Hullámcsomagok és a határozatlansági reláció

Nagy Dávid Gergely - I. számítógépes fizika beadandó

2013. január 9.

A Heisenberg határozatlansági reláció

A Heisenberg-féle határozatlansági relációt úgy szokás megfogalmazni, hogy egy részecskére vonatkozó, bizonyos mérhető mennyiség-párok egyszerre való megismerhetőségi pontosságára ad felső limitet. Ilyen mennyiség-pár például a hely és az impulzus, minél pontosabban ismerjük az egyiket, annál bizonytalanabbak vagyunk a másikban.

Gyakran összekeverik a „megfigyelő hatásával” *(observer effect)*, talán mert eredetileg W. Heisenberg - akiről az összefüggés a nevét kapta - is ezt tekintette a jelenség okának [4]. Az observer effect lényege, hogy a mérő apparátus a mérés során megváltoztatja a mérendő mennyiséget. Heisenberg példájával élve, ahhoz hogy egy elektron helyét meg tudjuk mérni, legalább egy fotonnak kölcsönhatásba kell vele lépnie, de ez meg fogja változtatni a részecske impulzusát (p21[4]). Ez egy létező effektus, azonban szigorúan véve nincs köze a határozatlansági relációhoz.

Szintén félreértésre ad okot az a megfogalmazás, hogy nem lehet egyszerre megmérni egy részecske ezen két tulajdonságát. Egyrészt, a kvantummechanika mérést leíró posztulátuma szerint, egy adott fizikai mennyiség mérésekor az ahhoz tartozó operátor sajátfüggvényeire omlik össze a hullámfüggvény és a mérés eredményeként az ahhoz tartozó sajátértéket kapjuk. Nincs szó olyan esetről, hogy mi történne ha egyszerre két fizikai mennyiséget mérnénk. Másrészt viszont, különböző időpillanatokra semmi akadálya hogy bármilyen pontossággal megmérhessük a konjugált mennyiségeket. Operacionális szempontból nem is egy adott részecskéről beszélünk, hanem inkább egy adott hullámfüggvényről:

> The experimental test of the inequality (8.33) does not involve simultaneous measurements of Q and P, but rather it involves the measurement of one or the other of these dynamical variables on each independently prepared representative of the particular state being studied.
>
> *L.E. Ballentine p226* of [2]

Így talán pontosabb lenne az a megfogalmazás, hogy semmilyen hullámfüggvény esetén nem lehet a konjugált fizikai mennyiségek (Born-tételből következő) szórásainak szorzata kisebb mint egy adott érték, vagy szűkebben, nem lehet mindkettőnek egyszerre értéke. Például a hely és az impulzus esetén, mivel tér reprezentációban az impulzus operátor sajátfüggvényei a síkhullámok (mivel hely reprezentációban az impulzus operátor a hely szerinti deriváló operátor, aminek a sajátfüggvényei az exponenciálisok),

$$|\psi_{p_n}\rangle \propto e^{\frac{i}{\hbar}p_n x}$$

így ha a hullámfüggvényt ezen a bázison akarjuk kifejteni akkor a lineáris kombinációjukat kell venni

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_{p_n}\rangle$$

Ez a folytonos spektrum miatt egy integrál lesz

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) e^{\frac{i}{\hbar}px}\, dp$$

ahol a c(p) együtthatók az impulzus térbeli állapot elemei és ahol észrevehetjük, hogy ez konstansok erejéig a Fourier transzformáció képlete. Mivel a hely- és az impulzus térbeli hullámfüggvények egymás Fourier transzformáltjai, így vonatkozik rájuk a határozatlansági elv, amely nagy vonalakban azt mondja, hogy minél kiterjedtebb egy függvény valós térben, annál lokalizáltabb lesz Fourier térben és fordítva, tehát ha egy $x(t)$ függvény kiterjedtsége kb Δt akkor

$$\Delta t \Delta \omega \geq const$$

ahol $\Delta\omega$ a $\mathscr{F}(x(t))$ függvény kiterjedtségét jellemző szám. Ennek pontos formájára sok különböző tétel van, pl a Pinsky féle[5]

