Pázmány Péter Katolikus Egyetem
Információs Technológia és Bionika Kar

"Fides et Ratio"

Az Információ-technika és a Bionika Fizikája
Kvantum fizika 4
2016 Tavasz

Dr. Csurgay Árpád István

Hullám és részecske természet: Mit jelent a hullámfüggvény?

A Kvantummechanika posztulátumai – egy részecskére

1. A fizikai rendszer, mint hullám állapotát egy komplexszám értékű, korlátos egyértékű, folytonos és folytonosan differenciálható hely-idő hullámfüggvény írja le

2. Annak a valószínűsége, hogy egy hullám-függvénnyel jellemzett részecske egy t időpillanatban a $\psi(\mathbf{r}, t)$ állapotfüggvényű rendszerben

az $\mathbf{r}$ pont $\mathrm{d}V = \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$ környezetében legyen található:

$$\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\mathrm{d}V$$

A $\psi^*\psi\mathrm{d}V = |\psi|^2\mathrm{d}V$ jelentése valószínűség.

Ezért $\int_V \psi^*\psi\mathrm{d}V = 1$

3. A megfigyelhető (mérhető) fizikai mennyiségeket a kvantummechanika operátorokkal reprezentálja. A mérés eredményei az operátor sajátértékei.

a) A hely koordináták operátora a koordinátával való szorzás művelete $\mathbf{x} \to x\cdot\,;\quad \mathbf{x}\psi(x,t) = x\cdot\psi(x,t)$

b) A lendület (momentum) operátora: $\mathbf{p} \to -\mathrm{j}\hbar\nabla$

$$p_x = m\dot{x};\to \mathbf{p}_x = -\mathrm{j}\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

c) Klasszikus dinamikai mennyiségek a hely és a lendület koordináták függvényei

Perdület (angular momentum)

$$\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p} \quad \to \quad \mathbf{L} = -\mathbf{r}\times\ -\mathrm{j}\hbar\nabla\ = -\mathrm{j}\hbar\,\mathbf{r}\times\nabla$$

Kinetikus energia

$$E_{\mathrm{kin}} = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 \to \mathbf{E}_{\mathrm{kin}} = -\frac{1}{2m}\ -\mathrm{j}\hbar\nabla\ ^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta;\quad \Delta \equiv \nabla^2$$

Összenergia

$$E = E_{kin} + E_{pot} \to \mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + E_{\mathrm{pot}}(\mathbf{r})$$

4. Ha a rendszer állapota ψ, és mérjük az L mennyiséget, melynek operátora L, akkor a mérés várható értéke (expectation value és a szórás (variance) :

$$\langle L \rangle = \int_V \psi^* \mathbf{L} \psi \, \mathrm{d}V \qquad \Delta L = \sqrt{\langle L^2 \rangle - \langle L \rangle^2}$$

5. A hullámfüggvény időbeli evolúciója. Zárt kvantum-mechanikai rendszer hullámfüggvénye az időben az időfüggő Schrödinger egyenlettel leírt módon fejlődik.

$$\mathrm{j}\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathbf{H} \psi$$

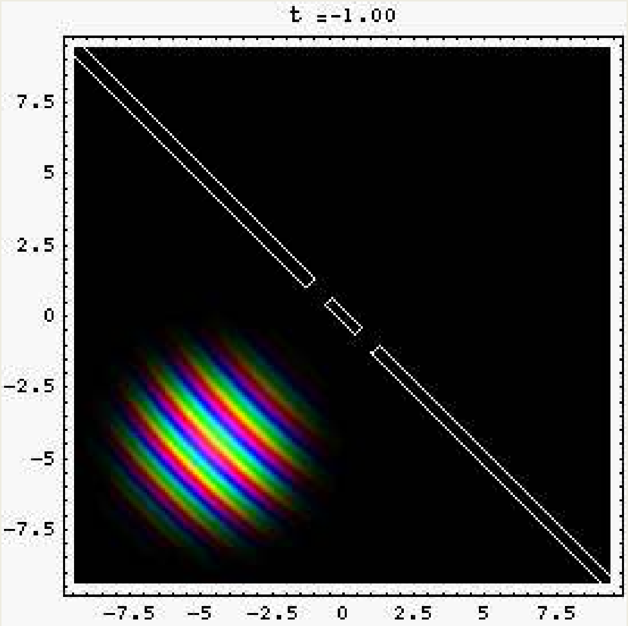
$$\psi_{t_0} - \text{ból} \qquad \psi_t \quad t > t_0 - \text{ra} \;\; \text{meghatározható}$$

Anyag hullám– Tér-idő Dinamika

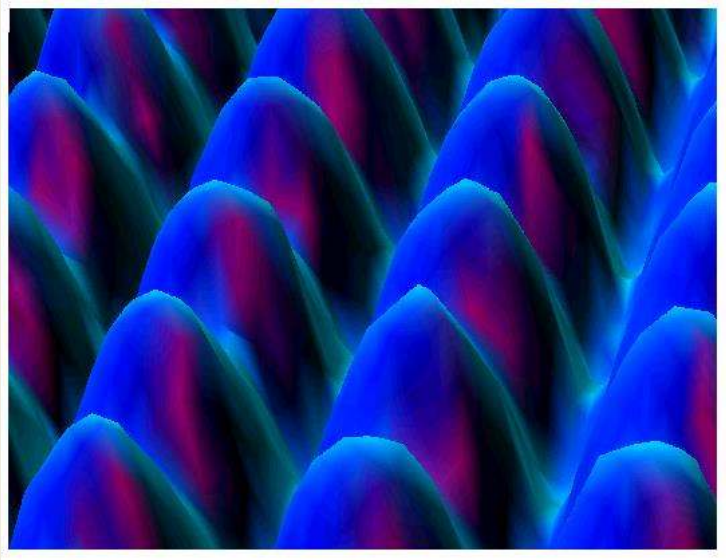
$$\psi(\mathbf{r},t)$$

„Szabad" elektron
Erőmentes térben

„Kötött" elektron
‚dobozba' vagy atomba „kötve"



