

Kvanttimekaniikka

Tapio Hansson

Kummallinen teoria

- ▶ Kvanttimekaniikka on teoria, jota ei ehkä edes kannata yrittää "käsittää".
- ▶ Arkijärjellä ei tee kvanttimaailmassa juuri mitään.
- ▶ Luonto toimii kuten toimii, ja jos se on arkijärjen vastaista, niin olkoon sitten.
- ▶ Richard Feynmanin sanoin:
I think I can safely say that nobody understands quantum mechanics.
- ▶ Lähtekäämme siis liikkeelle kysymyksistä, jotka johtivat kvanttiteorian kehittymiseen.

Mitä on valo?

- ▶ Jo Newton teki aikanaan paljon kokeita valolla. Hän tuli siihen tulokseen, että valon täytyy olla hiukkasia. Newtonin päättely johtui valon geometrisesta luonteesta.
- ▶ Christiaan Hyugensin mukaan valo koostui aalloista.
- ▶ Kysymys pysyi pinnalla pitkään, Newton teki kokeita jotka todistivat aaltoteorian vääräksi, Fizeau ja Foucault puolestaan todistivat hiukkasteorian vääräksi.

Mitä on valo?

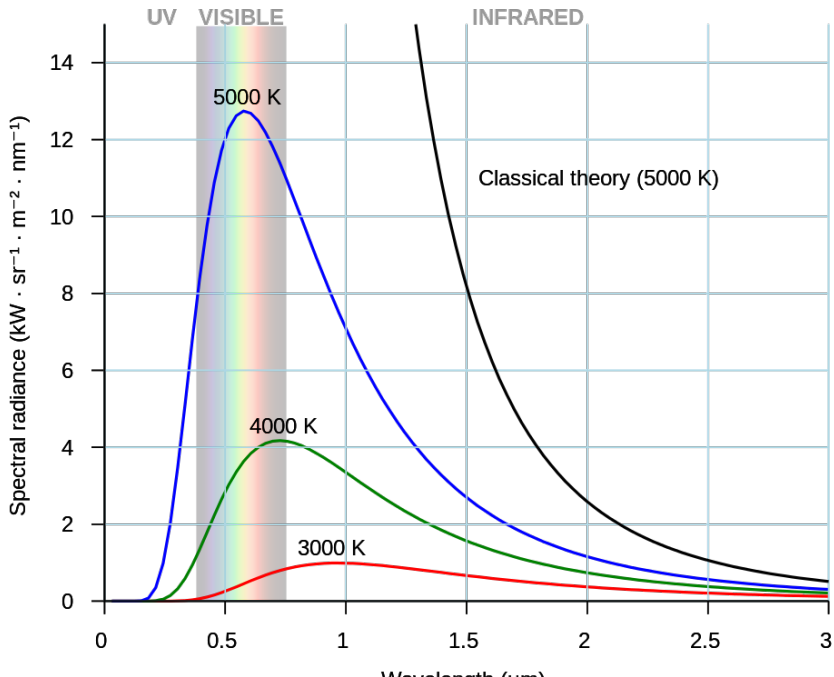
- ▶ Jo Newton teki aikanaan paljon kokeita valolla. Hän tuli siihen tulokseen, että valon täytyy olla hiukkasia. Newtonin päättely johtui valon geometrisesta luonteesta.
- ▶ Christiaan Hyugensin mukaan valo koostui aalloista.
- ▶ Kysymys pysyi pinnalla pitkään, Newton teki kokeita jotka todistivat aaltoteorian vääräksi, Fizeau ja Foucault puolestaan todistivat hiukkasteorian vääräksi.
- ▶ Britti James Clerk Maxwell kehitti 1800-luvun loppupuolella sähkömagneettisten aaltojen teoriaa, jonka osoitti oikeaksi saksalainen Heinrich Herz kokeillaan.
- ▶ Thomas Young oli jo aiemmin osoittanut valon interferenssin kokeellaan, joten tämä viimeistään taputteli pari sataa vuotta kestäneen väittelyn: Valo on sähkömagneettinen aalto.

Spoiler Alert!

- ▶ Klikiotsikko vuodelta 1985:
Feynman: "Valo koostuu hiukkasista."
- ▶ Itseasiassa ongelmia ilmeni jo paljon aikaisemmin.
- ▶ Ensimmäinen viite siitä, että sähkömagnetismi ei ehkä riitä, löytyi vielä 1800-luvun puolella hehkuvien kappaleiden lähettämästä valosta.