$$\Delta t \Delta \omega \geq \frac{1}{16\pi^2}$$

ahol a kiterjedtség mértéke a második momentum

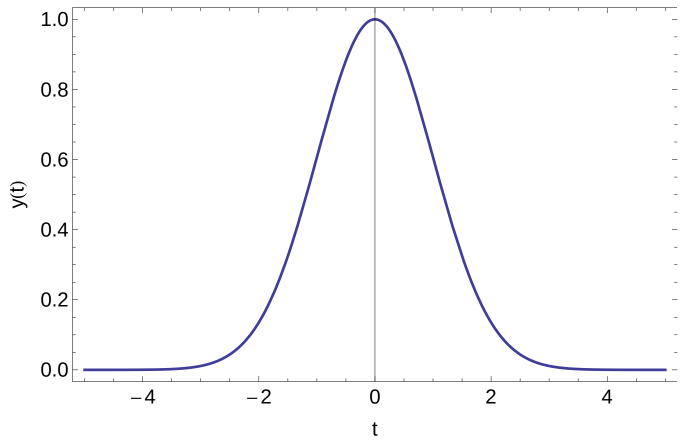
$$\Delta t = \int_{-\infty}^{\infty} t^2 |x(t)|^2\, dt$$

Tehát a kvantummechanikai Heisenberg féle határozatlansági összefüggés eredete a kvantummechanika matematikai formalizmusa, és felfogható mint a Fourier transzformáltakra vonatkozó határozatlansági reláció direkt következménye. A beadandó célja ezen reláció vizsgálata különböző hullámcsomagokon DFT segítségével. A DFT elvégzéséhez a tankönyvi példa helyett saját programot írtam, szintén Pythonban. Az ábrákat általában Mathematica-val készítettem.

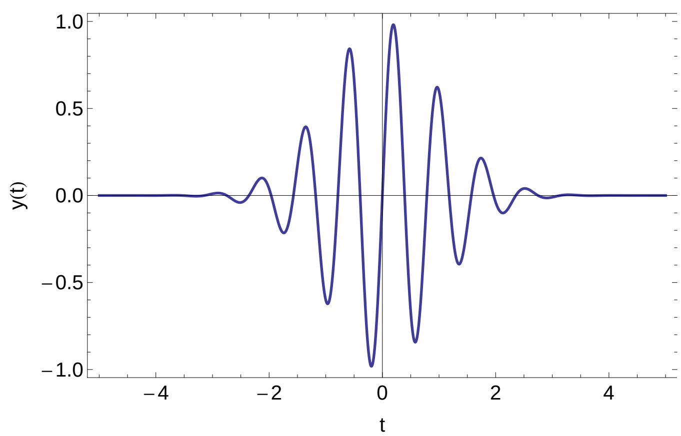
Feladatok

Vegyük a következő hullámcsomagokat és alkalmazzuk rájuk a diszkrét fourier transzformáció algoritmusunkat

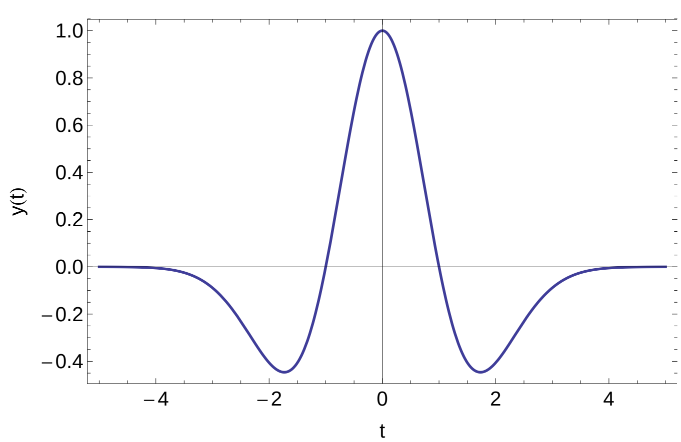
$$y_1(t) = e^{-\frac{t^2}{2}}$$



$$y_2(t) = \sin(8t)e^{-\frac{t^2}{2}}$$



$$y_3(t) = \left(1 - t^2\right) e^{-\frac{t^2}{2}}$$



1. Határozzuk meg a csomagokhoz rendelhető szélességet ($\triangle t$), amelyekre jó mérték $|y(t)|$ félérték szélessége (FWHM).

2. Ábrázoljuk $y(t)$ diszkrét Fourier transzformáltját, $Y(\omega)$-t lineáris és logaritmikus ploton.

