1^2}+\frac{2\pi i}{h}q'(p-p')} \text{, tzn. } \quad S S^*\propto e^{\frac{-(p-p')^2}{p_1^2}} \quad , \tag{1.7}$$

kde

$$p_1 q_1=\frac{h}{2\pi} \tag{1.8}$$

Tudíž předpoklad (1.3) pro $S(\eta, q)$ odpovídá experimentálnímu faktu, že byly naměřeny hodnota hybnosti p' a hodnota polohy q' (s omezením přesnosti (1.8)).“

V [1] se také Heisenberg zmýšlí nad jinými experimenty, ze kterých plyne relace neurčitosti pro energii E a čas t

$$E_1 t_1\simeq h \quad , \tag{1.9}$$

či moment hybnosti J a úhel w

$$J_1 w_1\simeq h \quad , \tag{1.10}$$

jednoznačně související s relacemi $Et-tE=\frac{h}{2\pi i}$ a $Jw-wJ=\frac{h}{2\pi i}$.

Po přečtení Heisenbergova článku Bohr upozornil na to, že při experimentu s ozařováním elektronu fotony není důležitá změna impulzu, jako spíš fakt, že tuto změnu nelze při tom samém experimentu určit (viz dodatek k [1]). Podle Bohra tedy nelze přesně měřit polohu a hybnost elektronu současně. Tento fakt přijal i Heisenberg a v dalších svých publikacích ho již zahrnuje do svého výkladu fungování principu neurčitosti.

Je také nutné upozornit, že Heisenberg v [1] nedefinoval přesně, co je to neurčitost p_1 nebo q_1, ani nepodal matematicky korektní důkaz platnosti rovnice (1.2), ačkoli jeho argumenty se zdály logické. Jeho článek však vzbudil velkou pozornost odborné veřejnosti a již pár měsíců po jeho vydání matematicky správně odvodil (pro libovolné čisté stavy) Kennard [2] asi nejznámější formu relace neurčitosti (v literatuře obvykle nazývanou „Heisenbergova" relace neurčitosti):

$$\sigma_p \sigma_x \geqslant \frac{\hbar^2}{4} \quad , \tag{1.9}$$

kde $\sigma_x = \langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle = \langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2$ je střední kvadratická odchylka polohy (zde značené x, zatímco v Heisenbergově článku q), $\sigma_p = \langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle = \langle (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2$ je střední kvadratická odchylka hybnosti a $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ je redukovaná Planckova konstanta.

2. Schwarzova nerovnost a její důkaz

K jednoduchému odvození relací neurčitosti je dobré využít Schwarzovy nerovnosti. Její použití se objevuje již v prvních matematicky korektních odvozeních relací neurčitosti (viz Kennard [2] (1927), či Weyl [3] (1928)). Jak napovídá název kapitoly, zde bude uveden důkaz Schwarzovy nerovnosti, a to dle Skály [4].

Mějme vektory u a v. Schwarzovou nerovností pak rozumíme:

$$(u, u)(v, v) \geqslant |(u, v)|^2 \quad , \tag{2.1}$$

kde *(u, v)* označuje skalární součin.

Důkaz:

Vektor v rozložíme na část rovnoběžnou s u a na část ortogonální k u. Vektor v pak bude dán součtem těchto částí:

$$v = u\frac{(u, v)}{(u, u)} + \left(v - u\frac{(u, v)}{(u, u)}\right) \quad . \tag{2.2}$$

Protože jsou tyto dvě části vůči sobě ortogonální, bude platit:

$$(v, v) = \frac{|(u, v)|^2}{(u, u)} + \left(v - u\frac{(u, v)}{(u, u)}, v - u\frac{(u, v)}{(u, u)}\right) \tag{2.3}$$

Druhý člen na pravé straně rovnice je jako skalární součin vždy větší nebo roven nule:

$$\left(v - u\frac{(u, v)}{(u, u)}, v - u\frac{(u, v)}{(u, u)}\right) \geqslant 0 \tag{2.4}$$

a tedy pro zbytek rovnice (2.3) platí:

$$(v, v) - \frac{|(u, v)|^2}{(u, u)} \geqslant 0 \quad , \tag{2.5}$$

což je přímo Schwarzova nerovnost (2.1).

Rovnítko nastane ve Schwarzově nerovnosti pouze v případě, kdy

$$v - u\frac{(u, v)}{(u, u)} = 0 \quad , \tag{2.6}$$

tedy jsou-li vektory u a v spolu rovnoběžné

$$v = u\frac{(u, v)}{(u, u)} \quad . \tag{2.7}$$

3. Odvození relací neurčitosti ze Schwarzovy nerovnosti

V této kapitole je představeno jednoduché odvození relací neurčitosti pro hermitovské operátory tak, jak je uvedeno v [4].

Obecný stav ψ kvantového systému můžeme zapsat pomocí lineární kombinace vlastních stavů nějaké pozorovatelné (např. $\hat{A}$):

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n \quad , \tag{3.1}$$

kde c_n jsou komplexní koeficienty a ψ_n jsou vlastní stavy operátoru $\hat{A}$ (tzn. $\hat{A}\,\psi_m = a_m \psi_m$, kde a_m jsou vlastní čísla $\hat{A}$ a funkce ψ_n jsou vzájemně ortogonální $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}$).

Takový obecný vztah musí splňovat normovací podmínku:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \tag{3.2}$$

Střední hodnota veličiny $\hat{A}$ ve stavu ψ je dána vztahem:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n \quad , \tag{3.3}$$

kde $\langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle = a_n$ je střední hodnota $\hat{A}$ ve vlastním stavu ψ_n a $|c_n|^2$ je pravděpodobnost naměření hodnoty a_n při měření systému ve stavu ψ.

Odchylku od střední hodnoty budeme označovat:

$$\Delta \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \quad . \tag{3.4}$$

Střední kvadratická odchylka je pak definována jako:

$$\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 - 2\hat{A} \langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \quad , \tag{3.5}$$

platí pro ni tedy:

$$\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle = \sum_n |c_n|^2 (a_n - \langle \hat{A} \rangle)^2 \geqslant 0 \tag{3.6}$$

a je nulová jen pokud $\psi = \psi_n$ (neboli $\hat{A}$ má ve stavu ψ_n ostrou hodnotu). V jiných stavech je tedy větší než nula, tzn. $\hat{A}$ nemá ostrou hodnotu, a lze z toho poznat, že se nejedná o vlastní stav operátoru $\hat{A}$.

Pro libovolné dvě pozorovatelné $\hat{A}$ a $\hat{B}$ bude tedy platit relace

$$\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle \geqslant 0 \quad . \tag{3.7}$$

Ukáže se však, že pokud jsou veličiny $\hat{A}$ a $\hat{B}$ provázané, tedy spolu nekomutují ($[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$), dostaneme ve vztahu (3.6) na pravé straně veličinu větší než nula související se střední hodnotou komutátoru $[\hat{A}, \hat{B}]$.