Mustan kappaleen säteily

- ▶ Kaikki kappaleet lähettävät kaiken aikaa sähkömagneettista säteilyä. Lähetetyn säteilyn taajuus riippuu kappaleen lämpötilasta, eli hiukkastasolla tapahtuvan värähtelyn määrästä.
- ▶ Lämpötasapainossa oleva kappale vastaanottaa säteilyä yhtä paljon energiaa kuin lähettää.
- ▶ Kappaletta, joka absorboi kaiken siihen osuvan säteilyn (ei heijasta mitään) kutsutaan mustaksi kappaleeksi. (Malli, joka kuvaa hyvin esimerkiksi Aurinkoa, Maata tai tarvittaessa lähes mitä tahansa kappaletta.)
- ▶ Klassisen sähkömagnetismin teorian mukaan mustan kappaleen tulisi luovuttaa säteilyä energiaa siten, että luovutetun energian määrä kasvaa taajuuden pienentyessä.
- ▶ Tämällöin kappaleen säteilemä energiamäärä kasvaa äärettömyyteen, mikä on luonnollisesti vastoin energian säilymislakia. Tieteen historia tuntee ongelman nimellä **Ultraviolettikatastrofi**.



Mustan kappaleen säteily

- ▶ Lordi Rayleigh ja James Jean tutkivat 1800-luvun lopulla ongelmaa, ja johtivat nk Raylgeih-Jeansin lain, joka kertoo kaiken mitä klassinen fysiikka voi sanoa mustan kappaleen säteilystä.
- ▶ Matemaattisesti:

$$E(f)df = \frac{8\pi kT}{c^3} f^2 df$$

- ▶ Kaava toimii infrapuna-alueella ja vielä jossain määrin näkyvällä valolla. Ultravioletialueella havainnot ovat jotain aivan muuta.
- ▶ Max Planckin kaava ratkaisi lopulta vuonna 1900 ongelman

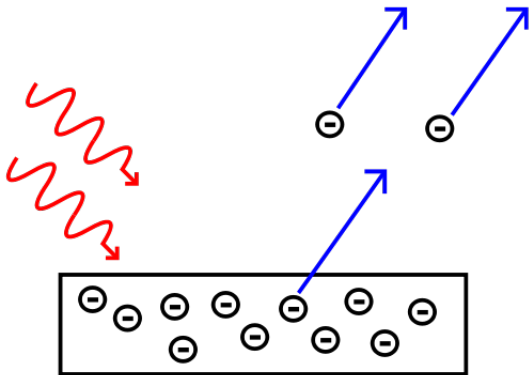
$$E(f)df = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{f^3 df}{e^{hf/kT} - 1}$$

Planckin kaava ja vakio

- ▶ Edellisessä kaavassa esiintyvä h on Planckin vakio. SI-yksiköissä sen arvo on $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{Js}$.
- ▶ Planckin säteilylaki ratkaisi ongelman, sillä pienillä taajuuksilla säteily energia lähestyykin nollaa, kuten havainnot osoittavat.
- ▶ Ongelma oli vielä selittää mihin fysiikkaan kaava perustuu.
- ▶ Ratkaisuksi tulivat "kvantittuneet"energiatilat, mikä tarkoittaa sitä, että värähtelijän energia ei voi saada mitä tahansa arvoja, vaan ainoastaan tietyn piskuisen energiamäärän monikertoja.
- ▶ Aiemmin oli oletettu, että värähtelijä voi saada energia-arvoja jatkuvalta väliltä.
- ▶ Itse sähkömagneettisen aallon energia voi olla mikä tahansa arvo. Energianvaihto aineen kanssa tapahtuu sen sijaan vain tietyn kokoisina paketteina. (Tarvitaan kvanttikenttäteorioita, QED)

Eivätkö aallot kelpaakaan?

- ▶ Seuraava naula aaltoteorian arkkuun oli valosähköinen ilmiö.
- ▶ Herzin kokeiden pohjalta tehtyjen tutkimusten mukaan havaittiin, että valolla voidaan irrottaa elektroneja metallista. Lisäksi huomattiin, että elektroneja alkaa irrota vasta kun valon taajuus on riittävän suuri.



Valosähköinen ilmiö

- ▶ Klassisen teorian mukaan sähkömagneettinen aalto luovuttaa energiaa tasaisesti. Tällöin irtoavilla elektroneilla tulisi olla sitä enemmän energiaa, mitä kirkkaammalla valolla niitä valaistaan.
- ▶ Koe osoittaa, että elektroneja irtoaa vasta tietyn aallonpituusrajan jälkeen, ja mitä korkeaaenergisempää säteilyä metalliin kohdistetaan, sitä suurenergisempiä elektroneja saadaan irrotettua.
- ▶ Vastaavasti valon kirkkauden nosto nostaa irtoavien elektronien määrää, mutta ei lisää niille energiaa.
- ▶ Ongelman ratkaisi Albert Einstein vuonna 1905 esittelemällä teorian valokvanteista, eli fotoneista. (Einstein sai tästä Nobel-palkintonsa.)

