HEISENBERGOVE RELACIJE NEODREĐENOSTI

U klasičnoj mehanici čestica uvijek ima određen položaj i količinu gibanja. Te dvije fizičke veličine su osnovne dinamičke veličine povezane jednadžbom gibanja, tj. Newtonovom dinamikom. Ako znamo sve sile koje djeluju na česticu, i ako znamo položaj i količinu gibanja čestice *u jednom trenutku,* onda potpuno znamo položaj i količinu gibanja čestice u *svakom drugom trenutku.* Staza čestice ima objektivno postojanje; ona postoji čak i onda kada ju ne promatramo.

Za razliku od materijalne čestice, val u klasičnoj mehanici ne može imati *određen položaj i količinu gibanja.* Što se položaja vala tiče, možemo reći da je on određen najpreciznije do iznosa valne duljine, a što se količine gibanja vala tiče, ta veličina gotovo da i nema smisla, kao što nema smisla nekakva *masa vala.* Fizičkog smisla ima samo *tok (fluks)* količine gibanja i energije.

Što onda reći o *kvantu*, koji ima dvojnu narav, čestičnu i valnu? De Broglieve relacije jednoznačno povezuju dvije naravi sa suprotnim svojstvima. Jasno je da takvo povezivanje povlači stanovitu neodređenenost—niti položaj niti količina gibanja kvanta ne mogu biti sasvim određeni. Ovdje je riječ o načelnoj neodređenosti, ne o neodređenosti proizašloj iz nedostatnosti mjerne tehnike i mjernog uređaja. Ta neodređenost je izražena **Heisenbergovim relacijama neodređenosti,** koje kažu da je umnožak neodređenosti koordinate položaja i pripadajuće joj komponente količine gibanja odozdo ograničen fundamentalnom konstantom, Planckovom konstantom.

Izražena formulom, ta relacija ima oblik:

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

Za "mješovite" umnoške nema takvog ograničenja; naprimjer:

$$\Delta x \cdot \Delta p_y \geq 0$$

itd.
U pokusu s dva razreza ("double slit experiment"), elektron se ponaša kao val, sve dok ne ustanovimo kroz koji od dva razreza je prošao. Ako ustanovimo kroz koji je razrez elektron prošao, više nema vala. Ne možemo imati oboje—i interferencijsku sliku i spoznaju kroz koji razrez je dotični elektron prošao.

Same relacije neodređenosti mogu se iskoristiti za numeričku procjenu energije sustava, ili nekih drugih veličina.

Primjer:
Procijenite energiju osnovnog stanja vodikova atoma.

Rješenje:
Ukupna energija je:

$$E = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} - \frac{k e^2}{r}$$

pod pretpostavkom da je jezgra nepomična, tj. da ima "beskonačnu" masu.

Budući da je neodređenost položaja elektrona jednak upravo *r*, stavit ćemo da je, prema Heisenbergovim relacijama,

$$|\vec{p}| = \frac{\hbar}{r}$$

i uvrstiti u izraz za ukupnu energiju. Dobivamo:

$$E(r) = \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{ke^2}{r}$$

Minimizacijom ovoga izraza po varijabli *r*, dobivamo:

$$r \equiv a_0 = \frac{\hbar^2}{mke^2} = 53\ pm \qquad \text{(Bohrov polumjer)}$$

$$E(a_0) = -m\frac{(ke^2)^2}{2\hbar^2} = -13{,}6\, eV$$

Naravno da pomoću relacija neodređenosti nije moguće posve egzaktno izračunati energiju osnovnog stanja određenog sustava, jednostavno zato što ne znamo unaprijed do koje mjere su određene fizičke veličine neodređene. Znamo donju granicu neodređenosti, i to je sve. Ali nam je iz tih relacija potpuno jasno da "kvantno gibanje" ne može prestati postojati, čak ni na temperaturi od 0 K!

Kako dokazati Heisenbergove relacije neodređenosti pomoću Schrödingerove jednadžbe? Jesu li te dvije stvari spojive, i suglasne jedna s drugom?
Da bismo to učinili, moramo posegnuti za malo apstraktnijim matematičkim formalizmom.