Mozgó hullám csomag



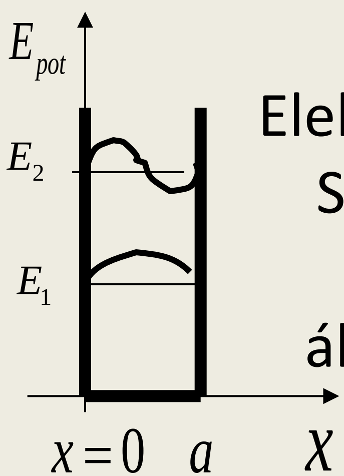
Álló hullám

“Kötött” elektron

Diszkrét energia spektrum

$$E_{k1}, E_{k2}, \ldots, E_{kn}, \ldots$$

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x)\, e^{-\mathrm{j}\frac{E_n}{\hbar}t}$$



Elektron diszkrét Stacionárius Saját-állapotokban

„Szabad” elektron

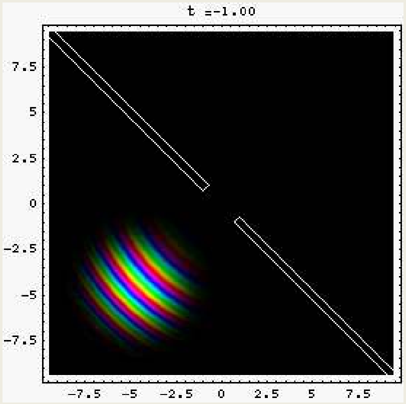
Folytonos energia spektrum

$E(k)$ folytonos függvény

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k)\, e^{\mathrm{j}(kx - \frac{E}{\hbar}t)}\,\mathrm{d}k$$

Hullám csomag

(Lineáris szuperpozició: folytonosan változó hullámszámú síkhullámok)



A legegyszerűbb szabad elektron: egydimenziós erőmentes térben mozgó hullámcsomag

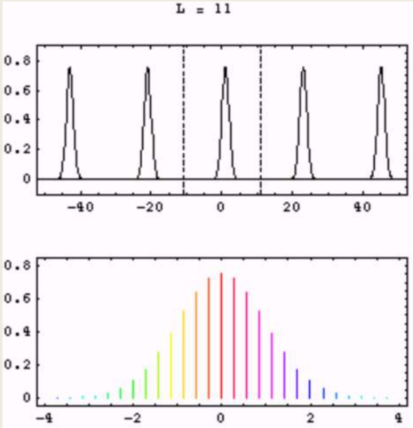
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=E\psi(x),$$

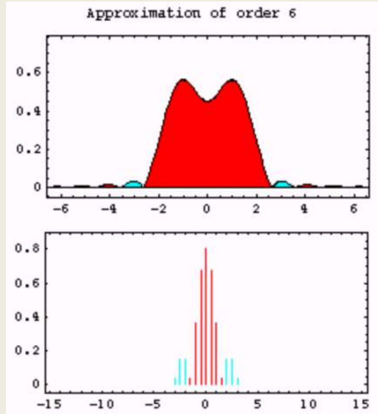
$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}=-\frac{2mE}{\hbar}\psi=-k^2\psi,\quad \text{where}\quad k=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}.$$

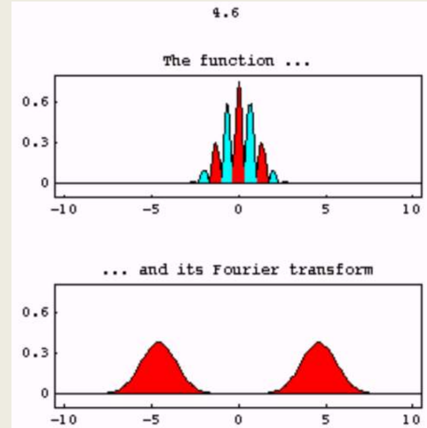
$$\psi_k(x)=A_k\,\mathrm{e}^{\mathrm{j}kx},\qquad E_k=\frac{\hbar^2}{2m}k^2.\qquad E=h\nu$$

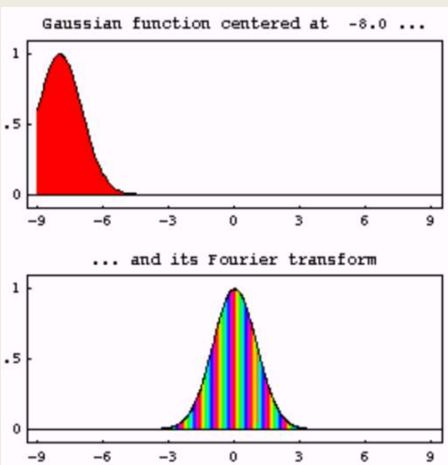
$$\psi(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}A(k)\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{j}\left(kx-\frac{E(k)}{\hbar}t\right)}\mathrm{d}k.\qquad \psi(x,t)$$