Valokvantit

- ▶ Einstein päätteli, että valo ei kulje aaltorintamana, vaan on keskittynyt pieniin paketteihin, eli fotoneihin.
- ▶ Jokaisen fotonin energia riippuu kyseessä olevan valon aallonpituudesta ja on Planckin vakiosta h .

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda},$$

missä f on valon taajuus, λ valon aallonpituus ja c valonnopeus.

- ▶ Tämä on hyödyllinen fotonin energian kaava, jota tarvitaan monissa tehtävissä jotka sisältävät fotoneja.

Aalto-hiukkasdualismi

- ▶ Valosähköinen ilmiö osoittaa, että valo ei voi olla klassinen sähkömagneettinen aalto, vaan sen täytyy koostua jostain, joka voi osua yksittäiseen elektroniin. Toisaalta kuitenkin tarvitaan valon taajuus tai aallonpituus, jotta tämän otuksen energia voidaan laskea.
- ▶ Tieteen historiassa on erittäin poikkeuksellista, että tarvitaan kaksi "kilpailevaa" teoriaa kuvaamaan sama ilmiö, eikä kumpikaan ole toisen approksimaatio.
- ▶ Valo ei itseasiassa siis ole oikein aaltoja, eikä hiukkasia, vaan jotain, jolla on molempien ominaisuuksia.
- ▶ Toisaalta Feynman sanoi valoa hiukkasiksi??

Hiukkasaalto

- ▶ Valo voidaan hyvin ajatella hiukkasiksi. Sattuu vain olemaan hiukkasten ominaisuus, että niillä on aaltoluonnetta.
- ▶ Tarkempaa analyysiä tilanteesta löytyy Feynmanin kirjasta QED, tai yliopiston kvanttikenttäteorioiden kurssilta.
- ▶ Itse asiassa kaikilla muillakin hiukkasilla on aaltoluonnetta. Ajatuksen toi maailmalle Luis De Broglie vuonna 1924, ennen kuin aiheesta oli varsinaisia koetuloksia.
- ▶ De Broglien mukaan materiahiukkasen aallonpituus saadaan kaavalla

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv},$$

missä $p = mv$ on hiukkasen liikemäärä, m relativistinen massa ja v hiukkasen nopeus. Aaltoluonne on siis liikkuvan hiukkasen ominaisuus. Onko hiukkanen joskus paikoillaan?

Päähän sattuu

- ▶ Epäilemättä, Einsteinkaan ei ymmärtänyt valon luonnetta.
- ▶ Valo ehkä vielä, mutta että hiukkasetkin aaltoja.
- ▶ On itseasiassa todettava, että kumpikaan ei ole kumpaakaan, vaan luonto on jälleen jännittävämpi kuin ihmismieli kykenee käsittämään.
- ▶ Kutsumme kaikkea hiukkasiksi, mutta ne eivät ole kuten biljardipallot, vaan paljon monimutkaisempia. Niillä on samankaltaisia ominaisuuksia kuin klassisilla aalloilla ja samankaltaisia ominaisuuksia kuin klassisilla hiukkasilla, mutta ne eivät ole kumpaakaan.
- ▶ Toisaalta, elektronit ja fotonit ovat pohjimmiltaan hyvin samanlaisia, joten riittää että tutkimme vain toisia niistä.

Mysteeri, jota ei voi ratkaista

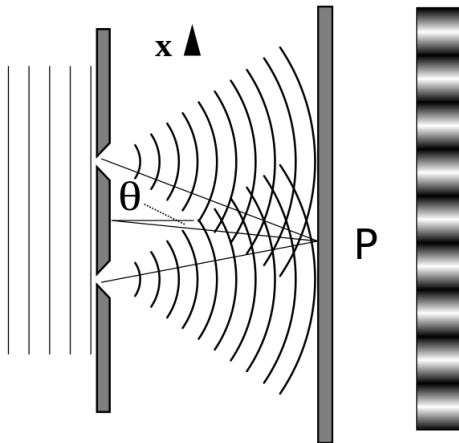
- ▶ Kvantti-ilmiöiden käyttäytymistä ei voi selittää millään klassisella tai arkijärjen mukaisella mallilla.
- ▶ Voimme vastata kysymykseen miten luonto toimii, mutta vastaus ei poista mysteeriä millainen luonto on, ainoastaan selittää miten se toimii.
- ▶ Siirrykäämme tutkimaan elektroneja vertaamalla niitä luoteihin ja aaltoihin perinteisessä kaksoisrako-kokeessa.