3. Mik $Y(\omega)$ és ω egységei a DFT-ban?

4. Becsüljük meg a transzformált $\triangle\omega$ szélességét. Ehhez jó mérték $|Y(\omega)|$ FWHM-ja.

5. Határozd meg a határozatlansági relációhoz tartozó C konstanst: $\Delta t \Delta\omega \geq 2\pi C$

A Diszkrét Fourier Transzformáció

A DFT felfogható úgy mint a folytonos FT integráljának szummával való közelítése

$$X\left(\omega_n\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{-i\omega_n t}\, dt \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=1}^{N} x_k e^{-i\frac{2\pi k n}{N}} \mathrm{dt}$$

ahol a konstansok definíciójára sokféle konvenció létezik, én az alábbit fogom használni *(MATLAB default, Mathematica {1,1})*

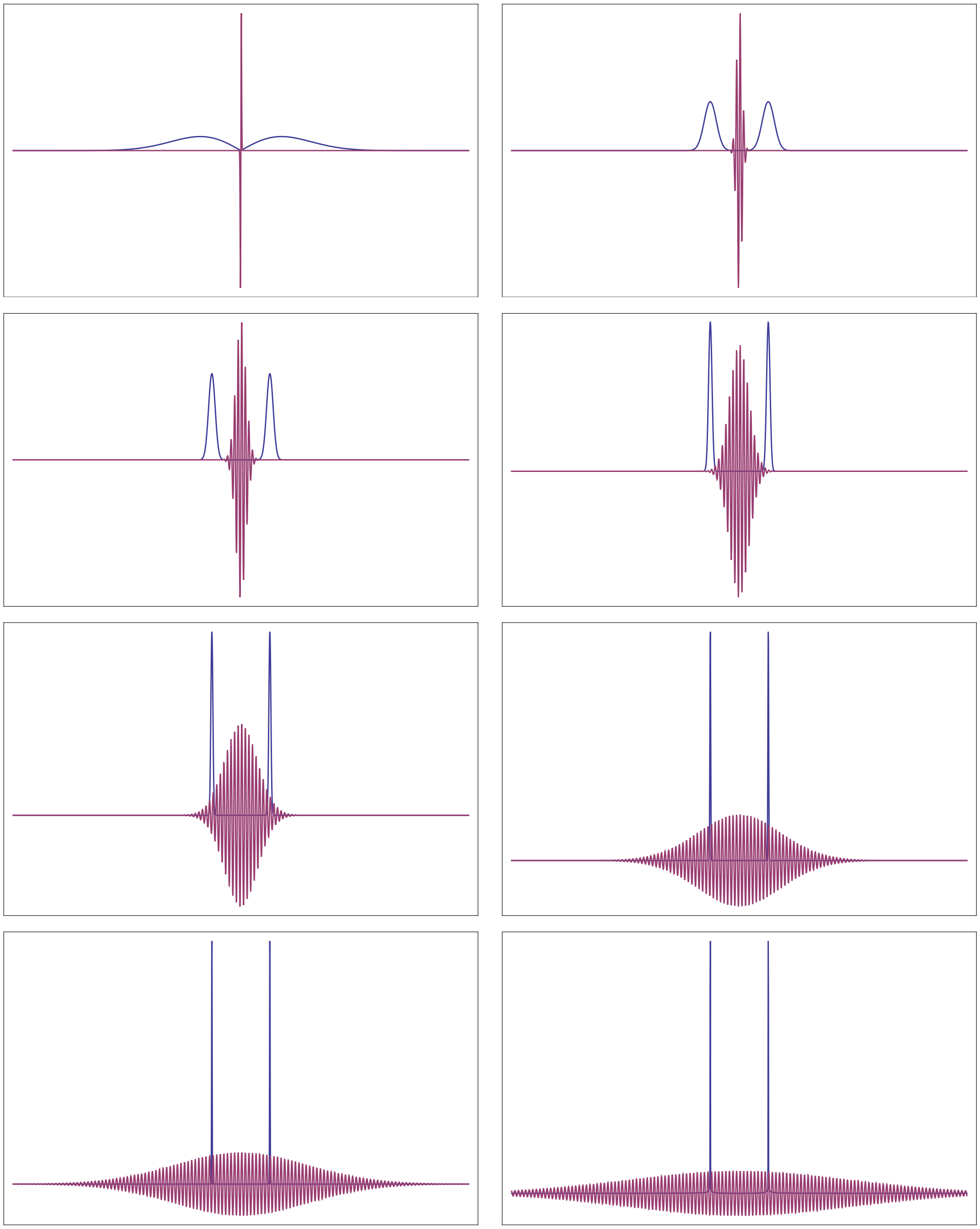
$$X_k = \mathscr{F}(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{N-1} x_n \cdot e^{-i2\pi kn/N}.$$