Předpokládejme nyní, že pro hermitovské operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ platí komutační relace:

$$[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=i\hat{C} \quad , \qquad (3.8)$$

kde *i* je imaginární jednotka a $\hat{C}$ je také hermitovský operátor.

Střední hodnota hermitovského operátoru je vždy reálné číslo. Proto můžeme říct, že platí:

$$[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]=(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)-(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)=i\hat{C} \qquad (3.9)$$

Dále využijeme Schwarzovu nerovnost (2.1), dokázanou výše, a to ve tvaru:

$$\langle u|u\rangle\langle v|v\rangle\geqslant|\langle u|v\rangle|^2 \quad , \qquad (3.10)$$

kde $\langle u|v\rangle$ je skalární součin. Za *u* a *v* dosadíme:

$$u=\Delta\hat{A}\psi,\ \ v=\Delta\hat{B}\psi \quad , \qquad (3.11)$$

z čehož dostaneme:

$$\langle\Delta\hat{A}\psi|\Delta\hat{A}\psi\rangle\langle\Delta\hat{B}\psi|\Delta\hat{B}\psi\rangle\geqslant|\langle\Delta\hat{A}\psi|\Delta\hat{B}\psi\rangle|^2 \quad . \qquad (3.12)$$

Díky tomu, že $\hat{A}$ i $\hat{B}$ jsou hermitovské operátory a tedy i $\Delta\hat{A}$ a $\Delta\hat{B}$ jsou hermitovské, můžeme psát:

$$\langle\psi|(\Delta\hat{A})^2\psi\rangle\langle\psi|(\Delta\hat{B})^2\psi\rangle\geqslant\langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\psi\rangle \quad . \qquad (3.13)$$

Součin dvou hermitovských operátorů ($\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}$) není obecně hermitovský, ale lze ho rozdělit na hermitovskou a antihermitovskou část:

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}=\frac{\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}+\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}}{2}+\frac{\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}-\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}}{2}=\frac{1}{2}(\hat{D}+i\hat{C}) \quad ,(3.14)$$

kde hermitovská část $\hat{D}=\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}+\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}=\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}$ je vlastně antikomutátor $\Delta\hat{A}$ a $\Delta\hat{B}$. Antihermitovský operátor (zde komutátor $[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]$) se stane hermitovským po přenásobení imaginární jednotkou *i*.

Nyní dosadíme z rovnic (3.14) do pravé strany Schwarzovy nerovnosti (3.13):

$$\frac{1}{4}|\langle\psi|(\hat{D}+i\hat{C})\psi\rangle|^2=\frac{1}{4}(\langle\psi|\hat{D}\psi\rangle+i\langle\psi|\hat{C}\psi\rangle)^*(\langle\psi|\hat{D}\psi\rangle+i\langle\psi|\hat{C}\psi\rangle) \qquad (3.15)$$

a po roznásobení závorek dostaneme:

$$\frac{1}{4}|\langle\psi|(\hat{D}+i\hat{C})\psi\rangle|^2=\frac{1}{4}(\langle\psi|\hat{C}\psi\rangle^2+\langle\psi|\hat{D}\psi\rangle^2) \quad . \qquad (3.16)$$

Relaci (3.13) lze tedy přepsat do tvaru:

$$\langle\psi|(\Delta\hat{A})^2\psi\rangle\langle\psi|(\Delta\hat{B})^2\psi\rangle\geqslant\frac{1}{4}(\langle\psi|\hat{C}\psi\rangle^2+\langle\psi|\hat{D}\psi\rangle^2) \quad . \qquad (3.17)$$

Střední hodnotu operátoru $\hat{D}$ obvykle vynecháváme, protože závisí na tvaru vlnové funkce a musí se často počítat pro každý případ zvlášť.

Dostáváme tak relaci neurčitosti ve tvaru:

$$\langle\psi|(\Delta\hat{A})^2\psi\rangle\langle\psi|(\Delta\hat{B})^2\psi\rangle \geqslant \frac{1}{4}\langle\psi|\hat{C}\psi\rangle^2 \quad . \tag{3.18}$$

Ve zkráceném tvaru pak:

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle \geqslant \frac{1}{4}\langle\hat{C}\rangle^2 \quad , \tag{3.19}$$

nebo také:

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle^{\frac{1}{2}}\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle^{\frac{1}{2}} \geqslant \frac{1}{2}|\langle\hat{C}\rangle| \quad . \tag{3.20}$$

Relace neurčitosti tedy udávají spodní mez součinu kvadratických odchylek dvou nekomutujících veličin (pro komutující veličiny je na pravé straně nula). Záleží však také na vlnové funkci ψ stavu systému, ve kterém chceme tuto dolní mez určit. Pro některé vlnové funkce může být střední hodnota $\langle\hat{C}\rangle$ nulová, ačkoli samotný operátor $\hat{C}$ nulový není.

4. Alternativní odvození relací neurčitosti

Relace neurčitosti lze odvodit i jinak, než přes Schwarzovu nerovnost. Tímto problémem se zabývá jedna z kapitol Skálovy knihy [4], ze které je bráno i následující odvození.

I zde musí platit předpoklad komutační relace hermitovských operátorů $\hat{A}$ a $\hat{B}$:

$$[\hat{A},\hat{B}]=i\hat{C} \quad , \tag{4.1}$$

kde *i* je imaginární jednotka a $\hat{C}$ je hermitovský operátor. Stejná komutační relace musí platit i pro odchylky od střední hodnoty $\Delta\hat{A}=\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle$ a $\Delta\hat{B}=\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle$:

$$[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]=i\hat{C} \quad . \tag{4.2}$$

Střední hodnotu můžeme spočítat jako:

$$\langle\hat{A}\rangle=\int\psi^{*}\hat{A}\psi\,d\tau \quad , \tag{4.3}$$

kde τ probíhá přes celý příslušný prostor.

Dále zavedeme integrál:

$$I(\alpha)=\int|(\alpha\Delta\hat{A}-i\Delta\hat{B})\psi|^{2}d\tau\geqslant 0 \quad , \tag{4.4}$$

kde α je jakékoli reálné číslo, integrujeme přes příslušný prostor a o integrálu víme, že je větší nebo roven nule. Integrál můžeme dále upravit:

$$I(\alpha)=\int\psi^{*}(\alpha\Delta\hat{A}-i\Delta\hat{B})(\alpha\Delta\hat{A}-i\Delta\hat{B})\psi\,d\tau \quad . \tag{4.5}$$

Z toho vidíme, že se dá *I(α)* napsat jako:

$$I(\alpha)=\alpha^{2}\langle(\Delta\hat{A})^{2}\rangle+\alpha\langle\hat{C}\rangle+\langle(\Delta\hat{B})^{2}\rangle \tag{4.6}$$

a aby bylo *I(α)* větší nebo rovno nule, musí nutně platit, že diskriminant *D* rovnice (4.6) musí být menší nebo roven nule:

$$D=\langle\hat{C}\rangle^{2}-4\langle(\Delta\hat{A})^{2}\rangle\langle(\Delta\hat{B})^{2}\rangle\leqslant 0 \quad . \tag{4.7}$$

