Tomaž Požar
Ledina 3
5230 Bovec
tel: 041-386-159
e-mail: tpozar@hotmail.com

Ljubljana, 15/01/2001

Heisenbergov princip nedoločenosti

Domača naloga za predmet *kvantna mehanika I*

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za matematiko in fiziko
Oddelek za fiziko
Jadranska cesta 19, 1000 Ljubljana

Kazalo

1 Uvod

Pred vami je rešitev domače naloge iz predmeta kvantna mehanika I z naslovom *Načelo nedoločenosti.*

Naloga se glasi:

Izpelji Heisenbergovo načelo nedoločenosti za produkt nedoločenosti poljubnih hermitskih operatorjev A in B.

Poišči valovno funkcijo z minimalnim produktom nedoločenosti lege in gibalne količine.

S pomočjo načela nedoločenosti za lego in gibalno količino oceni energijo osnovnega stanja harmonskega oscilatorja ($H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$).

2 Heisenbergov princip nedoločenosti

2.1 Neenakost Schwarz–Cauchy–Bunjakovski

Za skalarni produkt dveh valovnih funkcij drži neenakost Schwarz–Cauchy–Bunjakovski ali na kratko Schwarzeva neenakost.

$$| \langle \varphi \mid \psi \rangle |^2 \quad \leq \quad \langle \varphi \mid \varphi \rangle \langle \psi \mid \psi \rangle$$

Dokaz:
i) Če je $\varphi = 0 \Rightarrow$

$$\begin{array}{rcl} | \langle 0 \mid \psi \rangle |^2 & \leq & \langle 0 \mid 0 \rangle \langle \psi \mid \psi \rangle \\ 0 & = & 0 \end{array}$$

ii) Če je $\varphi \neq 0$, potem ψ razstavimo na del, ki je pravokoten na φ in na del, ki je z φ vzporeden.

$$\psi = z\varphi + \chi \quad ; \quad \langle \varphi \mid \chi \rangle = 0$$

Najprej poiščemo koeficient z.

$$\langle \varphi \mid \psi \rangle = \langle \varphi \mid z\varphi + \chi \rangle = z \langle \varphi \mid \varphi \rangle + \underbrace{\langle \varphi \mid \chi \rangle}_{=0} = z \langle \varphi \mid \varphi \rangle$$

$$z = \frac{\langle \varphi \mid \psi \rangle}{\langle \varphi \mid \varphi \rangle}$$

Sedaj vidimo, zakaj je bilo potrebno posebej obravnavati primer, ko je $\varphi = 0$, saj bi sicer delili z 0. Poglejmo čemu je enako $\langle \psi \mid \psi \rangle$.

$$\begin{array}{rcl} \langle \psi \mid \psi \rangle & = & \langle z\varphi + \chi \mid z\varphi + \chi \rangle \\ & = & \langle z\varphi \mid z\varphi \rangle + \langle z\varphi \mid \chi \rangle + \langle \chi \mid z\varphi \rangle + \langle \chi \mid \chi \rangle \\ & = & z^* z \langle \varphi \mid \varphi \rangle + z^* \underbrace{\langle \varphi \mid \chi \rangle}_{=0} + z \underbrace{\langle \chi \mid \varphi \rangle}_{=0} + \langle \chi \mid \chi \rangle \\ & = & zz^* \langle \varphi \mid \varphi \rangle + \langle \chi \mid \chi \rangle \end{array}$$

Ker je člen $\langle \chi \mid \chi \rangle$ po definiciji skalarnega produkta večji ali enak 0, lahko gornjo enačbo ocenimo z:

$$zz^* \langle \varphi \mid \varphi \rangle + \underbrace{\langle \chi \mid \chi \rangle}_{\geq 0} \quad \geq \quad zz^* \langle \varphi \mid \varphi \rangle \ .$$

Sedaj lahko prepišemo prejšnjo enačbo in vstavimo koeficient z. Upoštevamo relacijo $xx^* = |x|^2$ in ker je $\langle\varphi \mid \varphi\rangle$ pozitivno realno število, je $\langle\varphi \mid \varphi\rangle^* = \langle\varphi \mid \varphi\rangle$.