Illetve felfogható a DFT lineáris operátorként, a DFT mátrixszal való szorzás

$$\mathbf{X} = \mathscr{F}(\mathbf{x}) = \hat{F}\mathbf{x}$$

ahol $\hat{F}$ a következő$N \times N$-es Vandermonde mátrix

$$\hat{F} = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 & \cdots & \omega^{N-1} \\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \cdots & \omega^{2(N-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega^{N-1} & \omega^{2(N-1)} & \cdots & \omega^{(N-1)(N-1)} \end{pmatrix}.$$



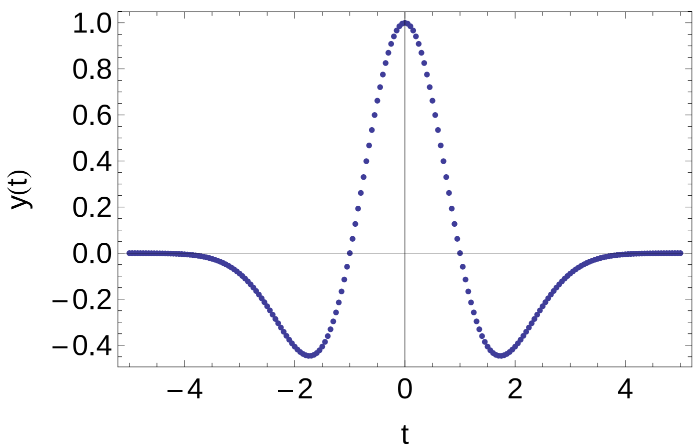
1. ábra. Kvalitatív ábra, a valós térbeli függvények (piros) és a fourier térbeli függvények (kék) σparaméter függvényében. Jól látható, hogy az egyik szélessége nagyjából inverz módon változik a másikéhoz képest.

Először is a függvényekből mintavételezni kell hogy vektorokat kapjunk, ami a DFT bemenete. Ha a függvényt (t_0, t_l) intervallumon N lépésben mintavételezzük, akkor a mintavételezési frekvencia (sampling frequency)

$$F_s = \frac{N}{|t_0 - t_l|} \tag{1}$$

és az időbeli lépésköz

$$dt = \frac{1}{F_s} = \frac{|t_0 - t_l|}{N} \tag{2}$$

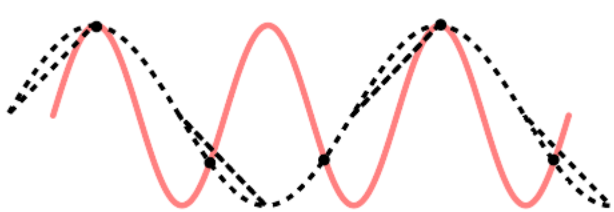


2. ábra.

A DFT kimeneteként kapott vektor elemei komplex számok, ezeknek az abszolút értékét vettem. A vektorban pozitív és negatív frekvenciakomponensek is szerepelnek, de nem triviális sorrendben: az első elem a DC komponens, a maradék első fele a pozitív, a második fele pedig a negatív tartomány [3].

$$\begin{pmatrix} A_0 & A_1 & \cdots & A_{N/2-1} & A_{-N/2} & \cdots & A_{-1} \end{pmatrix}$$

A második félben található információ redundáns mivel $A_k = A_{-k}$, ezt mérnöki alkalmazásokban általában eldobják. Abból a megfontolásból tartottam meg, hogy a fizikában pl ellenkező irányú de azonos hosszuságú impulzusvektoroknak felelhetnek meg. Ha a sorrendet helyreállítottuk, a frekvencia tengelyt a következőképpen kell skálázni: a Nyquist tételnek megfelelően nem szerepelhet a jelben nagyobb frekvencia mint a mintavételezési frekvencia fele,



3. ábra. Forrás[1]

ezért a Nyquist frekvenciától

$$f_N = f_0 = -\frac{F_s}{2}$$

df-enként N-et lépünk

$$df = \frac{F_s}{N} = \frac{1}{|t_0 - t_l|} = \frac{1}{N \cdot dt} \tag{3}$$

így a legmagasabb frekvenciakomponens

$$f_l = \frac{F_s}{2} - \frac{F_s}{N} \tag{4}$$

A DFT program

A programot *python 2.7.3*-ban írtam, a futtatásához szükségesek a *numpy* és a *mathplotlib* csomagok.