Ze vztahu (4.7) pak jednoznačně plyne platnost relace neurčitosti ve tvaru:

$$\langle(\Delta\hat{A})^{2}\rangle\langle(\Delta\hat{B})^{2}\rangle\geqslant\frac{1}{4}\langle\hat{C}\rangle^{2} \quad . \tag{4.8}$$

5. Heisenbergova relace neurčitosti jako důsledek obecné relace neurčitosti

Výsledek komutační relace operátoru souřadnice $\hat{x}$ a operátoru hybnosti $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ je:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \quad . \tag{5.1}$$

Pokud do obecné relace neurčitosti (3.20) dosadíme za $\hat{A}$ operátor souřadnice $\hat{x}$, za $\hat{B}$ operátor impulzu $\hat{p}_x$ a výše zmíněný komutátor (5.1), dostaneme Heisenbergovu relaci neurčitosti

$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{p}_x)^2 \rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4} \quad . \tag{5.2}$$

Stejná relace platí i pro souřadnici $\hat{y}$ a hybnost $\hat{p}_y$ ve směru y, či $\hat{z}$ a $\hat{p}_z$.

Jak je shrnuto v [4], pro neurčitosti $\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle$ a $\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle$ existují dva limitní případy splňující (5.2). Nejprve vezmeme částici s co nejpřesnější polohou – její vlnová funkce se blíží δ-funkci. Pak tedy $\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle \to 0$ a z relace (5.2) plyne, že $\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle \to \infty$. Naopak, vezmeme-li delokalizovanou částici s vlnovou funkcí blížící se rovinné vlně $\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle \to \infty$, nutně musí platit $\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle \to 0$. Tedy je-li částice lokalizovaná v souřadnicovém prostoru, je delokalizovaná v impulzovém a naopak. Podobný jev je znám i z optiky (více viz [4]).

6. Dvě silnější relace neurčitosti

Odvození platnosti dvou nových relací neurčitosti lze najít například ve článcích Skály a Kapsy [4], [5] a [6].

Pro jednoduchost a názornost v [5] uvažovali pouze jednu prostorovou souřadnici x a čas t. Veličinou popisující výsledek měření x v čase t je hustota pravděpodobnosti $\rho(x,t)$ splňující normalizační podmínku:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho \, dx = 1 \quad . \tag{6.1}$$

Dále lze předpokládat, že ρ má vlastnost:

$$\lim_{x \to \pm\infty} x^n \rho = 0, \quad n = 0, 1, 2 \quad , \tag{6.2}$$

to znamená, že se v [5] omezili pouze na vázané stavy splňující (2).
Předpokládá se také, že střední hodnotu souřadnice x lze zapsat jako:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho \, dx \quad . \tag{6.3}$$

Vzhledem k platnosti podmínky (1) by měla platit i rovnice kontinuity:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0 \quad , \tag{6.4}$$

udávající vztah mezi hustotou pravděpodobnosti $\rho(x,t)$ a hustotou toku pravděpodobnosti $j(x, t)$.

Nyní zavedeme reálnou funkci $s_2 = s_2(x, t)$, pro niž platí:

$$\rho = e^{-2 s_2 / \hbar} \quad , \tag{6.5}$$

neboli tedy:

$$s_2 = -\frac{\hbar}{2} \ln \rho \quad , \tag{6.6}$$

kde $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$ je redukovaná Planckova konstanta (ale jak uvádí v [5], je možné zvolit libovolnou kladnou reálnou konstantu, je to otázka jednotek).

Analogicky s klasickou mechanikou kontinua lze hustotu toku pravděpodobnosti v jedné dimenzi napsat jako:

$$j = \rho v \quad , \tag{6.7}$$

kde v je „rychlost" daná v klasické mechanice rovnicí $v = p/m$, ve které $p = \partial S/\partial x$ je hybnost, m je hmotnost částice a S je akce z Hamiltonova principu.

Přejdeme-li z klasické mechaniky do kvantové, nahradíme funkci S jinou reálnou funkcí $s_1 = s_1(x, t)$ a pro hustotu toku pravděpodobnosti dostaneme:

$$j = \rho \frac{\partial s_1 / \partial x}{m} \quad . \tag{6.8}$$

Nyní můžeme zavést komplexní funkci:

$$\psi = e^{(is_1 - s_2)/\hbar} \quad . \tag{6.9}$$

Hustotu pravděpodobnosti a hustotu toku pravděpodobnosti pak můžeme psát ve tvaru známém z kvantové mechaniky:

$$\rho = |\psi|^2 \tag{6.10}$$

a

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \tag{6.11}$$

Komplexní funkce ψ je tedy vlnová funkce z kvantové mechaniky a dává informaci o tom, v jakém stavu je daný kvantový systém, podobně jako dvojice funkcí j a ρ, či právě s_1 a s_2.

Heisenbergova relace neurčitosti (5.2) má tvar:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4} \quad , \tag{6.12}$$

kde v tomto značení je:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \langle x \rangle)^2 |\psi|^2 dx \tag{6.13}$$

a

$$\langle (\Delta p)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \langle \hat{p} \rangle \right) \psi \right|^2 dx \quad . \tag{6.14}$$

Dosadíme-li do vztahu (6.14) funkci ψ ve tvaru (6.9), můžeme rozdělit $\langle (\Delta p)^2 \rangle$ na dvě části:

$$\langle (\Delta p_1)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial s_1}{\partial x} - \langle \frac{\partial s_1}{\partial x} \rangle \right)^2 e^{-2 s_2/\hbar} dx \tag{6.15}$$

a

$$\langle (\Delta p_2)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial s_2}{\partial x} \right)^2 e^{-2 s_2/\hbar} dx \quad . \tag{6.16}$$

Dvě nové relace neurčitosti:

Heisenbergovu relaci neurčitosti (6.12) lze tedy nahradit dvěma relacemi neurčitosti pro $\langle(\Delta p_1)^2\rangle$ a $\langle(\Delta p_2)^2\rangle$.

Pro další odvozování využijeme Schwarzovu nerovnost (2.1) pro skalární součin $(u,v)=\int u^* v\,dx$ dvou komplexních funkcí *u* a *v* ve tvaru:

$$(u,u)(v,v)\geqslant|(u,v)|^2 \quad . \tag{6.17}$$

Vhodně zvolíme nejprve:

$$u=\Delta x\sqrt{\rho} \quad \text{a} \quad v=\left(\frac{\partial s_1}{\partial x}-\left\langle\frac{\partial s_1}{\partial x}\right\rangle\right)\sqrt{\rho} \quad , \tag{6.18}$$

což vede k první relaci neurčitosti:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p_1)^2\rangle\geqslant\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\Delta x\left(\frac{\partial s_1}{\partial x}-\left\langle\frac{\partial s_1}{\partial x}\right\rangle\right)^2 e^{-2s_2/\hbar}dx\right]^2 \quad . \tag{6.19}$$

Jak ukázali v [5], funkce $p=\frac{\partial s_1}{\partial x}$ je skutečně hybnost a relace (6.19) má tedy podle nich obvyklý význam známý z matematické statistiky. Dále lze vidět, že výraz na pravé straně nerovnosti (6.19) je větší nebo roven nule (podle tvaru funkcí s_1 a s_2).