$$\begin{aligned}
\langle\psi \mid \psi\rangle &\geq zz^*\langle\varphi \mid \varphi\rangle \\
&\geq \frac{\langle\varphi \mid \psi\rangle}{\langle\varphi \mid \varphi\rangle}\frac{\langle\varphi \mid \psi\rangle^*}{\langle\varphi \mid \varphi\rangle^*}\langle\varphi \mid \varphi\rangle \\
&\geq \frac{|\,\langle\varphi \mid \psi\rangle\,|^2}{\langle\varphi \mid \varphi\rangle}
\end{aligned}$$

Od tu pa z lahkoto dobimo Schwarzevo neenačbo.

$$|\,\langle\varphi \mid \psi\rangle\,|^2 \quad \leq \quad \langle\varphi \mid \varphi\rangle\langle\psi \mid \psi\rangle$$

2.2 Splošna relacija nedoločenosti

2.2.1 Matematične osnove

Operator A je *hermitski*, če velja $A^\dagger = A$.
Operator A je *antihermitski*, če velja $A^\dagger = -A$.

Naj bosta operatorja A in B, s katerima se bomo malo poigrali, odslej hermitska.

Antikomutator $\{A, B\}$ je definiran takole:

$$\{A, B\} = AB + BA \ ,$$

in *je hermitski.*

$$\{A, B\}^\dagger = (AB + BA)^\dagger = (AB)^\dagger + (BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger + A^\dagger B^\dagger = AB + BA = \{A, B\}$$

Komutator $[A, B]$ je definiran takole:

$$[A, B] = AB - BA \ ,$$

in *je antihermitski.*

$$[A, B]^\dagger = (AB - BA)^\dagger = (AB)^\dagger - (BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger = -(AB - BA) = -[A, B]$$

Vsak produkt dveh hermitskih operatorjev AB se da razdeliti na hermitski in antihermitski del

$$AB = \frac{1}{2}\{A, B\} + \frac{1}{2}[A, B] \ ,$$

saj je

$$\frac{1}{2}\{A, B\} + \frac{1}{2}[A, B] = \frac{1}{2}(AB + BA) + \frac{1}{2}(AB - BA) = AB \ .$$

Pokažimo, da so *pričakovane vrednosti hermitskega operatorja realne* $\langle A \rangle \in \Re$.

$$\langle A \rangle = \langle \psi \mid A\psi \rangle = \langle A^\dagger \psi \mid \psi \rangle = \langle A\psi \mid \psi \rangle = \langle \psi \mid A\psi \rangle^* = \langle A \rangle^*$$

Neko število pa je enako konjugiranemu istemu število samo takrat, kadar je realno.

Pričakovane vrednosti antihermitskega operatorja pa so imaginarne $\langle A \rangle \in \Im$.

$$\langle A \rangle = \langle \psi \mid A\psi \rangle = \langle A^\dagger \psi \mid \psi \rangle = \langle -A\psi \mid \psi \rangle = -\langle A\psi \mid \psi \rangle = -\langle \psi \mid A\psi \rangle^* = -\langle A \rangle^*$$

Neko število pa je enako nasprotni vrednosti konjugiranega istega števila samo takrat, kadar je imaginarno.

Kvadrat nedoločenosti je definiran na sledeči način.

$$\langle \hat{A}^2 \rangle = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle + \langle -2A\langle A \rangle \rangle + \langle \langle A \rangle^2 \rangle =$$

$$= \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \delta^2 A \tag{1}$$

2.2.2 Heisenbergov princip nedoločenosti

Naj bosta A in B hermitska operatorja in ψ neka poljubna dana valovna funkcija (stanje). Operatorja naj bosta taka, da po definiciji vrneta[1]:

$$\hat{A} = A - \langle A\rangle = A - \langle \psi \mid A\psi\rangle$$

$$\hat{B} = B - \langle B\rangle = B - \langle \psi \mid B\psi\rangle \ .$$

Vstavimo $\hat{A}\psi$ in $\hat{B}\psi$ v Schwarzevo neenačbo in upoštevamo hermitskost operatorjev A in B.