Mivel a program írása során a hatékonyság helyett a szemléletesség vezérelt ezért a DFT-t a minden optimalizációt nélkülöző

$for\ k\ in\ xrange(N):$

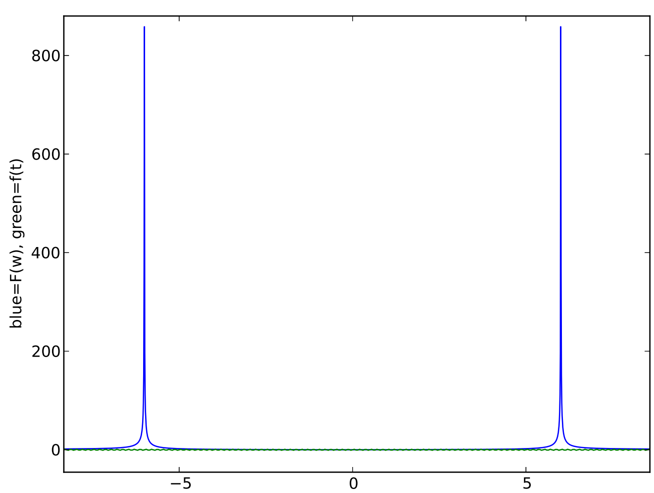
$for\ n\ in\ xrange(N):$

$X[k]+=x[n]*math.e**(-2j*math.pi*k*n/N)$

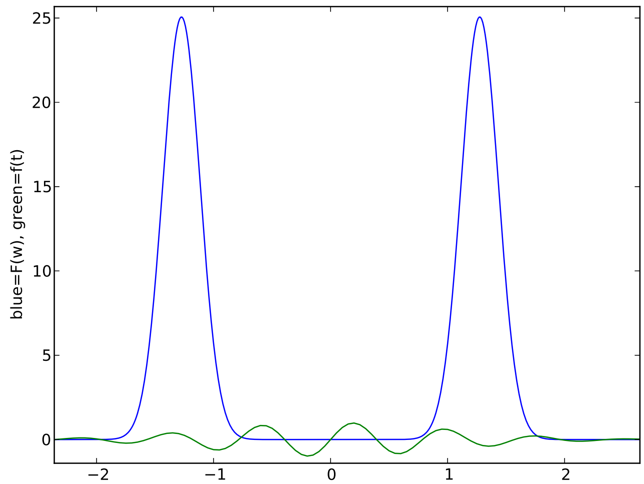
ciklussal végeztem.

A bemenő paraméterek a transzformálandó függvény, a mintavételezési intervallum kezdete és vége illetve a mintavételezési pontok száma. Ezek közül az elsőt a func(t) definíciójában lehet kiválasztani, míg az utóbbiakat a run_DFT() paramétereiként kell megadni.

A függvények ábrázolását a *matplotlib* package *pyplot* moduljával végeztem, de a plotok forrásaként szolgáló adatokat ki lehet menteni fájlba a külső programmal való ábrázoláshoz a write_list_to_file() fügvénnyel. A skálázás tesztelésére egy 6hz-es sin bemenet transzformáltját néztem, amelyben +6 és -6Hz -nél kell dirac deltákat látnunk, ennek eredménye a programból



A beadandó ábráit esztétikai szempontok miatt nagyrészt *Mathematica*-val készítettem, de reprodukálhatóak a program plotoló függvényével is (*showplot()* és *show_log_plot()*). Az összehasonlítás kedvéért a szinuszos wavelet és a fourier transzformáltja a program kimeneteként