Abychom dostali druhou novou relaci neurčitosti, musíme do Schwarzovy nerovnosti (6.17) za *u* a *v* dosadit:

$$u=\Delta x\sqrt{\rho} \quad \text{a} \quad v=\left(\frac{\partial s_2}{\partial x}-\left\langle\frac{\partial s_2}{\partial x}\right\rangle\right)\sqrt{\rho} \quad . \tag{6.20}$$

Dostaneme tedy relaci:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p_2)^2\rangle\geqslant\left[\int_{-\infty}^{+\infty}(x-\langle x\rangle)\left(\frac{\partial s_2}{\partial x}-\left\langle\frac{\partial s_2}{\partial x}\right\rangle\right)^2 e^{-2s_2/\hbar}dx\right]^2 \quad . \tag{6.21}$$

Z podmínky (6.2) plyne, že výraz na pravé straně lze upravit na tvar:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p_2)^2\rangle\geqslant\left(\int_{-\infty}^{+\infty}x\frac{\partial s_2}{\partial x}e^{-2s_2/\hbar}dx\right)^2 \tag{6.22}$$

a z výpočtu integrálu (při němž bylo využito podmínky (6.1) i podmínky (6.2)):

$$\int_{-\infty}^{+\infty}x\frac{\partial s_2}{\partial x}e^{-2s_2/\hbar}dx=\left[\frac{-\hbar}{2}x e^{-2s_2/h}\right]_{x=-\infty}^{+\infty}+\frac{\hbar}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-2s_2/\hbar}dx=\frac{\hbar}{2} \tag{6.23}$$

dostaneme relaci ve tvaru:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p_2)^2\rangle\geqslant\frac{\hbar^2}{4} \quad , \tag{6.24}$$

kde na pravé straně je kladná konstanta nezávisející na funkci s_2 nebo ρ.

Sečteme-li tedy obě relace neurčitosti ((6.19) a (6.24)), dostaneme relaci:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle \geqslant \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \Delta x \left(\frac{\partial s_1}{\partial x} - \left\langle\frac{\partial s_1}{\partial x}\right\rangle\right)^2 e^{-2 s_2/\hbar}\, dx\right]^2 + \frac{\hbar^2}{4} \qquad (6.25)$$

a pokud na pravé straně vynecháme první člen, dostaneme přímo Heisenbergovu relaci neurčitosti.

Je tedy zřejmé, že relace neurčitosti (6.19) a (6.24) jsou silnější, než odpovídající Heisenbergova relace neurčitosti (6.12).

7. Gaussovské vlnové klubko

V této kapitole zavedeme pojem stavu volné částice, popsaného pomocí Gaussovského vlnového klubka podle [7], a ukážeme, jak pro takovýto stav vypadají konkrétně dvě nové relace neurčitosti odvozené v předchozí kapitole (více viz [7]).

Stav volné částice v čase $t = 0$ popíšeme pomocí vlnové funkce ve tvaru Gaussovského klubka:

$$\psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} e^{\frac{-x^2}{2a^2} + ikx} \quad , \tag{7.1}$$

kde $a > 0$ a k jsou reálné konstanty a řekneme, že energie této částice je:

$$E = \frac{\hbar^2}{4ma^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad . \tag{7.2}$$

Pak vyřešením časové Schrödingerovy rovnice s počáteční podmínkou (7.1)

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x,t) \tag{7.3}$$

dostaneme vlnovou funkci ψ v závislosti na čase:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \frac{\sqrt{1 - \frac{i\hbar t}{ma^2}}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)}} \exp\left\{ \frac{-\left(x - \frac{\hbar k}{m} t\right)^2}{2a^2\left[1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)\right]} + i \left[\frac{kx + \frac{\hbar t x^2}{2ma^2} - \frac{\hbar k^2}{2m} t}{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2} \right] \right\} \quad . \tag{7.4}$$

Ze vztahu (6.6) a (6.9) můžeme určit funkce s_1 a s_2:

$$s_1(x,t) = \hbar k \frac{x + \frac{\hbar t x^2}{2ma^4 k} - \frac{\hbar k}{2m} t}{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2} - \hbar \arctan \frac{\hbar t}{ma^2} \quad , \tag{7.5}$$

$$s_2(x,t) = \frac{\hbar}{2} \left\{ \frac{\left(x - \frac{\hbar k}{m} t\right)^2}{a^2\left[1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]} - \ln \frac{1}{a\sqrt{\pi}\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}} \right\} \tag{7.6}$$

a pak i jejich derivace:

$$\frac{\partial s_1}{\partial x}=\hbar k \frac{1+\frac{\hbar t x}{m a^4 k}}{1+\left(\frac{\hbar t}{m a^2}\right)^2} \quad , \tag{7.7}$$

$$\frac{\partial s_2}{\partial x}=\frac{\hbar\left(x-\frac{\hbar k}{m}t\right)}{a^2\left[1+\left(\frac{\hbar t}{m a^2}\right)^2\right]} \tag{7.8}$$

Velká výhoda vlnové funkce ve tvaru Gaussovského klubka je jednoduchost středních hodnot hybnosti a souřadnice:

$$\langle \hat{p}\rangle=\left\langle\frac{\partial s_1}{\partial x}\right\rangle=\hbar k \quad , \tag{7.9}$$

$$\langle x\rangle=\frac{\hbar k}{m}t \quad . \tag{7.10}$$

Dále můžeme vypočítat střední kvadratickou odchylku polohy:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle=\frac{a^2}{2}\left[1+\left(\frac{\hbar t}{m a^2}\right)^2\right] \tag{7.11}$$

a pomocí vztahů (6.15) a (6.16) i střední kvadratickou odchylku obou částí hybnosti $\langle(\Delta p_1)^2\rangle$ a $\langle(\Delta p_2)^2\rangle$:

$$\langle(\Delta p_1)^2\rangle=\frac{\hbar^4 t^2}{2 m^2 a^6\left[1+\left(\frac{\hbar t}{m a^2}\right)^2\right]} \quad , \tag{7.12}$$

$$\langle(\Delta p_2)^2\rangle=\frac{\hbar^2}{2 a^2\left[1+\left(\frac{\hbar t}{m a^2}\right)^2\right]} \quad . \tag{7.13}$$

Jako levou stranu první ze dvou silnějších relací neurčitosti zmíněných v předchozí kapitole dostaneme:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p_1)^2\rangle=\frac{\hbar^4 t^2}{4 m^2 a^4} \quad , \tag{7.14}$$

kde stejný výraz dostaneme výpočtem pravé strany relace (6.19):

$$\left\langle \Delta x\left(\frac{\partial s_1}{\partial x}-\left\langle\frac{\partial s_1}{\partial x}\right\rangle\right)^2\right\rangle^2=\frac{\hbar^4 t^2}{4 m^2 a^4} \quad . \tag{7.15}$$

To znamená, že tato relace neurčitosti platí s rovnítkem (přímo ve tvaru (7.14)).