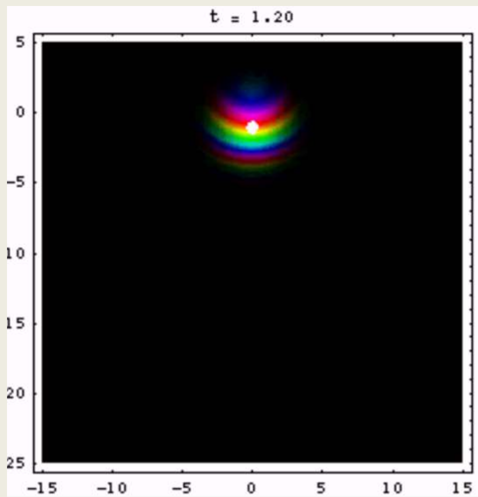
$$A(k,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\left(kx-\frac{E}{\hbar}t\right)}\mathrm{d}x.\qquad A(k,t)$$

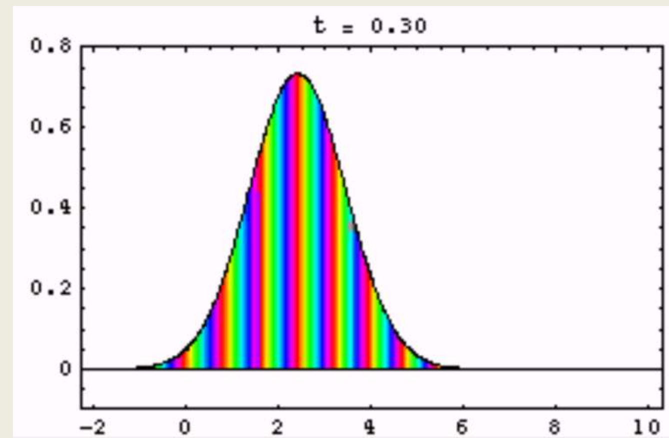

L = 11


Approximation of order 6


4.6
The function ...
... and its Fourier transform


Gaussian function centered at -8.0 ...
... and its Fourier transform


t = 1.20


t = 0.30

$$\psi(x,0)=\begin{cases}\dfrac{1}{\sqrt{a}}\mathrm{e}^{\mathrm{j}\frac{p_0}{\hbar}x}, & \text{if} \quad -\dfrac{a}{2}<x<\dfrac{a}{2}. \\ 0 & \text{otherwise}\end{cases}$$

$$\int_{-a/2}^{+a/2}\psi^*\psi\,\mathrm{d}\,x=1,$$

$$p=\hbar k$$

$$\mathrm{d}\,p=\hbar\,\mathrm{d}\,k$$

$$A(p)=\frac{\sqrt{a}}{h}\frac{\sin\dfrac{a}{2\hbar}(p_0-p)}{\dfrac{a}{2\hbar}(p_0-p)}.$$

$$p_0-\hbar/a<p<p_0+\hbar/a,$$

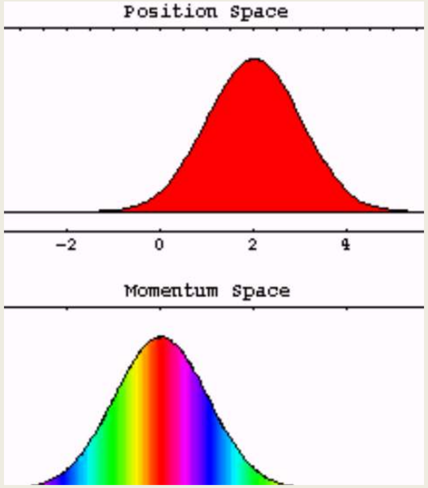
$$\Delta x=a/2, \quad \Delta p=\hbar/a$$

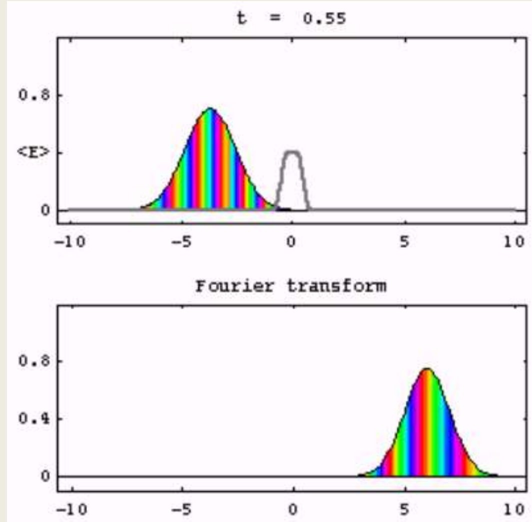
$$\Rightarrow \quad \Delta x\cdot\Delta p\approx\hbar/2.$$

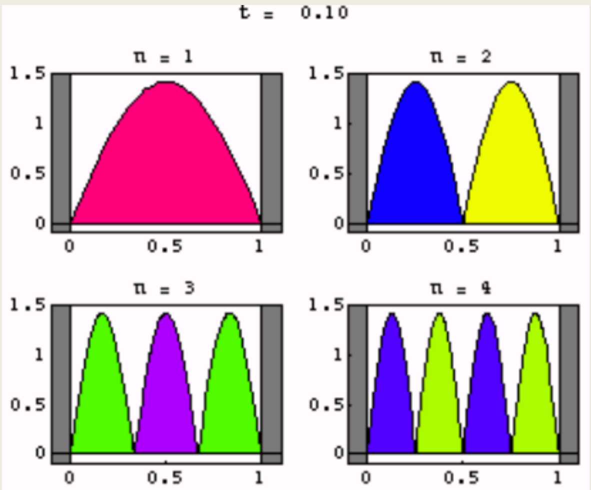
$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{-\alpha(x-x_0)^2} \quad \Leftrightarrow \quad A(k)=B\mathrm{e}^{-\beta(k-k_0)^2}.$$

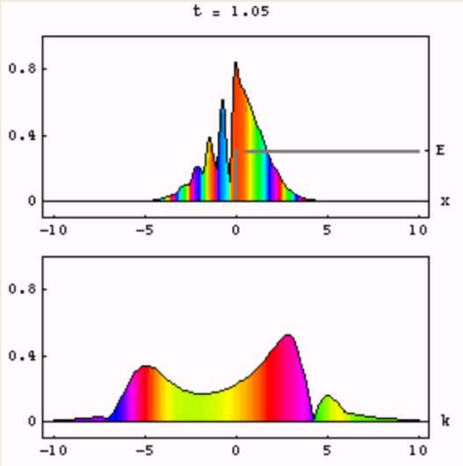
A Heisenberg reláció közelítő illusztrációja .