Luodit

- ▶ Oletetaan, että kaksoisrakoon ammutaan hieman epätarkalla konekiväärillä, joka roiskii luoteja sopivaan läjään rakojen ympärille.
- ▶ Kun kaksoisrakokoe toteutetaan klassisilla hiukkasilla, esimerkiksi luodeilla, on tulos vähemmän yllättävä.
- ▶ Molempien rakojen kohdalle syntyy kasa luoteja, jonka korkein kohta on raon keskellä, ja kasat vähenevät Gaussin käyrän muotoisiksi kun etäisyys keskelle kasvaa.
- ▶ On selvää, että mitään interferenssiä tai vaikutusta ei tapahdu luotien välillä.

Aallot

- ▶ Vastaavasti tavallisilla aalloilla tehtävässä kokeessa havaitaan selvä interferenssi.
- ▶ Huygensin periaatteen mukaisesti taso-aallot hajoavat raossa palloaalloiksi ja kahdesta raosta lähtevät aallot interferoivat keskenään.



Elektronit

- ▶ Elektroneilla (tai muilla piskuisilla hiukkasilla) homma menee erikoisemmaksi.
- ▶ Kun koe tehdään normaalisti, sen kummemmin kiinnittämättä huomiota mihinkään, ilmestyy kaikeksi yllätykseksi varjostimelle interferenssikuvio.
- ▶ Seuraavaksi voimme tutkia tilannetta esimerkiksi sulkemalla toisen koloista.
- ▶ Tällöin, kuten odottaa saattaa, syntyy vain yksi kasa.
- ▶ Elektronit käyttäytyvät siis kuten aallot, ja interferoivat kaksoisraossa.

Elektronit

- ▶ Kokeeseen voidaan tehdä pieni lisä. Asetetaan varjostimeen elektronimonistin, joka tuottaa pienen naks-äänien aina kun siihen osuu elektroni.
- ▶ Kun koetta jatketaan havaitaan nyt putken naksuttavan sitä tahtia kun elektroneja tulee varjostimelle.
- ▶ Elektronien virtaa voidaan pienentää niin, että lopulta ääniä kuuluu vain silloin tällöin yksi kerrallaan. Aina kuuluu kuitenkin kokonainen naksaus, eikä koskaan puolikasta.
- ▶ Elektronien täytyy siis tulla kohteeseen yksittäisinä möykkyinä.

Luonto pitää meitä pilkkanaan

- ▶ Yritetään seuraavaksi olla ovelia ja asetetaan pieni havaintolaite, joka väläyttää valon aina kun elektroni kulkee reiästä.
- ▶ Havainto osoittaa, että aina kun varjostimelta kuuluu naksaus, jompi kumpi aukoista välähtää, ja vain toinen kerrallaan.
- ▶ Hienoa, elektroni siis kulkee vain toisesta reiästä ja naksahuttaa varjostimelle, nyt voimme siis seurata miten interferenssikuvio syntyy.
- ▶ Paitsi että, nyt kun seuraamme elektroneja ja kirjaamme kummasta raosta ne kulkivat, muodostuu varjostimelle saman lainen kuvio kuin luodeista.

Ei voi olla totta

- ▶ Vaikka koejärjestelyjä kuinka yritettäisiin muuttaa, muodostuu varjostimelle aina interferenssikuvio, jos emme voi sanoa kummasta aukosta elektroni kulki.
- ▶ Vastaavasti varjostimelle syntyy kaksi kasaa, jos pystymme jotenkin erottamaan kummasta raosta elektroni meni.
- ▶ Luonto siis kirjaimellisesti pitää meitä pilkkanaan.
- ▶ Hyvä lyhyt filmi aiheesta:
<https://www.youtube.com/watch?v=DfPeprQ7oGc>
- ▶ Ja hieman toisenlainen näkemys:
<http://toutestquantique.fr/en/duality/>

Todennäköisyysaallot

- ▶ Syy edellä olevaan ongelmaan pesiytyy syvälle kvanttimekaniikan perusteisiin: Heisenbergin epätarkkuusperiaatteeseen.
- ▶ Epätarkkuusperiaate sanoo, että hiukkasen paikkaa ja liikemäärää ei voi tuntea yhtäaikaan tiettyä rajaa tarkemmin. Toisin sanottuna, jos tiedät missä hiukkanen on, et tiedä mihin se on menossa, ja jos tiedät mihin se on menossa, et tiedä missä se on.
- ▶ Elektronin luonne aaltona on itseasiassa sen todennäköisyys olla jossain paikassa. Interferenssikuvio kuvaa tätä.
- ▶ Tarkemmin sanottuna aaltofunktion neliö antaa hiukkasen paikan todennäköisyyden.

$$P(\text{hiukkanen paikassa } x) = |\psi(x)|^2$$

- ▶ Havainnon tekeminen "romahduttaa" aaltofunktion, ja hiukkasen paikka saadaan tarkasti selville.