HERMITSKI OPERATORI

U "izvodu" Schrödingerove jednadžbe, da bismo nekako de Broglieve relacije s običnom funkcijom koja opisuje jedan sasvim obični, klasični, val, poistovjetili smo količinu gibanja s operatorom

$$\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla} \equiv -i\hbar\left(\vec{i}\,\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\,\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\,\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

Uzmimo, zbog jednostavnosti, da imamo samo jednu prostornu varijablu, *x*, i pripadajući operator količine gibanja

$$p = -i\hbar\frac{d}{dx}$$

Prema prihvaćenom tumačenju valne funkcije, srednja vrijednost fizičkih veličina se računa kao srednja vrijednost pripadajućeg operatora. Tako za operator *p* imamo njegovu srednju vrijednost

$$\langle p\rangle = -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x)\frac{d\Psi(x)}{dx}\,dx$$

Ovdje valja postaviti pitanje zašto bi u navedenom izrazu trebalo derivirati funkciju $\Psi(x)$; zašto ne bismo umjesto toga derivirali funkciju $\Psi(x)$, pa onda izvršili kompleksnu konjugaciju derivacije funkcije? Pitamo se hoće li srednja vrijednost operatora biti realan broj.

Odgovor na ta, i slična pitanja, je sljedeći:

Posve je jasno da rezultat računa, koji bi trebao predstavljati nešto mjerljivo, ne smije ovisiti o tome hoćemo li operatorom djelovati na valnu funkciju, pa onda sve kompleksno konjugirati i pomnožiti s valnom funkcijom, ili ćemo djelovati na valnu funkciju operatorom i pomnožiti s kompleksno konjugiranom valnom funkcijom. Što se tiče operatora količine gibanja, u prethodnom izrazu za njegovu srednju vrijednost možemo izvršiti parcijalnu integraciju, i dobit ćemo:

$$\langle p\rangle = -i\hbar\Psi^*(x)\Psi(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty} + i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\Psi^*(x)}{dx}\Psi(x)\,dx =$$

$$= -i\hbar\Psi^*(x)\Psi(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty}\left(-i\hbar\frac{d\Psi(x)}{dx}\right)^*\Psi(x)\,dx =$$

$$= -i\hbar\Psi^*(x)\Psi(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty}\left(p\Psi(x)\right)^*\Psi(x)\,dx$$

Prvi član na desnoj strani jednadžbe iščezava zbog rubnih uvjeta. Valna funkcija u beskonačnosti mora iščezavati. Dobiveni rezultat pokazuje da je srednja vrijednost operatora količine gibanja neovisna o poretku dviju spomenutih operacija.

Operatori s takvim svojstvom zovu se **hermitski operatori.** **Sve fizičke veličine moraju imati to svojstvo, tj. mora im pripadati hermitski operator.**
Operatori položaja i količine gibanja su hermitski operatori. Jasno je da vlastite vrijednosti hermitskog operatora moraju biti realni brojevi.

VALNA FUNKCIJA KAO VEKTOR

Sjetimo se kako smo prikazivali "obični" vektor u prostoru s tri dimenzije. Uveli smo tri jedinična vektora $\vec{i}$, $\vec{j}$, $\vec{k}$, i svaki vektor prikazali s njegove tri komponente. Pri tome su spomenuti jedinični vektori imali smisao baze. Ta tri vektora možemo i preimenovati, pa ih označiti kao $\vec{e}(1)$, $\vec{e}(2)$, $\vec{e}(3)$, a komponente nekog vektora $\vec{a}$ možemo tada označiti kao $a(1)$, $a(2)$, $a(3)$. Možemo li ovo poopćiti, apstrahirati, pa indeks koji poprima samo tri vrijednosti zamijeniti s kontinuiranom varijablom *x* ? Naravno da pri tome gubimo mogućnost zornog prikazivanja, ali to možemo učiniti. Tako ćemo bazu $\{\vec{e}(x) \;,\; x \in \mathbb{R}\}$ shvatiti samo formalno, a komponente vektora u toj bazi ćemo shvatiti kao funkciju realne varijable *x*. Kodomena same funkcije može biti kompleksna ravnina.

Kako poopćiti skalarni umnožak

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_{i=1}^{3} a(i) \cdot b(i) \quad ?$$

Ako je *i* realna i **kontinuirana** varijabla *x*, i ako komponente vektora mogu biti kompleksni brojevi, onda je jedino logično poopćenje skalarnog umnoška sljedeće:

$$\vec{f} \cdot \vec{g} \equiv (f\, , g) = \int f^*(x) \cdot g(x) d\, x$$

Zašto "lijeva" funkcija u definiciji skalarnog umnoška mora biti kompleksno konjugirana?

Zato da bi skalarni umnožak funkcije sa sobom samom dao kvadrat njezine "duljine", dakle realni broj.

$$(f, f) \equiv \|f\|^2 = \int |f(x)|^2 dx$$

Recimo da operator A djeluje na funkciju f, pri čemu nastaje neka nova funkcija. Naprimjer, deriviranje funkcije napravi novu funkciju. Recimo da napravimo skalarni umnožak te nove s funkcijom g. Pitanje je možemo li isti skalarni umnožak dobiti tako da nekim drugim operatorom B djelujemo na funkciju g, pa onda napravimo skalarni umnožak s funkcijom f?