Eredmények

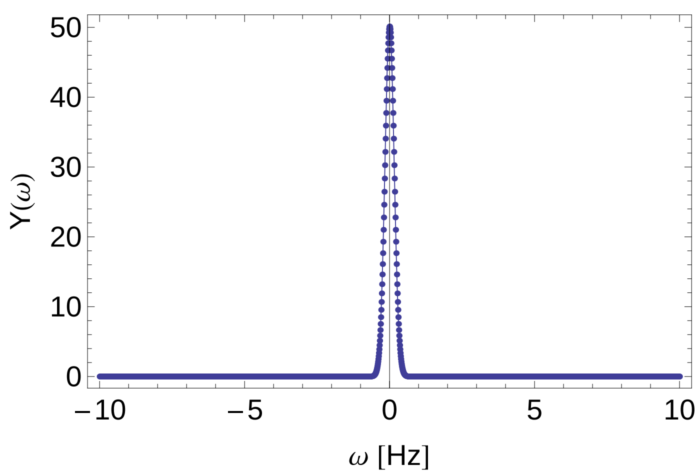
1. feladat. A FWHM értékei a waveletek abszolút értékeire

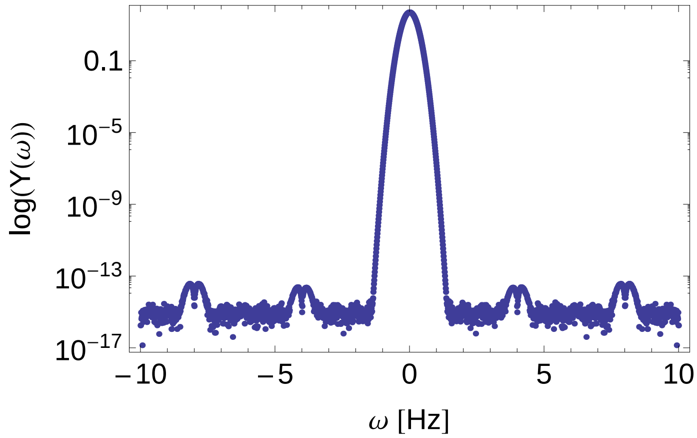
$$\Delta t_{gauss} = 2.354$$

$$\Delta t_{sin} = 2.102$$

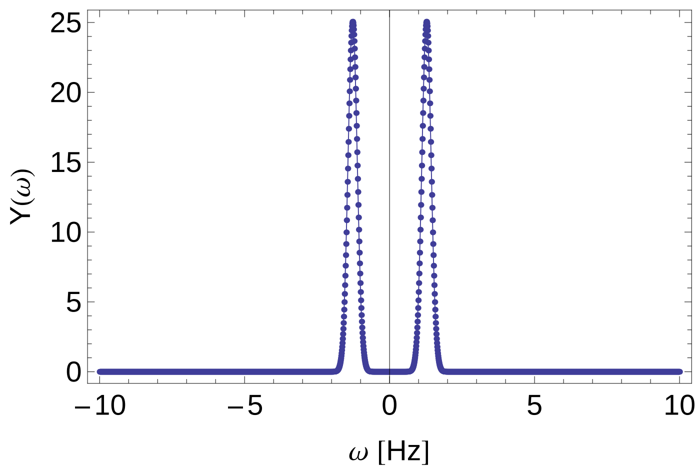
$$\Delta t_{hat} = 1.269$$

2. feladat. Sorban a transzformáltak lineáris és logaritmikus ábrákon

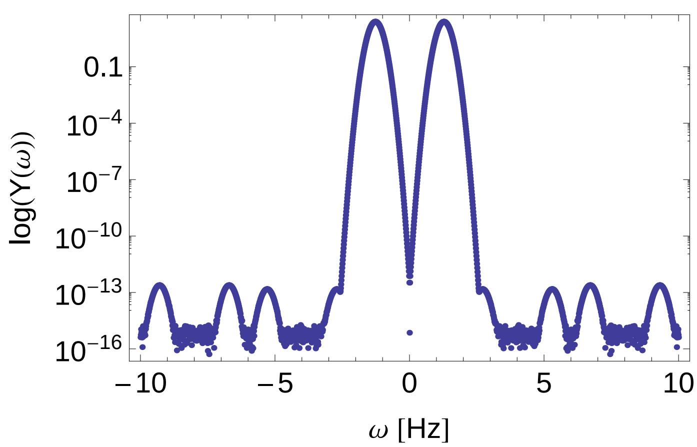




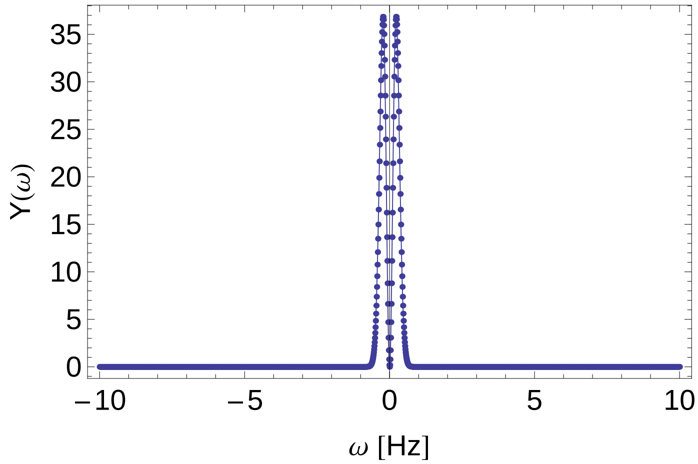
log(Y(ω))
0.1
10^−5
10^−9
10^−13
10^−17
−10
−5
0
5
10
ω [Hz]

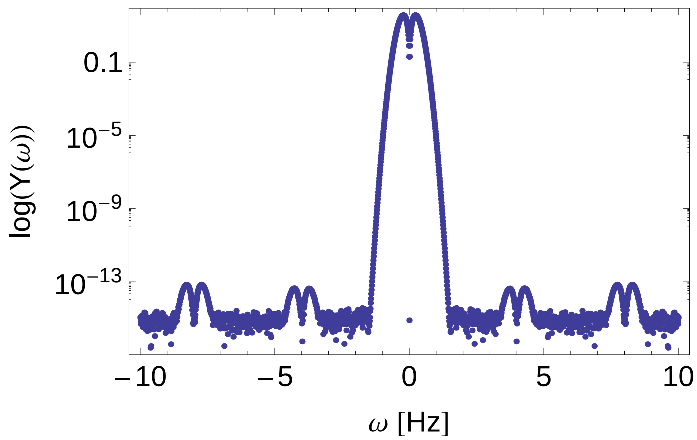


Y(ω)
25
20
15
10
5
0
−10
−5
0
5
10
ω [Hz]



log(Y(ω))
0.1
10^−4
10^−7
10^−10
10^−13
10^−16
−10
−5
0
5
10
ω [Hz]





3. feladat. ω mértékegysége Hz, a DFT kimenetében az 'egység' (lépésköz) a (3) egyenletben szerepel. $Y(\omega)$ mértékegysége y^2rms, ahol y az $y(t)$ dimenziója és rms = root mean square[3].

4. feladat. Itt előjött az a probléma, hogy bár a FWHM az első, gauss hullámcsomagra jól definiált, egy a szinuszos wavelet transzformáltjához hasonló bimodális eloszlásnál már nem triviális hogy mit értsünk alatta. Nézhetjük egy csúcs szélességét, a csúcsok szélességeinek összegét, vagy $+\infty$ és $-\infty$ irányból elindulva az első félértékekhez