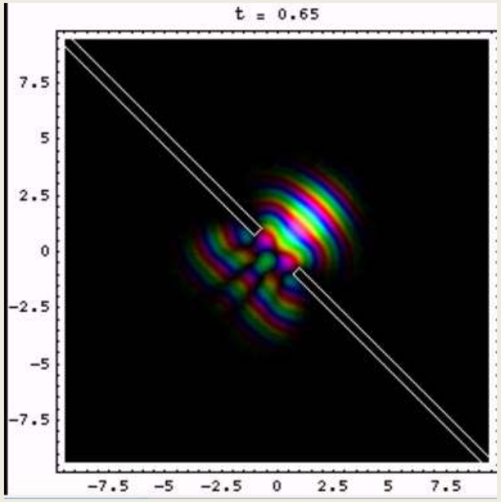
A hullámcsomagot különböző hullámszámú (lendületű) komponensekből állítjuk össze.

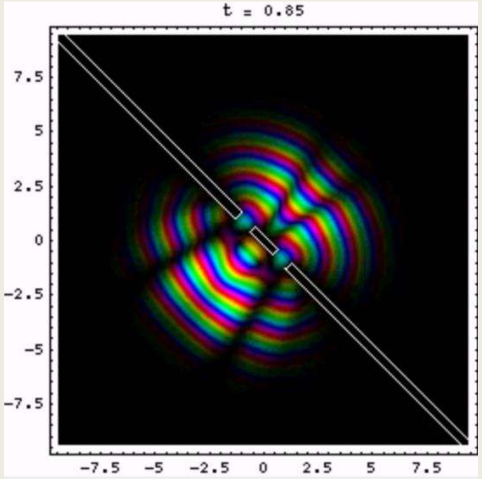

Position Space
-2 0 2 4
Momentum Space

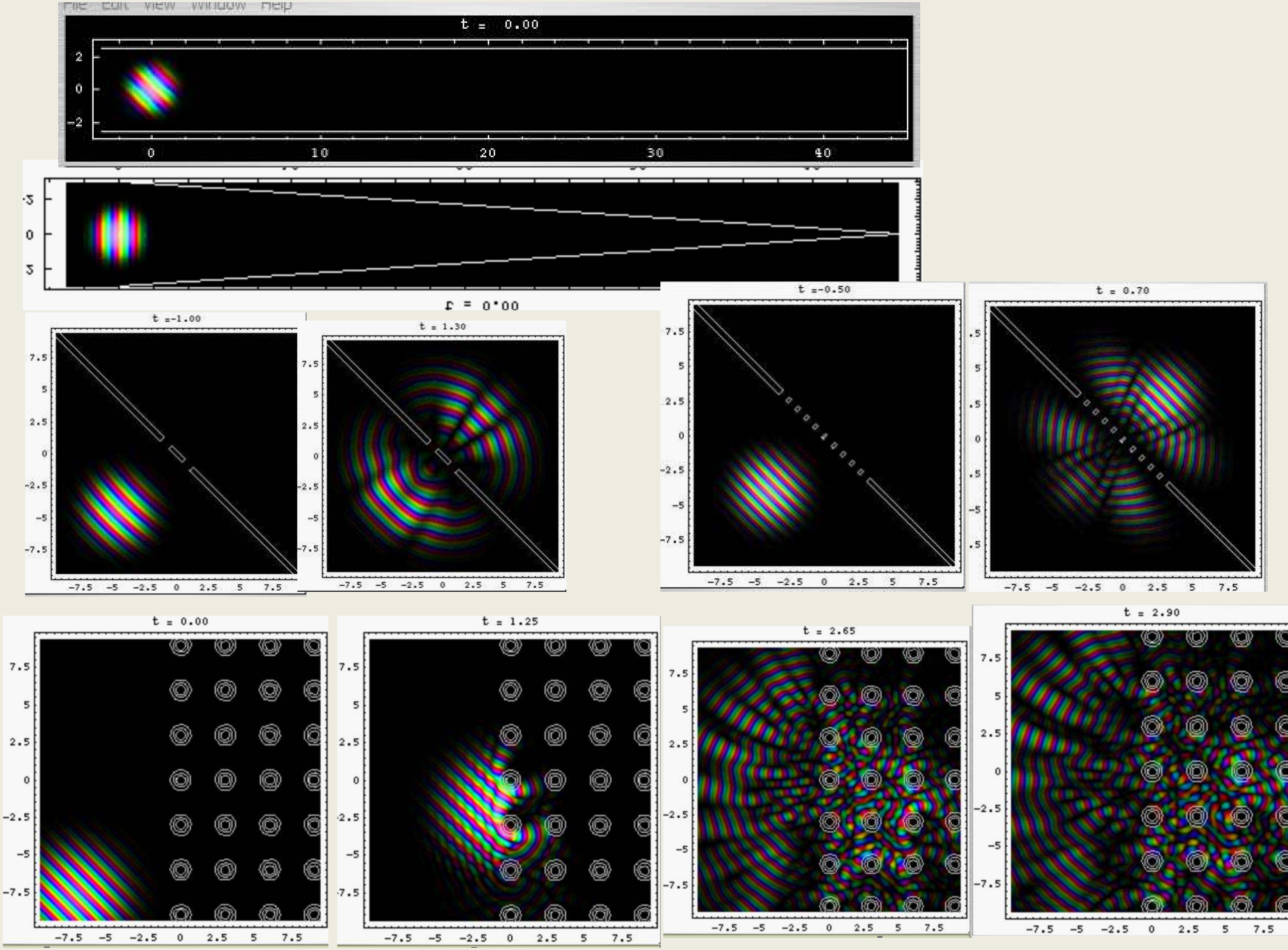

t = 0.55
0.8
<E>
0
-10 -5 0 5 10
Fourier transform
0.8
0.4
0
-10 -5 0 5 10


t = 0.10
n = 1
n = 2
n = 3
n = 4
1.5
1
0.5
0
0 0.5 1


t = 1.05
0.8
0.4
0
E
x
-10 -5 0 5 10
k


t = 0.65
7.5
5
2.5
0
-2.5
-5
-7.5
-7.5 -5 -2.5 0 2.5 5 7.5


t = 0.85
7.5
5
2.5
0
-2.5
-5
-7.5
-7.5 -5 -2.5 0 2.5 5 7.5


t = 0.00
t = 0.00
t =-1.00
t = 1.30
t =-0.50
t = 0.70
t = 0.00
t = 1.25
t = 2.65
t = 2.90

A posztulátumok néhány fontos következményei

1. Planck kvantum

$$e^{-\mathrm{j}\cdot\omega t} = e^{-\mathrm{j}\frac{E}{\hbar}t} \rightarrow \qquad \omega = 2\pi\nu = \frac{E}{\hbar} = \frac{E}{h/2\pi} \qquad E = h\nu = \hbar\omega$$

2. A várható érték időbeli változása

$$\mathrm{j}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \mathbf{H}|\psi\rangle \qquad \langle L\rangle = \langle\psi|\mathbf{L}|\psi\rangle \qquad \frac{\mathrm{d}\langle L\rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle\frac{\partial\psi}{\partial t}\middle|\mathbf{L}\middle|\psi\right\rangle + \left\langle\psi\middle|\mathbf{L}\middle|\frac{\partial\psi}{\partial t}\right\rangle$$