Druhá silnější relace neurčitosti je pak dána vztahem:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_2)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \qquad (7.16)$$

a tedy také platí s rovnítkem.

Sečtením relací (7.14) a (7.16) dostaneme relaci ve tvaru:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^4 t^2}{4 m^2 a^4} + \frac{\hbar^2}{4} \quad , \qquad (7.17)$$

což je vlastně Robertson-Schrödingerova relace neurčitosti (viz kapitola 11). Zajímavým faktem je, že relace (7.17) je rovností pro všechna $t \geq 0$.

Heisenbergovu relaci neurčitosti dostaneme, zanedbáme-li první člen na pravé straně rovnice (7.17).

Jak víme z kapitoly 2, rovnost nastává ve Schwarzově nerovnosti pouze pokud u a v jsou kolineární, tzn. $u = const\ v$, kde $const$ je komplexní číslo. Nicméně nyní jsou funkce s_1 a s_2 reálné a tedy i u a v jsou reálné. Z toho plyne, že i konstanta $const$ musí být reálné číslo nebo reálná funkce času t. Ze vztahů (6.18), případně (6.20) pak vidíme, že funkce s_1 i s_2 musí být kvadratickými funkcemi souřadnice x s koeficienty, které mohou záviset na čase ($\alpha(t)x^2+\beta(t)x+\gamma(t)$).

Jak zmiňuje [7], rovnost bude v relaci (7.16) platit nezávisle na tvaru funkce s_1, což znamená, že rovnosti můžeme dosáhnout pro mnohem větší třídu vlnových funkcí, než plyne z Heisenbergovy, či Robertson-Schrödingerovy relace neurčitosti. Dle [7] je tento fakt zajímavý nejen z teoretického, ale také z experimentálního hlediska.

8. Lineární harmonický oscilátor

V následující kapitole je předveden další příklad využití výpočtů z kapitoly 6, a to pro základní stav lineární harmonického oscilátoru s vlnovou funkcí ve tvaru Gaussovského klubka, jak bylo ukázáno v [8] (Skála, Kapsa, Lužová). Podobné shrnutí těchto výpočtů je uvedeno v Skálově článku [9].

V čase $t = 0$ je výše zmíněná vlnová funkce dána vztahem:

$$\psi(x,t=0)=\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-(\xi-\xi_0)^2/2} \quad , \tag{8.1}$$

kde m, $\hbar$, ω jsou kladné reálné konstanty a

$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x \quad \text{(a tedy } \xi_0=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x_0 \text{)}, \tag{8.2}$$

kde x_0 je střed vlnového balíku.

Energie částice vázané v lineárním harmonickém oscilátoru je dána vztahem:

$$E=\frac{m\omega^2 x_0^2}{2}+\frac{\hbar\omega}{2} \quad . \tag{8.3}$$

Vývoj vlnové funkce v závislosti na čase dostaneme vyřešením časové Schrödingerovy rovnice. Vlnová funkce v jakémkoli čase je pak dána vztahem:

$$\psi(x,t)=\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-i\omega t/2} e^{i(m\omega/\hbar)[x_0^2\cos(\omega t)-2x x_0]\sin(\omega t)/2} e^{-(m\omega/\hbar)[x-x_0\cos(\omega t)]^2/2} \tag{8.4}$$

Dále můžeme vypočítat funkce s_1 a s_2 dle kapitoly 6:

$$s_1(x,t)=-\hbar\omega t/2+(m\omega)[x_0^2\cos(\omega t)-2x x_0]\sin(\omega t)/2 \tag{8.5}$$

$$s_2(x,t)=\frac{\hbar}{4}(\ln\hbar+\ln\pi-\ln m-\ln\omega)+\frac{m\omega}{2}[x-x_0\cos(\omega t)]^2 \tag{8.6}$$

Střední hodnoty hybnosti a souřadnice pak jsou:

$$\langle\hat{p}\rangle=\langle\frac{\partial s_1}{\partial x}\rangle=-m\omega x_0\sin(\omega t) \quad , \tag{8.7}$$

$$\langle x\rangle=x_0\cos(\omega t) \tag{8.8}$$

a střední kvadratické odchylky souřadnice a hybnosti jsou tedy:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega} \quad , \tag{8.9}$$

$$\langle(\Delta p_1)^2\rangle=0 \tag{8.10}$$

a

$$\langle(\Delta p_2)^2\rangle=\frac{\hbar m\omega}{2} \quad . \tag{8.11}$$

Z toho tedy plyne, že relace neurčitosti (6.19) a (6.24) jsou v tomto případě:

$$0 = 0 \tag{8.12}$$

a

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_2)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \quad . \tag{8.13}$$

Platí tedy podobné závěry o tvaru funkcí s_1 a s_2 jako u kapitoly 7.

9. Důsledky relací neurčitosti

Měříme-li trajektorii elektronu ve Wilsonově mlžné komoře, kde známe i jeho rychlost, zdálo by se, že relace neurčitosti jsou porušeny. Nicméně, jak uvádí [4], v tomto případě záleží na přesnosti takového měření. Jsme-li dráhu elektronu schopni určit s přesností v řádu $\Delta x \approx 10^{-6}$, pak jednoduchým výpočtem můžeme z Heisenbergových relací neurčitosti určit odhad přesnosti hybnosti, či rychlosti elektronu. Při rychlosti $v \approx 10^7 m/s$ a hmotnosti $m \approx 10^{-30} kg$ elektronu dosazením do vztahu:

$$\Delta v_x = \frac{\Delta p_x}{m} \quad , \tag{9.1}$$

kde z platnosti Heisenbergovy relace neurčitosti plyne (pro řádový předpokládáme platnost relace neurčitosti s rovnítkem):

$$\Delta p_x = \frac{\hbar}{2 \Delta x} \tag{9.2}$$

dostaneme řádový odhad neurčitosti rychlosti:

$$\Delta v_x \approx 10^2 m/s \quad , \tag{9.3}$$

což je o pět řádů méně než je rychlost elektronu. Tedy jak shrnuje Skála v [4]: „Vzhledem k dosažitelné experimentální přesnosti proto není nutné relace neurčitosti brát v úvahu a lze použít klasický popis.“ .