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}\psi \mid \hat{A}\psi\rangle\langle \hat{B}\psi \mid \hat{B}\psi\rangle &\geq \mid \langle \hat{A}\psi \mid \hat{B}\psi\rangle \mid^2 \\ \langle \psi \mid \hat{A}^\dagger\hat{A}\psi\rangle\langle \psi \mid \hat{B}^\dagger\hat{B}\psi\rangle &\geq \mid \langle \psi \mid \hat{A}^\dagger\hat{B}\psi\rangle \mid^2 \\ \langle \psi \mid \hat{A}^2\psi\rangle\langle \psi \mid \hat{B}^2\psi\rangle &\geq \mid \langle \psi \mid \hat{A}\hat{B}\psi\rangle \mid^2 \end{aligned} \tag{2}$$

Če razdelimo produkt operatorjev na hermitski in antihermitski del, se to pozna pri pričakovani vrednosti – razdeli jo na realni in imaginarni del. Spomnimo se še, da je $\mid a+ib \mid^2 = a^2 + \mid ib \mid^2$.

$$\begin{aligned} \mid \langle \psi \mid \hat{A}\hat{B}\psi\rangle \mid^2 &= \mid \langle \psi \mid (\frac{1}{2}\{A,B\} + \frac{1}{2}[A,B])\psi\rangle \mid^2 \\ &= \mid \frac{1}{2}\underbrace{\langle \psi \mid \{A,B\}\psi\rangle}_{\in\,\Re} + \frac{1}{2}\underbrace{\langle \psi \mid [A,B]\psi\rangle}_{\in\,\Im} \mid^2 \\ &= \frac{1}{4}\underbrace{\langle \psi \mid \{A,B\}\psi\rangle}_{\geq\,0} + \frac{1}{4} \mid \langle \psi \mid [A,B]\psi\rangle \mid^2 \end{aligned} \tag{3}$$

Ker so pričakovane vrednosti $\langle A\rangle$ in $\langle B\rangle$ navadna števila, je

$$[\hat{A},\hat{B}] \ = \ [A,B] \ .$$

Preverimo.

$$\begin{aligned} [\hat{A},\hat{B}] &= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \\ &= (A-\langle A\rangle)(B-\langle B\rangle) - (B-\langle B\rangle)(A-\langle A\rangle) \\ &= AB - A\langle B\rangle - \langle A\rangle B + \langle A\rangle\langle B\rangle - BA + B\langle A\rangle + \langle B\rangle A - \langle B\rangle\langle A\rangle \\ &= AB - BA \\ &= [A,B] \end{aligned}$$

Moda velja omeniti, da podobna relacija za antikomutatorje očitno ne velja.

Sedaj lahko enačbo (3) ocenimo, tako da izpustimo realni del pričakovane vrednosti, ki pa je vsekakor večji ali enak 0.

$$\mid \langle \psi \mid \hat{A}\hat{B}\psi\rangle \mid^2 \ \geq \ \frac{1}{4} \mid \langle \psi \mid [A,B]\psi\rangle \mid^2 \tag{4}$$

Če upoštevamo kar smo že bili povedali o kvadratu nedoločenosti, enačba (1), kaj hitro ugotovimo, kako priti do principa nedoločenosti.

$$\delta^2 A\, \delta^2 B = \langle \psi \mid \hat{A}^2\psi\rangle\langle \psi \mid \hat{B}^2\psi\rangle \tag{5}$$

[1]Na to definicijo glejte kot na operator s strešico, ki je nek nov operator minus njegova pričakovana vrednost pomnožena z operatorjem, ki vrne identiteto. Ker smo pričakovano vrednost, ki je število, pomnožili z identiteto, imamo sedaj na obeh straneh definicije operatorje, kar je tudi prav.

Uporabimo enačbo (2), desno stran zamenjamo z oceno (4), na levi pa uporabimo enakost (5).

$$\delta^2 A\, \delta^2 B \quad \geq \quad \frac{1}{4} \mid \langle \psi \mid [A, B] \psi \rangle \mid^2$$

Naj vam izdam največjo skrivnost, ki jo vidijo le maloštevilni izbranci. Zadnjo enačbo korenimo in dobimo splošno formulacijo Heisenbergovega principa nedoločenosti za nekomutirajoče operatorje.

$$\delta A\, \delta B \quad \geq \quad \frac{1}{2} \mid \langle [A, B] \rangle \mid \tag{6}$$

3 Minimalni produkt nedoločenosti lege in gibalne količine

Kakšni morajo biti pogoji, da je produkt nedoločenosti minimalen? To se zgodi natančno takrat, ko velja v Schwarzevi neenačbi enačaj. Takrat mora biti $\hat{B}$ vzporeden z $\hat{A}$.

$$\hat{B}\psi = z\hat{A}\psi$$

Če vstavimo v enačbo (2) namesto leve strani v gornji enačbi raje desno, takoj uvidimo, da velja enačaj.