$$\frac{\mathrm{d}\langle L\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{j}}{\hbar}\langle\mathbf{H}\psi|\mathbf{L}|\psi\rangle - \frac{\mathrm{j}}{\hbar}\langle\psi|\mathbf{L}|\mathbf{H}\psi\rangle \qquad \frac{\mathrm{d}\langle L\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{j}}{\hbar}\langle\psi|\mathbf{HL}-\mathbf{LH}|\psi\rangle$$

3. Az operátorok időbeli változása

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{L}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{j}}{\hbar}[\mathbf{H},\mathbf{L}] \qquad \mathbf{HL}-\mathbf{LH} \equiv [\mathbf{H},\mathbf{L}]$$

4. Ehrenfest tétel $\frac{\mathrm{d}\langle L\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{j}}{\hbar}\langle\psi|\mathbf{HL}-\mathbf{LH}|\psi\rangle \qquad L\to\mathbf{p}$

Pontszerű részecske lendülete

$$\mathbf{r}, \mathbf{p} = m\mathbf{v} \qquad E_{pot}(\mathbf{r})$$

$$\frac{\mathrm{d}\langle\mathbf{p}\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{j}}{\hbar}\langle\psi|(\mathbf{Hp}-\mathbf{pH})\psi\rangle \qquad \mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + E_{pot}(\mathbf{r}); \quad \mathbf{p} = -\mathrm{j}\hbar\nabla$$