Pohybujeme-li se však v menším systému, například v atomu vodíku o lineárním rozměru $l \approx 10^{-10} m$, neobejdeme se bez kvantového přístupu zahrnujícího relace neurčitosti. Lineární neurčitost polohy je v tomto případě přibližně rovna *l*. Bez újmy na obecnosti můžeme střední hodnoty souřadnice a hybnosti posadit do 0:

$$\langle x \rangle = 0 \quad , \tag{9.4}$$

$$\langle \hat{p}_x \rangle = 0 \quad . \tag{9.5}$$

Pak lze Heisenbergovu relaci neurčitosti psát ve tvaru:

$$\langle x^2 \rangle \langle p_x^2 \rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4} \quad . \tag{9.6}$$

Po vzoru [4] teď zavedeme kinetickou energii vztahem:

$$T = \left\langle \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} \right\rangle \tag{9.7}$$

a dosazením relace (9.6), kde za $\langle x^2\rangle, \langle y^2\rangle, \langle z^2\rangle$ budeme brát l^2 dostaneme pro kinetickou energii podmínku:

$$T \geqslant \frac{3\hbar^2}{8ml^2} \quad . \tag{9.8}$$

Konkrétně pro atom vodíku zmíněný výše dostaneme řádový odhad minima velikosti kinetické energie zhruba *10 eV*, což odpovídá experimentální skutečnosti, že základní stav atomu vodíku je zhruba *-13,605 eV*. Kdybychom, podle [4], provedli podobně odhad pro pohyb nukleonu v jádře o $l \approx 10^{-14} m$, dostaneme řádový odhad energie *1 MeV*, což je opět ve shodě s experimentem.

Zmenšujeme-li prostor, ve kterém se částice může pohybovat, v důsledku relací neurčitosti vzrůstá její kinetická energie.

10. Historie relací neurčitosti a další relace neurčitosti

Tato kapitola přímo navazuje na kapitolu 1, kde je uvedeno odvození relací neurčitosti tak, jak k němu došel Heisenberg roku 1927. Dále je v kapitole 1 také zmíněno, že Kennard v článku [2] analyzoval Heisenbergovu relaci (1.2) a definoval neurčitost polohy jako standardní odchylku $\sqrt{\sigma_x}$, kde:

$$\sigma_x = \langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle = \langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 \quad , \tag{10.1}$$

podobně pro hybnost:

$$\sigma_p = \langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle = \langle (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 \tag{10.2}$$

a nakonec pomocí Schwarzovy nerovnosti odvodil relaci (1.9) pro čisté stavy:

$$\sigma_p \sigma_x \geqslant \frac{\hbar^2}{4} \quad . \tag{10.3}$$

Znak $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ znamená dle Kennarda očekávanou hodnotu veličiny $\hat{A}$ měřené na systému ve stavu odpovídajícímu normovanému stavovému vektoru $|\psi\rangle$.

V Kennardově relaci nezáleží na tom, jestli na kvantovém systému provádíme měření, či nikoli. Fluktuace pozice σ_x a hybnosti σ_p nelze současně potlačit natolik, aby se dostali pod hranici danou nerovností (10.3), ať měříme, či necháme systém v klidu. Na druhou stranu relace (10.3) neříká vůbec nic o tom, co se se systémem děje při měření. Úvahy Heisenberga (viz [1]) a Kennarda jsou tedy velmi odlišné.

O něco později nezávisle na Kennardovi odvodil vztah (10.3) i Weyl [3], přičemž ve své práci zmiňuje i pomoc Pauliho, který pravděpodobně upozornil právě na možnost odvození relace (10.3) z Weylových poznámek.

Jako příklad tehdejších úvah zde shrnu důkaz, který provedl Weyl v [3].

Důkaz:

Ve stavu reprezentovaném vlnovou funkcí ψ(x) (normalizace: $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi \, dx = 1$) jsou střední hodnoty $x_0 = \langle x \rangle$ a $p_0 = \langle p \rangle$ dány vztahy:

$$x_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} x \psi^* \psi \, dx \quad , \tag{10.4}$$

$$p_0 = \frac{h}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{d\psi}{dx} dx \quad . \tag{10.5}$$

Bez újmy na obecnosti můžeme tyto střední hodnoty posunout do nuly. Střední hodnoty veličin $(x - x_0)^2$ a $(p - p_0)^2$ (značené $(\Delta x)^2$ a $(\Delta p)^2$) můžeme pak psát jako:

$$(\Delta x)^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \psi^*(x)\psi(x)dx \tag{10.6}$$

a

$$(\Delta p)^2 = -h^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}dx = h^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\psi^*(x)}{dx}\frac{d\psi(x)}{dx}dx \quad . \tag{10.7}$$

Jako výsledek chceme dostat rovnici (10.3). Dosadíme-li do ní střední hodnoty, zmíněné výše, dostaneme:

$$\frac{1}{4}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx\right)^2 \leqslant \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\psi^*(x)\psi(x)dx \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\psi^*(x)}{dx}\frac{d\psi(x)}{dx}dx \quad . \tag{10.8}$$

Nerovnost (10.8) je tedy výraz, ke kterému chceme dojít.

Dále Weyl vychází ze Schwarzovy nerovnosti ve tvaru:

$$\left|\int f_1 g_1 dx + \int f_2 g_2 dx\right|^2 \leqslant \left(\int f_1 f_1^* dx + \int g_1 g_1^* dx\right)\left(\int f_2 f_2^* dx + \int g_2 g_2^* dx\right) \quad , \tag{10.9}$$

kam dosazuje: $f_1 = x\psi,\ f_2 = x\psi^*,\ g_1 = \frac{d\psi^*}{dx},\ g_2 = \frac{d\psi}{dx}$. Metodou per partes pak upravuje integrál

$$\int x \frac{d(\psi\psi^*)}{dx}dx = \int \psi^*\psi\, dx \tag{10.10}$$

(člen $x\psi\psi^*$ bude roven nule pro x jdoucí do $\pm\infty$) při parciální integraci přes interval od $-\infty$ do $+\infty$ a tím dostává relaci (10.8). Dále pak dokazuje, že integrály na pravé straně (10.8) konvergují.

Heisenberg zastával názor, že pokud měříme dvě provázané kvantově-mechanické veličiny současně na jednom kvantovém systému, je součin neurčitostí těchto veličin alespoň řádu h (Plankova konstanta). Condon roku 1929 v práci „Postřehy o principu neurčitosti“ poukázal na to, že Heisenbergův princip nemůže platit obecně pro libovolné dvě pozorovatelné (provázané, či nikoli) a že je tedy třeba vymyslet nějakou obecnou formulaci principu neurčitosti. Na tuto výzvu odpověděl Robertson v článku [10], kde uvádí odvození relace neurčitosti pro dvě hermitovské pozorovatelné $\hat{A}(q,p)$ a $\hat{B}(q,p)$ (závisející na poloze q a hybnosti p) a dále aplikaci tohoto vztahu na úhlové momenty. Při odvozování vychází také ze Schwarzovy nerovnosti, podobně jako Weyl, přičemž dosazuje: $f_1^* = (\hat{A} - \hat{A}_0)\psi = f_2$, $g_1 = (\hat{B} - \hat{B}_0)\psi = -g_2^*$. Z toho pak snadno dostaneme požadovaný výsledek:

$$\Delta \hat{A} \cdot \Delta \hat{B} \geqslant \frac{1}{2} \left| \int \psi^* (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \psi \, dx \right| \quad , \tag{10.11}$$

kde $(\Delta \hat{A})^2 = \int \psi^* (\hat{A} - \hat{A}_0)^2 \psi \, dx$. V jiném zápisu je to pak:

$$\sigma_A \sigma_B \geqslant \frac{|\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2}{4} \quad , \tag{10.12}$$

kde $\sigma_A = \langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$ je střední kvadratická odchylka veličiny $\hat{A}$ (obdobně pro $\hat{B}$). Odvození však stále platí pouze pro čisté stavy.