Možemo. To je zapravo definicija hermitske konjugacije operatora A.

$$(g, A f) = (B g, f) = (A^+ g, f)$$

Vrijedi, dakle, $B = A^+$.
Hermitska konjugacija znači ovo: djeluj na lijevo i pri tome kompleksno konjugiraj operator.

Naprimjer, djelovanje operatora $\frac{d}{dx}$ na lijevo dat će operator $-\frac{d}{dx}$. To se zove parcijalna integracija. Kompleksno konjugiranje ne će promijeniti operator deriviranja. Dakle, vrijedi:

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^+ = -\frac{d}{dx}$$

Sam operator deriviranja **nije hermitski**, zbog promjene predznaka tijekom hermitske konjugacije. Kažemo da je operator deriviranja **antihermitski.** Međutim, ako taj operator pomnožimo s imaginarnom jedinicom *i*, onda će kompleksna konjugacija promijeniti predznak imaginarne jedinice i ukupni će rezultat biti isti predznak kao i prije. Dakle,

$$\left(i\frac{d}{dx}\right)^{+}=i\frac{d}{dx}$$

Znači, operator količine gibanja je hermitski operator. Isto tako i operator položaja, koji se zapravo svodi na množenje funkcije s koordinatom položaja.

Vlastite vrijednosti hermitskog operatora su uvijek realne. Zaista, ako za hermitski operator A vrijedi

$$A f=\lambda f$$

onda vrijedi

$$(f\,,A f)=\lambda\|f\|^2=(A^+ f\,,f)=(A f\,,f)=\lambda^*\|f\|^2 \;\;\Rightarrow\;\; \lambda=\lambda^*$$

Uvijek valja voditi računa o tome da je svojstvo hermitičnosti dobro definirano samo u određenom prostoru funkcija, a **ne** u prostoru **svih zamislivih funkcija**.
Svojstvo hermitičnosti izravno je povezano s određenim rubnim uvjetima.

SVOJSTVA HERMITSKE KONJUGACIJE

1.) $(A+B)^{+}=A^{+}+B^{+}$

2.) $(\lambda A)^{+}=\lambda^{*} A^{+}$

3.) $(A\cdot B)^{+}=B^{+}\cdot A^{+}$

Dokažite !

Jedinični operator I je operator koji djelovanjem na neku funkciju ne napravi ništa, tj. ostavlja funkciju nepromijenjenu.

Kakve veze ima sve ovo s relacijama neodređenosti?

1.) Svaki operator B oblika

$$B=A\cdot A^{+}$$

gdje je A neki, bilo koji, operator, očito je hermitski, i očito ima vlastite vrijednosti **realne i nenegativne.** (Dokažite!)

2.) Od operatora položaja x i količine gibanja p, napravimo nove operatore

$$P=p-\langle p\rangle I \quad , \quad X=x-\langle x\rangle I$$

3.) Očito vrijedi

$$\langle P\rangle=0 \quad , \quad \langle X\rangle=0$$

4.) Napravimo operator

$$B=(P+i\alpha X)\cdot(P-i\alpha X)$$

gdje je α neki realni broj, a *i* imaginarna jedinica. Operator *B* je hermitski i ima vlastite vrijednosti nenegativne.
Izračunajmo srednju vrijednost operatora *B:*

$$\langle B\rangle=\langle P^2\rangle+\alpha^2\langle X^2\rangle-i\alpha\langle[P,X]\rangle$$

No, lako je provjeriti

$$[P,X]=P\cdot X-X\cdot P=-i\hbar I$$

$$\langle P^2\rangle=(\Delta p)^2 \quad , \quad \langle X^2\rangle=(\Delta x)^2$$

tako da vrijedi

$$\langle B\rangle=(\Delta p)^2+\alpha^2(\Delta x)^2+\alpha\hbar$$

Srednja vrijednost operatora *B* je kvadratična funkcija realnog parametra α, pa prema tome ima i svoju najnižu vrijednost. Budući da znamo da ta najniža vrijednost ne može biti negativna, kvadratična funkcija ne smije imati dva realna korijena, tj. diskriminanta te kvadratične funkcije mora biti negativna, ili jednaka 0:

$$\hbar^2-4(\Delta p)^2(\Delta x)^2\leq 0$$

odnosno

$$\Delta p\cdot\Delta x\geq\frac{\hbar}{2}$$

Kako mora izgledati valna funkcija stanja u kojem je umnožak neodređenosti najmanji mogući?