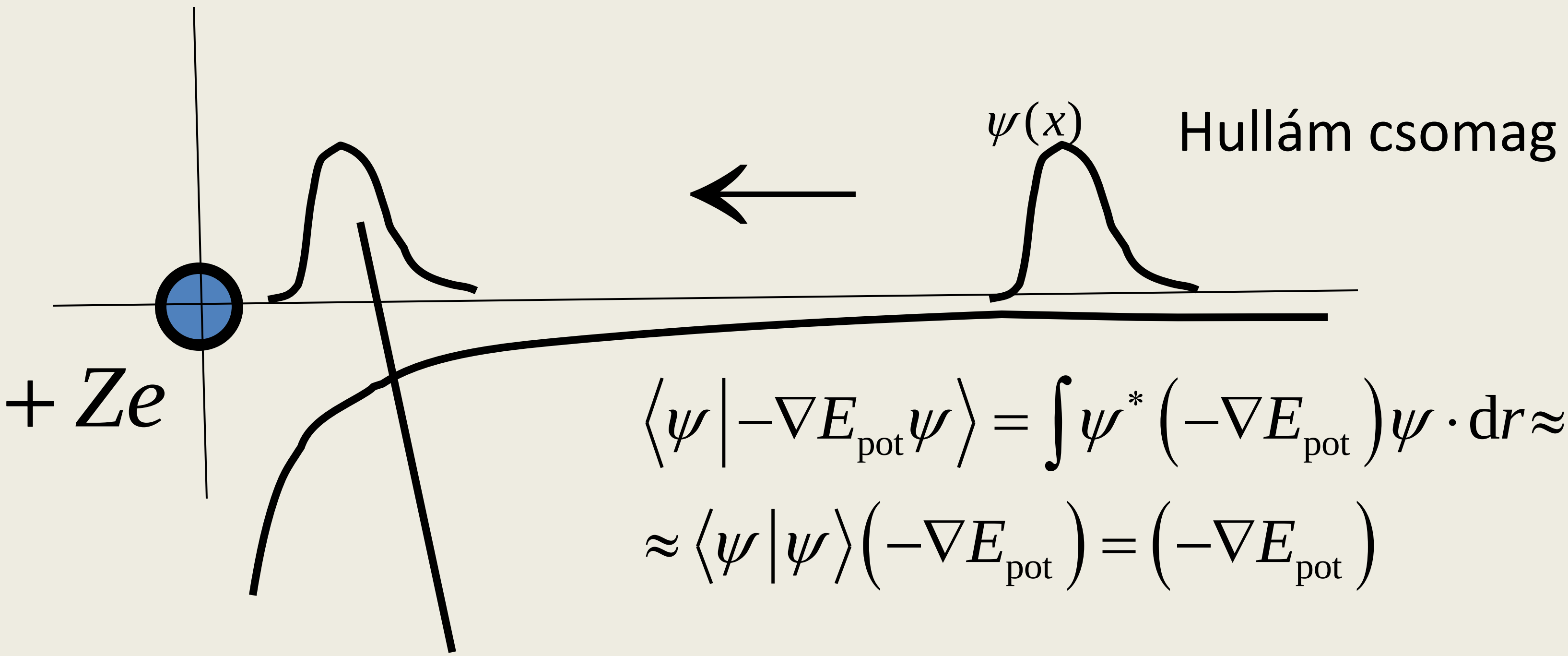
$$(\mathbf{Hp}-\mathbf{pH})|\psi\rangle = -\frac{\hbar}{\mathrm{j}}\nabla E_{\mathrm{pot}}\cdot|\psi\rangle \qquad \frac{\mathrm{d}\langle\mathbf{p}\rangle}{\mathrm{d}t} = \langle\psi|-\nabla E_{\mathrm{pot}}\psi\rangle = \langle-\nabla E_{\mathrm{pot}}\rangle$$

A lendület várható értékének idő szerinti differenciálhányadosa egyenlő az erőhatás várható értékével (Newton)

$$\frac{\mathrm{d}\langle m\mathbf{v}\rangle}{\mathrm{d}t} = \langle\mathbf{Force}\rangle$$

Szabad elektron hullám repül egy proton felé

$$\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\langle \psi | \mathbf{p}\psi\rangle}{\mathrm{d}t} = \langle \psi | \mathbf{p} - \nabla E_{\mathrm{pot}}\psi\rangle \qquad -\nabla E_{\mathrm{pot}} = \partial E_{\mathrm{pot}} / \partial x$$



$$\langle \psi | -\nabla E_{\mathrm{pot}}\psi\rangle = \int \psi^{*}\left(-\nabla E_{\mathrm{pot}}\right)\psi \cdot \mathrm{d}r \approx$$

$$\approx \langle \psi | \psi\rangle\left(-\nabla E_{\mathrm{pot}}\right) = \left(-\nabla E_{\mathrm{pot}}\right)$$

Az erőhatás a hullámcsomagban nem állandó

A várható érték trajektóriája már nem követi a klasszikus részecske trajektóriáját.

5. Heisenberg elv („Határozatlansági” elv)

Ha egyidejűleg két olyan fizikai mennyiséget $(L \text{ és } M)$ mérünk,

melyek operátorai nem „felcserélhetőek”, azaz $\mathbf{LM} - \mathbf{ML} \neq 0$.

Akkor a posztulátumok következménye, hogy

$$\Delta L \cdot \Delta M \geq \left| \frac{1}{2} \langle \psi | (\mathbf{LM} - \mathbf{ML}) \psi \rangle \right| =$$

$$= \left| \frac{1}{2} \int_V \psi^* (\mathbf{LM} - \mathbf{ML}) \psi \, \mathrm{d}V \right|$$

Ez a Heisenberg “Határozatlansági elv” legáltalánosabb alakja, mely szerint az egyidejű mérések “pontosságának” korlátja van.

Alkalmazzuk az elvet a hely x koordinátára és a lendület

x irányú komponensére p_x

$$(\mathbf{p}_x\mathbf{x}-\mathbf{x}\mathbf{p}_x)\psi(x,y,z)=\frac{\hbar}{\mathrm{j}}\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)-\frac{\hbar}{\mathrm{j}}x\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$(\mathbf{p}_x\mathbf{x}-\mathbf{x}\mathbf{p}_x)\psi=\frac{\hbar}{\mathrm{j}}\psi$$

$$(\mathbf{p}_x\mathbf{x}-\mathbf{x}\mathbf{p}_x)|\psi\rangle=\frac{\hbar}{\mathrm{j}}|\psi\rangle$$

$$\Delta x\cdot\Delta p_x\geq\frac{1}{2}\left|\frac{\hbar}{\mathrm{j}}\right|=\frac{\hbar}{2}=\frac{\mathrm{h}}{4\pi}$$

Elektron mágneses térben: Stern-Gerlach Experiment

Elektron ‚spin' mágneses térben

Az elektron spin ‚kvantált'

Elektronok perdülete (spinje) mágneses térben csak két értéket vehet fel : up ↑ vagy down ↓.

Bármilyen irányú a mágneses térben a spint mindig a mágneses térrel egyirányúnak vagy ellenétes irányúnak találjuk.