To pa seveda še ni zadosten pogoj. Izginiti mora tudi pričakovana vrednost antikomutatorja, saj smo nedoločenost (6) tudi z njim malo povečali. Poglejmo, kaj nam prineseta pravkar ugotovljena pogoja.

$$\begin{aligned}
0 &= \langle\{\hat{A},\hat{B}\}\rangle \\
&= \langle\psi \mid \{\hat{A},\hat{B}\}\psi\rangle \\
&= \langle\psi \mid \hat{A}\hat{B}\psi\rangle + \langle\psi \mid \hat{B}\hat{A}\psi\rangle \\
&= \langle\hat{A}\psi \mid \hat{B}\psi\rangle + \langle\hat{B}\psi \mid \hat{A}\psi\rangle \\
&= \langle\hat{A}\psi \mid z\hat{A}\psi\rangle + \langle z\hat{A}\psi \mid \hat{A}\psi\rangle \\
&= (z+z^*)\langle\hat{A}\psi \mid \hat{A}\psi\rangle
\end{aligned}$$

Ker je $A\psi$ pojuben, mora veljati, da je $(z+z^*)=0$. z je imaginarno število.

Dobili smo pogoj za stanje ψ, ki minimalizira produkt nedoločenosti $\delta A\,\delta B$.

$$\hat{B}\psi = i\lambda\hat{A}\psi \qquad ; \qquad \lambda \text{ realna}$$

Če nas zanima produkt nedoločenosti lege $A = x$ in gibalne količine $B = p$, dobimo naslednjo diferencialno enačbo.

$$\begin{aligned}
(p - \langle p\rangle)\psi &= i\lambda(x - \langle x\rangle)\psi \\
(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} - \langle p\rangle)\psi &= i\lambda(x - \langle x\rangle)\psi
\end{aligned}$$

Rešitev te parcialne diferencialne enačbe je Gaussov valovni paket, ki ima na začetku (pri $t = 0$) minimalen nedoločnostni produkt. Ob kasnejšem času pa pride do disperzije in nedoločenostni produkt ni več minimalen. Gaussovka se s časom znižuje in razširja.

Rešimo gornjo diferencialno enačbo.

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar}{i}\psi' &= i\lambda x\psi - i\lambda\langle x\rangle\psi + \langle p\rangle\psi \\
\psi' &= (\frac{\lambda\langle x\rangle}{\hbar} + \frac{i\langle p\rangle}{\hbar})\psi - \frac{\lambda}{\hbar}x\psi \\
\psi' &= \alpha\psi - \beta x\psi \\
\int_0^\psi \frac{d\psi}{\psi} &= \int_0^x (\alpha - \beta x)dx \\
\ln\psi &= \alpha x - \beta\frac{x^2}{2} + A_1 \\
\psi &= A_2 e^{\alpha x - \beta\frac{x^2}{2}}
\end{aligned}$$

Preoblikujmo potenco eksponentne funkcije tako, da jo dopolnimo do popolnega kvadrata.

$$\begin{aligned} \alpha x - \beta\frac{x^2}{2} &= -\frac{\beta}{2}(x^2 - \frac{2\alpha}{\beta}x) \\ &= -\frac{\beta}{2}(x - \frac{\alpha}{\beta})^2 + \frac{\beta}{2}\frac{\alpha^2}{\beta^2} \end{aligned}$$

Konstantni del pridružimo konstanti A_2.