O něco později (1930) pak opět Robertson v [11] a nezávisle na něm Schrödinger v [12] odvodili ještě o něco obecnější formulaci principu neurčitosti (nazývanou „Robertson – Schrödingerova“, či někdy pouze „Schrödingerova“ relace neurčitosti) pro libovolné hermitovské operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ ve tvaru:

$$\sigma_A \sigma_B - \sigma_{AB}^2 \geqslant \frac{|\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2}{4} \quad , \tag{10.13}$$

kde $\sigma_{AB} = \frac{1}{2} \langle \{ \Delta \hat{A}, \Delta \hat{B} \} \rangle = \frac{1}{2} \langle \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle$ je polovina střední hodnoty antikomutátoru.

Zde uvedeme důkaz dle Schrödingera [12] a to opět pouze pro čisté stavy.

Důkaz:

Z hermitovského charakteru veličiny $\hat{A}$ plyne, že očekávaná hodnota $\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi \, dx$ bude vždy reálná. Pro každý hermitovský operátor platí:

$$\int f \hat{A} g \, dx = \int g \hat{A}^* f \, dx \quad . \tag{10.14}$$

Součin dvou hermitovských operátorů není obecně hermitovský, ale lze ho rozdělit na polovinu antikomutátoru („symetrickou část“) a polovinu komutátoru:

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} + \frac{\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}{2} \quad . \tag{10.15}$$

První člen je hermitovský a druhý je antihermitovský (doslovný český překlad je „zkresleně hermitovský“), to jest stane se hermitovským po přenásobení imaginární jednotkou *i*.

Dále Schrödinger využil Schwarzovy nerovnosti ve tvaru:

$$\int f f^* dx \cdot \int g g^* dx \geqslant \left| \int f g \, dx \right|^2 \quad , \tag{10.16}$$

do níž dosadil $f = \hat{B}\psi, \ g = \hat{A}^* \psi^*$, kde $\hat{A}$ a $\hat{B}$ jsou libovolné hermitovské operátory a ψ je libovolná spojitá a normalizovaná funkce v souřadnicovém prostoru. Z toho pak dostal nerovnici:

$$\int \psi^* \hat{B}^2 \psi \, dx \cdot \int \psi^* \hat{A}^2 \psi \, dx \geqslant \left| \int \psi^* \hat{A} \hat{B} \psi \, dx \right|^2 \quad , \tag{10.17}$$

v jiném zápisu:

$$\langle \hat{A}^2 \rangle \cdot \langle \hat{B}^2 \rangle \geqslant |\langle \hat{A} \hat{B} \rangle|^2 \quad . \tag{10.18}$$

Pravou stranu pak rozložíme dle vztahu výše na:

$$\langle \hat{A}^2 \rangle \cdot \langle \hat{B}^2 \rangle \geqslant \left(\frac{\langle \hat{A} \hat{B} + \hat{B} \hat{A} \rangle}{2} \right)^2 + \left| \frac{\langle \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} \rangle}{2} \right|^2 \quad . \tag{10.19}$$

Nahrazením proměnných $\hat{A}$ a $\hat{B}$ za $\hat{A} - \alpha \hat{I}$ a $\hat{B} - \beta \hat{I}$, kde α a β jsou libovolné reálné konstanty a $\hat{I}$ je jednotkový operátor a volbou $\alpha = \langle \hat{A} \rangle$ a $\beta = \langle \hat{B} \rangle$, lze snadno dostat:

$$\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle \geqslant \left(\frac{\langle \hat{A} \hat{B} + \hat{B} \hat{A} \rangle}{2} - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle \right)^2 + \left| \frac{\langle \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} \rangle}{2} \right|^2 \quad , \tag{10.20}$$

tedy po drobné úpravě výslednou relaci (10.13).

V literatuře se však obvykle uvádí pouze slabší verze relací neurčitosti (10.12). Dodonov [13] tvrdí, že to dokonce způsobilo, že silnější verze (10.13) speciálně pro operátory souřadnice a hybnosti byla různými autory „znovuobjevena“.

Nerovnost (10.12) byla dlouhou dobu dokázána pouze pro čisté stavy a hermitovské operátory. Až roku 1945 potvrdili Tamm a Mandelstam [14] její platnost i pro smíšené stavy.

Relace neurčitosti (10.13) pro libovolné (ne nutně hermitovské) operátory byla pak dokázána například v [15] Dodonovem, Kurmyshevem a Man'kem.
Rozšíření relací neurčitosti na vztah pro více než dvě pozorovatelné bylo provedeno roku 1934 v [16] Robertsonem.

Ačkoli byla dokázána platnost relace (10.3), i pro smíšené stavy, je zřejmé, že rovnost nastane pouze pro určité čisté stavy a pro smíšené stavy tedy platí ostrá nerovnost. Záleží však také na tom, jak moc je daný stav blízký čistému stavu – podle toho lze posouvat velikost neurčitosti. První odhad (dle [13] dokázán v [17]) je například:

$$\sqrt{\sigma_p \sigma_x} > \frac{9}{4}\frac{\hbar}{\mu}, \quad \mu = Tr\,\hat{\rho}^2 \quad , \tag{10.21}$$

kde μ je něco jako „stupeň čistoty“ stavu (pro čistý stav je $\mu = 1$).

Vidíme však, že pro $\mu > 8/9$ je nerovnost slabší než (10.3) a tedy tento vztah není ideální. Je tedy vhodnější psát:

$$\sqrt{\sigma_p \sigma_x} > \frac{1}{2}\hbar\,\phi(\mu) \quad , \tag{10.22}$$

kde $\Phi(\mu)$ je monotónně klesající funkce taková, že $\Phi(1) = 1$ a $\Phi(\mu) \to \infty$ pro $\mu \to 0$. Postup pro nalezení takové funkce je uveden v [13] a tato funkce je odlišná pro různé intervaly μ. Interpolací těchto funkcí lze však získat přibližný výraz pro celý interval $0 < \mu \leq 1$, který je dobrou aproximací výše zmíněných funkcí:

$$\tilde{\phi}(\mu) = \frac{4 + \sqrt{16 + 9\mu^2}}{9\mu} \quad . \tag{10.23}$$

Všechny relace, které platí pro $\sigma_p \sigma_x$, platí i pro obecnější výraz $\sigma_p \sigma_x - \sigma_{xp}^2$ (který je možno nazvat „univerzálním kvantovým invariantem“ - viz [13]).