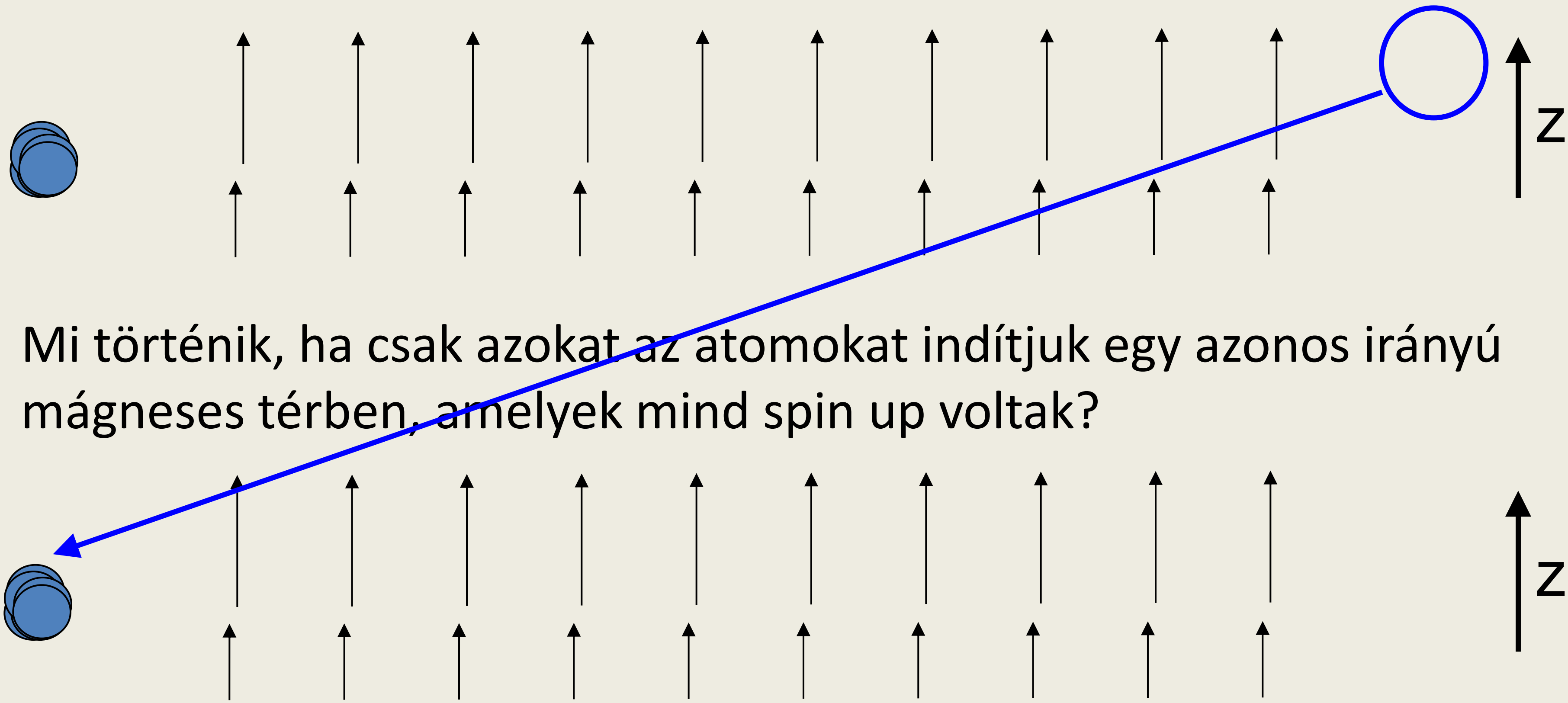
De egymásra merőleges irányú spint a Heisenberg reláció köti össze :

$$s_x s_z \geq \hbar/2; \; s_y s_z \geq \hbar/2; \; s_x s_y \geq \hbar/2$$

Ha x-irányban a spin iránya meghatározott, akkor -->
z –irányban az irány 50/50 százalékban up és down lesz.

Stern-Gerlach Kísérlet

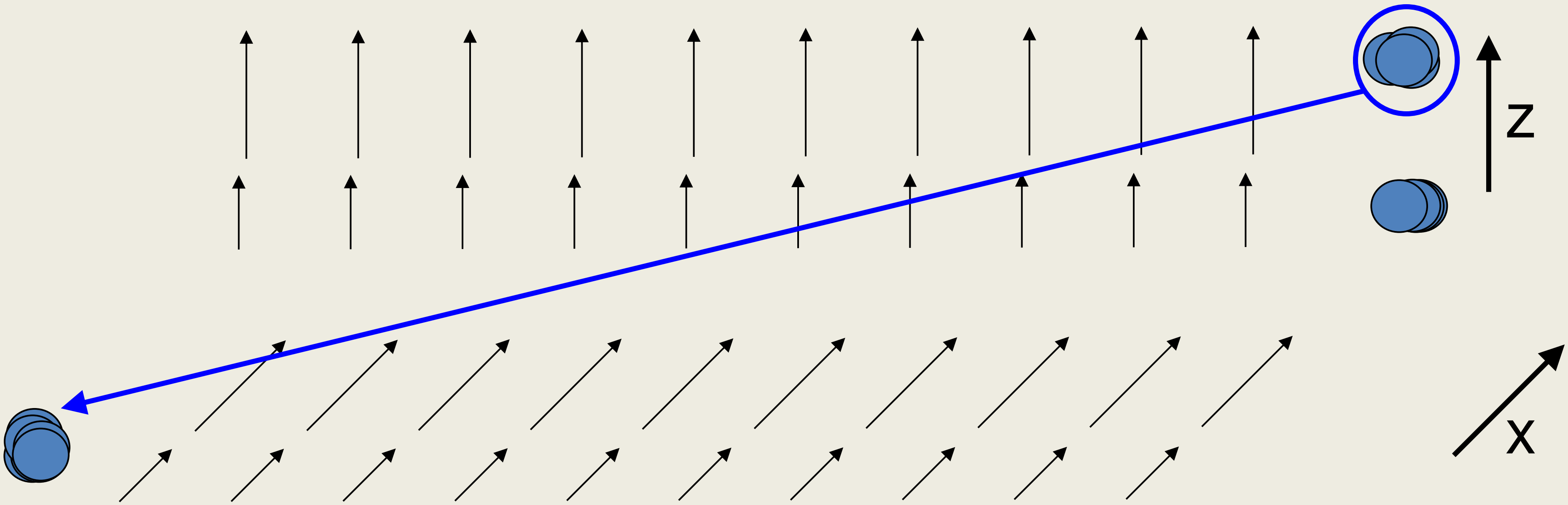
Helyezzünk atomokat (elektronokat) z irányú mágneses térbe – a mágneses tér kétfelé választja őket– spin up és spin down