$$\begin{aligned} \psi &= A_3 e^{-\frac{\beta}{2}(x-\frac{\alpha}{\beta})^2} \\ \psi &= A_3 e^{-\frac{\lambda}{2\hbar}(x-\frac{\lambda\langle x\rangle + i\langle p\rangle}{\hbar}\frac{\hbar}{\lambda})^2} \\ \psi &= A_3 e^{-\frac{\lambda}{2\hbar}(x-\langle x\rangle-\frac{i\langle p\rangle}{\lambda})^2} \\ \psi &= A_3 e^{-\frac{\lambda}{2\hbar}(x^2-2x\langle x\rangle+\langle x\rangle^2+(\frac{i\langle p\rangle}{\lambda})^2+2\langle x\rangle\frac{i\langle p\rangle}{\lambda}-2x\frac{i\langle p\rangle}{\lambda})} \\ \psi &= A_4 e^{-\frac{\lambda}{2\hbar}(x^2-2x\langle x\rangle+\langle x\rangle^2-2x\frac{i\langle p\rangle}{\lambda})} \\ \psi &= A_4 e^{-\frac{\lambda}{2\hbar}(x-\langle x\rangle)^2+\frac{i\langle p\rangle x}{\hbar}} \\ \psi &= A_4 e^{-\frac{\lambda(x-\langle x\rangle)^2}{2\hbar}} e^{i\frac{\langle p\rangle}{\hbar}x} \end{aligned}$$

Če označimo $k_0 = \frac{\langle p\rangle}{\hbar}$ in $4\sigma^2 = \frac{2\hbar}{\lambda}$ dobimo znano obliko Gaussovega valovnega paketa, ki dobi po normiranju obliko

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\sigma}}\, e^{-\frac{(x-\langle x\rangle)^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 x}\ .$$

Le osnovno stanje harmonskega oscilatorja ima minimalen produkt lege in gibalne količine za vse večne čase.

4 Ocena energije osnovnega stanja harmonskega oscilatorja

S pomočjo načela nedoločenosti za lego in gibalno količino

$$\delta x_i \, \delta p_j \;=\; \frac{\hbar}{2}\, \delta_{ij} \tag{7}$$

bomo ocenili energijo osnovnega stanja enodimenzionalnega harmonskega oscilatorja katerega hamiltonian se glasi

$$H \;=\; \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} \,.$$

Za pričakovano vrednost energije velja enačba

$$\langle E\rangle \;=\; \frac{\langle p^2\rangle}{2m} + \frac{1}{2}k\langle x^2\rangle \,. \tag{8}$$

Na grobo ocenimo kvadrata nedoločenosti.

$$\begin{aligned} \delta^2 x &= \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 &\leq& \;\langle x^2\rangle \\ \delta^2 p &= \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2 &\leq& \;\langle p^2\rangle \end{aligned}$$

Na enačbi za pričakovano vrednost energije (8) uporabimo prejšnji oceni.

$$\langle E\rangle \;\geq\; \frac{\delta^2 p}{2m} + \frac{1}{2}k\delta^2 x \,.$$

Uporabimo načelo nedoločenosti (7) in izrazimo $\delta^2 x$.

$$\delta^2 x \;\geq\; \frac{\hbar^2}{4\,\delta^2 p}$$

Dobljeno oceno vstavimo v izraz za pričakovano vrednost energije.

$$\langle E\rangle \;\geq\; \frac{\delta^2 p}{2m} + \frac{k\hbar^2}{8\,\delta^2 p}$$

Da bo krajše pišimo raje $z = \delta^2 p$ in pomnožimo zadnjo enačbo z $8mz$.

$$8mz\langle E\rangle \;\geq\; 4z^2 + km\hbar^2$$

Rešimo kvadratno neenačbo.

$$4z^2 - 8m\langle E\rangle z + km\hbar^2 \;\leq\; 0$$

Ničli sta pri

$$\begin{aligned} z_{1,2} &= \frac{8m\langle E\rangle \pm \sqrt{(8m\langle E\rangle)^2 - 4\cdot 4km\hbar^2}}{2} \\ \delta^2 p_{1,2} &= 4m\langle E\rangle \pm \sqrt{16m^2\langle E\rangle^2 - 4km\hbar^2} \end{aligned}$$

Ker je kvadrat nedoločenosti realen, mora biti izraz pod korenom večji ali enak 0. Označimo frekvenco nihanja harmonskega oscilatorja z $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$.

$$\begin{aligned} 16m^2\langle E\rangle^2 &\geq 4km\hbar^2 \\ \langle E\rangle^2 &\geq \frac{k\hbar^2}{4m} \\ \langle E\rangle &\geq \frac{1}{2}\hbar\omega \end{aligned}$$

Podobno oceno bi dobili, če bi nadomestili $\delta^2 x$ z $\delta^2 p$.