Vidíme tedy, že pokud o kvantovém systému máme nějaké informace navíc (jako například „stupeň čistoty“ stavu atp.), lze zvednout spodní hranici neurčitosti. Z toho plyne i to, že pokud je kvantový systém ve vysoce smíšeném stavu, blízkém stavu popsatelnému pomocí klasické statistické mechaniky, nevyhnutelně musí být pravá strana relace neurčitosti mnohem větší, než Planckova konstanta.

Takzvaný „stupeň čistoty“ stavu můžeme charakterizovat i jinými veličinami, než je μ. Velmi vhodná a přirozená veličina pro tento účel je podle [13] například entropie:

$$S = -Tr(\hat{\rho}\ln\hat{\rho}) = -\sum \rho_m \ln \rho_m \quad . \tag{10.24}$$

Pro smíšené stavy pak dostáváme relaci (odvození viz [13]):

$$(\sigma_p \sigma_x - \sigma_{xp}^2)^{1/2} \geqslant \frac{\hbar}{2}\left(1 + \frac{2}{e^{\beta} - 1}\right) \quad , \tag{10.25}$$

kde β je řešení rovnice $\beta(e^{\beta} - 1)^{-1} - \ln(1 - e^{-\beta}) = S$.

Závěr:

V této práci jsme ukázali důležitost relací neurčitosti a také komplikovanou cestu, která vedla k jejich odvození.

Asi nejdůležitější částí práce je odvození dvou silnějších relací neurčitosti a jejich následné využití ve výpočtu základního stavu lineárního harmonického oscilátoru s vlnovou funkcí ve tvaru Gaussovského klubka. Další zajímavé výsledky by mohlo přinést počítání s excitovanými stavy harmonického oscilátoru, či jejich kombinacemi.

V závěru práce je dán dohromady historický přehled nejdůležitější kroků, které se v oblasti relací neurčitosti udály a je také naznačeno, kam se v této oblasti ubíral poměrně nedávný výzkum. Nejnovější věcí je pak již zmíněné odvození dvou nových relací neurčitosti, které jsou silnější než Heisenbergova, či Robertson-Schrödingerova relace neurčitosti.

Seznam použité literatury:

1. HEISENBERG, W. The actual content of quantum theoretical kinematics and mechanics. *NASA Technical documents* [online]. 1983, s. 172-198. Dostupné z: http://archive.org/details/nasa_techdoc_19840008978

2. KENNARD, E. H. *Zur Quantenmechanik einfacher Bewegungstypen*. Kopenhagen: Zeitschrift für Physik, 1927. ISBN 10.1007/BF01391200. Dostupné z: http://www.springerlink.com/index/10.1007/BF01391200

3. WEYL, H. *The Theory of Groups and Quantum Mechanics*. New York: Dover Publications, 1950, 422 s. ISBN 04-866-0269-9.

4. SKÁLA, L. *Úvod do kvantové mechaniky*. Vyd. 2., V nakl. Karolinum 1. Praha: Karolinum, 2011, 297 s. ISBN 978-80-246-2022-0.

5. KAPSA, V. a L. SKÁLA. Quantum Mechanics, Probabilities and Mathematical Statistics. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*. 2011-06-01, roč. 8, č. 6, s. 998-1005. ISSN 15461955. DOI: 10.1166/jctn.2011.1779. Dostupné z: http://openurl.ingenta.com/content/xref?genre=article

6. SKÁLA, L. a V. KAPSA. Heisenberg uncertainty relations can be replaced by stronger ones. *International Journal of Quantum Chemistry*. 2009, roč. 109, č. 8, s. 1626-1630. ISSN 00207608. DOI: 10.1002/qua.21948. Dostupné z: http://doi.wiley.com/10.1002/qua.21948

7. SKÁLA, L., J. ČÍŽEK a V. KAPSA. Quantum mechanics as applied mathematical statistics. *Annals of Physics*. 2011, roč. 326, č. 5, s. 1174-1188. ISSN 00034916. DOI: 10.1016/j.aop.2010.09.010. Dostupné z: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0003491610001673

8. SKÁLA, L., V. KAPSA, M. LUŽOVÁ Uncertainty relations, 2011, Dosud nepublikováno.

9. SKÁLA, L. a V. KAPSA. Quantum Mechanics and Statistical Description of Results of Measurement. *Theoretical Concepts of Quantum Mechanics* [online]. Mohammad Reza Pahlavani. InTech, 2012, s. 205-224 [cit. 2012-08-01]. ISBN 978-953-51-0088-1. Dostupné z http://www.intechopen.com/books/theoretical-concepts-of-quantum-mechanics/quantum-mechanics-and-statistical-description-of-results-of-measurement.

10. ROBERTSON, H. The Uncertainty Principle. *Physical Review*. 1929, roč. 34, č. 1, s. 163-164. ISSN 0031-899x. DOI: 10.1103/PhysRev.34.163. Dostupné z: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.34.163

11. ROBERTSON, H. P. Minutes of the New York Meeting, February 21 and 22, 1930: 40. A general formulation of the uncertainty principle and its classical interpretation. *Physical Review*. 1930, roč. 35, č. 6, s. 656-671. ISSN 0031-899x. DOI: 10.1103/PhysRev.35.656. Dostupné z: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.35.656

12. SCHRÖDINGER, E. About Heisenberg Uncertainty Relation. *Bulgarian journal of physics*. Dolpněno od: A. Angelow, M.C. Batoni. Sofia, 1999, roč. 26, s. 193-203. ISSN 1310-0157. Dostupné z: http://arxiv.org/abs/quant-ph/9903100v3

13. DODONOV, V. V. a V. I. MAN'KO Generalization of the uncertainty relations in quantum mechanics. MARKOV, M. *Invariants and the evolution of nonstationary quantum systems*. Commack, N.Y.: Nova Science Publishers, c1989, s. 3-102. Trudy Fizicheskogo instituta, v. 183. ISBN 0-941743-49-7.

14. MANDELSHTAM, L. I. a I. E. TAMM. The uncertainty relation between energy and time in nonrelativistic quantum mechanics. J. Phys. (USSR), 1945, roč. 9, s. 249-254.

15. DODONOV, V.V, E.V KURMYSHEV a V.I MAN'KO. Generalized uncertainty relation and correlated coherent states. *Physics Letters A*. 1980, r oč. 79, 2-3, s. 150-152. ISSN 03759601. DOI: 10.1016/0375-9601(80)90231-5. Dostupné z: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0375960180902315

16. ROBERTSON, H. An Indeterminacy Relation for Several Observables and Its Classical Interpretation. *Physical Review*. 1934, roč. 46, č. 9, s. 794-801. ISSN 0031-899x. DOI: 10.1103/PhysRev.46.794. Dostupné z: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.46.794

17. BASTIAANS, M. J. New class of uncertainty relations for partially coherent light. *Journal of the Optical Society of America A*. 1984, roč. 1, č. 7, s. 711-. ISSN 1084-7529. DOI: 10.1364/JOSAA.1.000711. Dostupné z: http://www.opticsinfobase.org/abstract.cfm?URI=josaa-1-7-711