Mi történik, ha csak azokat az atomokat indítjuk egy azonos irányú mágneses térben, amelyek mind spin up voltak?

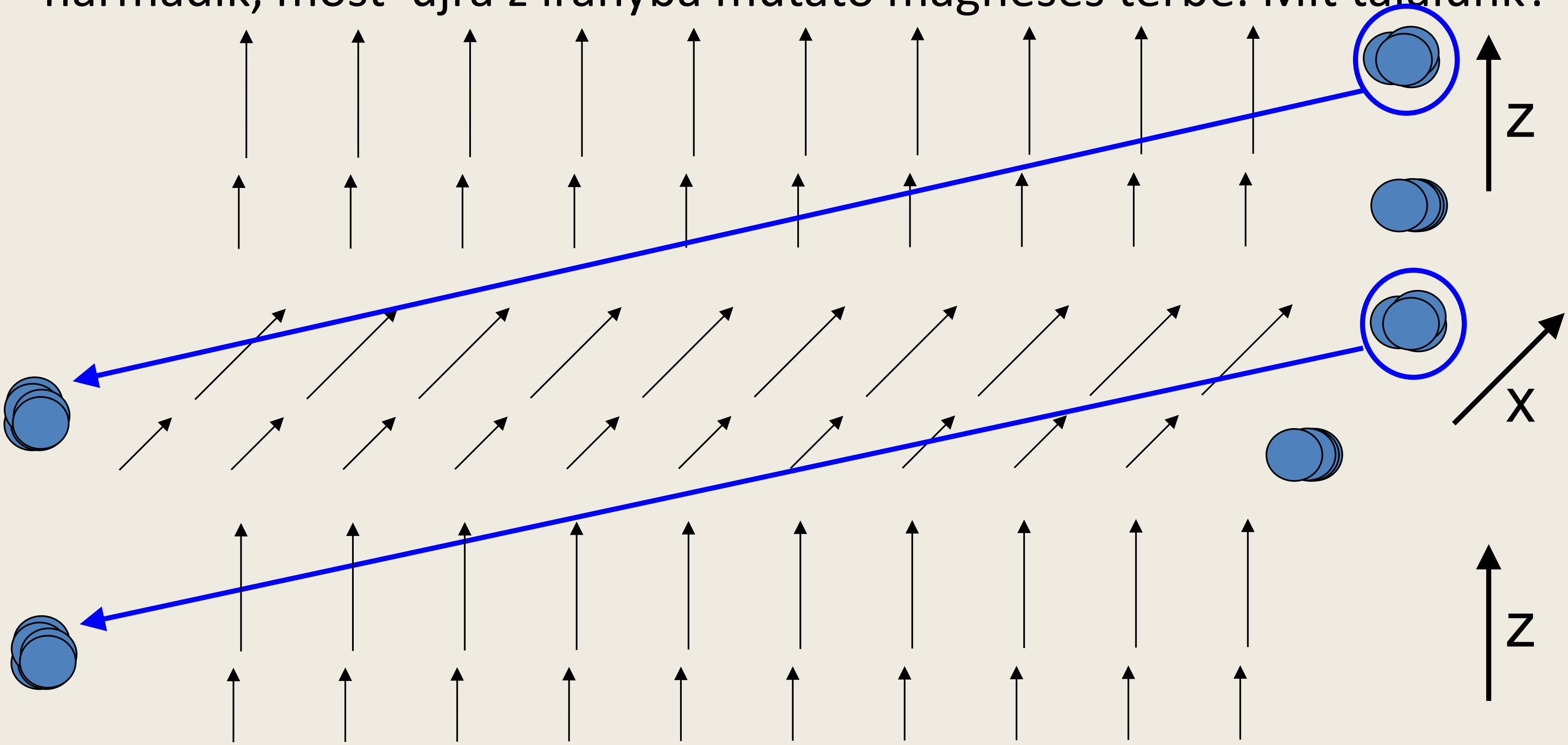
Mindegyik spin up halad (+z)

Második kísérlet: Mi történik, ha a spin up atomokat egy x irányú mágneses térben indítjuk (x merőleges a korábbi z-re)?



Az atomok fele (+x), másik fele (–x) irányban térül el.

Harmadik kísérlet: Vegyük csak azokat az atomokat, amelyek +x Irányban térültek el a második kísérletben , és küldjük őket egy harmadik, most újra z irányba mutató mágneses térbe. Mit találunk?



Az atomok fele (+z), másik fele (–z).