Kvantummechanika X.

Határozatlansági relációk, méréselmélet

Az általános határozatlansági elv: → Legyen két mérhető mennyiségünk: $\hat{A}$ és $\hat{B}$. Ezek variansza (eml.: $\hat{A}$ és $\hat{B}$ hermitikus operátorok!)

$$\sigma_A^2 = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \psi \rangle =$$

$$= \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)\psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)\psi \rangle = \langle f | f \rangle, \text{ ahol } f := (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)\psi$$

→ Hasonlóan:

$$\sigma_B^2 = \langle g | g \rangle; \text{ ahol } g := (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)\psi$$

→ Felhasználjuk az absztrakt vektorokra érvényes Schwarz-egyenlőtlenséget:

$$\left| \int_a^b f^*(x)\, g(x)\, dx \right| \leq \sqrt{\int_a^b |f(x)|^2 dx \int_a^b |g(x)|^2 dx} \implies |\langle f | g \rangle| \leq \sqrt{\langle f | f \rangle \langle g | g \rangle}$$

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 = \langle f | f \rangle \langle g | g \rangle \geq |\langle f | g \rangle|^2$$

→ Emlékezzünk, hogy tetszőleges komplex számra teljesül a következő:

$$z \in \mathbb{C} \longrightarrow |z|^2 = z \cdot z^* = [\mathrm{Re}(z)]^2 + [\mathrm{Im}(z)]^2 \geq [\mathrm{Im}(z)]^2 = \left[\frac{1}{2i}(z - z^*)\right]^2$$

→ Ha megengedjük, hogy $z = \langle f | g \rangle$ (és ezzel $\langle f | g \rangle \in \mathbb{C}$), úgy

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \left[\langle f | g \rangle - \langle g | f \rangle \right] \right)^2$$

→ Vizsgáljuk meg a négyzetes zárójel belső részeit:

$$\langle f | g \rangle = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)\psi | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)\psi \rangle =$$

$$= \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)\psi \rangle = \langle \psi | (\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle \hat{B} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \hat{B} + \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle)\psi \rangle =$$

$$= \langle \psi | \hat{A}\hat{B}\psi \rangle - \langle \hat{B} \rangle \langle \psi | \hat{A}\psi \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \psi | \hat{B}\psi \rangle + \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle \langle \psi | \psi \rangle =$$

$$= \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle \hat{B} \rangle \langle \hat{A} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle = \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle$$

↳

Hasonlóan:

$$\langle g|f\rangle = \langle \hat{B}\hat{A}\rangle - \langle \hat{A}\hat{B}\rangle$$

→ Tehát: $\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle = \langle \hat{A}\hat{B}\rangle - \langle \hat{B}\hat{A}\rangle = \langle [\hat{A},\hat{B}]\rangle$, ahol

$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ → A két operátor kommutátora

⇒ A keresett:

$$\boxed{\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle [\hat{A},\hat{B}]\rangle\right)^2}$$

→ Példa: Heisenberg-féle határozatlansági elv:

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \longrightarrow \sigma_x^2\sigma_p^2 \geq \left(\frac{1}{2i} i\hbar\right)^2 \geq \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \Rightarrow \boxed{\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

→ Valójában minden nem kommutáló operátorra létezik határozatlansági elv. Az ilyen operátorokat inkompatibilis operátoroknak nevezzük

→ Az inkompatibilis megfigyelhető mennyiségek nem rendelkeznek közös sajátfüggvény-rendszerrel.

→ A kompatibilis (kommutáló) mennyiségek rendelkeznek ilyennel. Erre jó példa a hidrogén atom Hamilton-, imp.momentum és $\hat{L}_z$ operátora

<u>Méréselmélet:</u>

→ Heisenberg gondolatkísérlete: A mikroszkóp felbontása a használt fény hullámhosszának nagyságrendjébe esik, pontosabban ϵ nyílásszögű fénynyalább esetén

$$\Delta x = \frac{\lambda}{2\sin\frac{\epsilon}{2}}$$

→ Ekkor a mért résnyíláson szóródó foton $\approx 2\frac{h}{\lambda}\sin\frac{\epsilon}{2}$ nagyságú impulzust ad a résnyílásnak, ekkora lesz tehát Δp_x. Ezzel:

$$\Delta x \Delta p \approx h$$

Energia-idő hat. reláció: $\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$

Bohr-Einstein vita: Gondolatkísérlet a dobozba zárt sugárzással.

→ Dobozban óra → A mutató helyének meghatározása (Δx)

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$$ → pontatlanságot okoz a doboz impulzusában.

→ Ha a mérlegelés időtartama t, akkor a dobozra ható erőben ez

$$\Delta F = \frac{\Delta p}{t} \geq \frac{\hbar}{2t\Delta x}$$ pontatlansághoz vezet.

→ A tömeg mérésének pontatlansága:

$$\Delta m g = \Delta F \longrightarrow \Delta m \geq \frac{\hbar}{2gt\Delta x}$$

→ Az energia bizonytalansága: $\Delta E = \Delta m c^2 \geq \frac{\hbar c^2}{2gt\Delta x}$

→ Az ált. relativitáselmélet szerint egy g nehézségi gyorsuláshoz tartozó gravitációs térben Δx nagyságú elmozdulás t idő alatt az óra olyan Δt nagyságú sietéséhez (v. késéséhez) vezet, melyre

$$\Delta t = \frac{g\Delta x t}{c^2} \Longrightarrow \Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

⇒ Nem relativisztikus kvantummechanikában:

→ Az idő nem dinamikus változó, nem mérhetjük meg egy rendszer idejét.

↳ Ellenkezőleg: az idő a független változó, melytől a dinamikus változók függenek. A fenti egyenlőtlenségben Δt nem egy idő mérés sorozat szórása, hanem felületesen fogalmazva: Δt az az idő, mely alatt a rendszer jelentősen megváltozik.

→ A rendszer változásának mértékét meghatározzuk a $Q(x,p,t)$ idő-szerinti deriváltját:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{Q}\rangle = \frac{d}{dt}\langle\psi|\hat{Q}\psi\rangle = \langle\frac{\partial\psi}{\partial t}|\hat{Q}\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\psi\rangle + \langle\psi|\hat{Q}\frac{\partial\psi}{\partial t}\rangle$$

↳

A Schrödinger-egyenlet: $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \Rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi$

Tehát:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{Q} \rangle = -\frac{1}{i\hbar}\langle \hat{H}\psi | \hat{Q}\psi \rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle \psi | \hat{Q}\hat{H}\psi \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle;$$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle Q \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle}$$

→ Tipikusan $\partial \hat{Q}/\partial t = 0$ → Ezekben az esetekben a változás mértékét tehát az operátor Hamilton-fv-vel vett kommutátora határozza meg.

↳ Ha $\hat{Q}$ kommutál $\hat{H}$-val, akkor Q megmaradó mennyiség.

→ Legyen $A = H$ és $B = Q$ az ált. hat. rel. leírásból és tfh Q nem függ az időtől. Ekkor:

$$\sigma_H^2 \sigma_Q^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle \right)^2 = \left(\frac{1}{2i}\frac{\hbar}{i}\frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2 \left(\frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right)^2$$

→ Egyszerűbben

$$\sigma_H^2 \sigma_Q^2 \geq \frac{\hbar}{2}\left| \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right| \rightarrow \Delta E = \sigma_H \quad \text{és} \quad \Delta t = \frac{\sigma_Q}{\left| \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right|}$$

↳ $\boxed{\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$

→ Δt az az idő, melyre $\hat{Q}$ várható értékének szükséges van, hogy egy szórásnyit megváltozzon.