tartozó ω-k különbségeit. Az alapján döntöttem, hogy mindegyik módszerrel megmértem a szélességet, és mivel tudjuk hogy a Gauss hullámcsomaghoz tartozik a minimális bizonytalanság[2], az innen kapott szorzatnál a többié nem lehet kisebb. Ez a feltétel az első két módszert kizárta, így

$$\Delta\omega_{gauss} = 0.377$$

$$\Delta\omega_{sin} = 2.928$$

$$\Delta\omega_{hat} = 0.727$$

5. feladat. Az előző feladatban említettek alapján az alsó korlátot a Gauss wavelet adja, így az abból számolt FWHM-ek szorzatából közelíthetjük legpontosabban a konstans értékét.

$$\frac{\Delta t_{gauss} \Delta \omega_{gauss}}{2\pi} \simeq 0.14 \simeq C$$

1. Hivatkozások

[1] Nyquist-shannon sampling theorem, January 2013. Page Version ID: 531788897.

[2] Leslie E. Ballentine. *Quantum Mechanics: A Modern Development*. World Scientific, 1998.

[3] Michael Cerna and Audrey F. Harvey. *The Fundamentals of FFT Based Signal Analysis and Measurements*. National Instruments, 2001.

[4] Werner Heisenberg. *The Physical Principles of the Quantum Theory: By Werner Heisenberg*. Courier Dover Publications, 1949.

[5] Mark A. Pinsky. *Introduction to Fourier Analysis and Wavelets*. American Mathematical Soc., 2002.