Aaltofunktio

- ▶ Kvanttimekaniikassa keskeinen käsite on aaltofunktio, jolla kuvataan hiukkasta tai systeemiä.
- ▶ Aaltofunktio pitää sisällään kaiken tiedon systeemistä.
- ▶ Esimerkiksi jos tutkitaan elektronia, saadaan elektronin sijainnin todennäköisyys tutkimalla aaltofunktion neliötä.
- ▶ Esimerkiksi yksittäisiä molekyyliä ja atomeja voi kuvata aaltofunktiolla, mutta nämä alkavat olla hyvin monimutkaisia matemaattisesti.
- ▶ Vaikka De Broglie-aallonpituudet saadaan yksinkertaisella kaavalla, aaltofunktion mudon ratkaiseminen on selviää vasta systeemin fysikaalisten ominaisuuksien perusteella.
- ▶ Tutustutaan seuraavaksi hieman perinteikkäisiin esimerkkeihin.

Kvanttimekaniikan postulaatit

1. Fysikaalisen systeemin jokaista tilaa vastaa aaltofunktio $\psi(\vec{r}, t)$. Aaltofunktion neliö on systeemin todennäköisyystiheys.
2. Aaltofunktion aikariippuvuus määräytyy Schrödingerin yhtälöstä.
3. Systeemin jokaiseen mitattavaan ominaisuuteen liittyy lineaarinen operaattori, jonka ominaisarvot ovat mahdollisia mittaustuloksia.
4. Superpositioperiaate: Systeemin mikä tahansa tila voidaan esittää jonkin mitattavan suureen avulla määriteltyjen ominaistilojen superpositiona.
5. Korrespondenssiperiaate: Kvanttimekaniikan tulokset yhtyvät klassisen mekaniikan tuloksiin klassisella rajalla.

Hiukkanen laatikossa hieman yksinkertaistetusti

- ▶ Tyhjän avaruuden jälkeen seuraavaksi yksinkertaisin tilanne on hiukkanen laatikossa. Oletetaan laatikko, jossa on yksi hiukkanen, ja jonka seinät ovat äärettömän paksut, joten hiukkanen ei voi tunneloitua ulos.
- ▶ Hiukkas-aalto levittäytyy laatikkoon siten, että se muodostaa rajattuun tilaan seisovan aallon.
- ▶ Jos laatikon leveys on L , ovat De Broglie-aaltojen aallonpituudet

$$\lambda_n = \frac{2L}{n}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- ▶ Toisaalta aiemmin todettiin, että $p = mv = h/\lambda$.

Hiukkanen laatikossa hieman yksinkertaistetusti

- ▶ Hiukkasen kineettinen energia on

$$E = \frac{1}{2}mv^2.$$

- ▶ Yhdistämällä nämä tiedot saadaan ensin

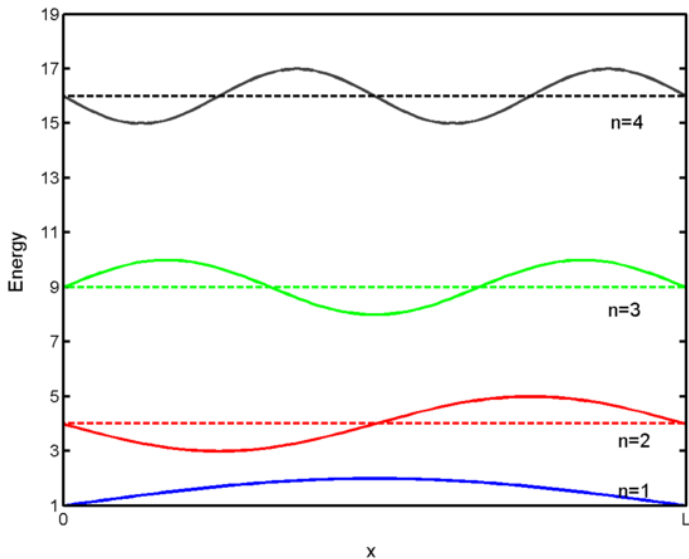
$$E = \frac{h}{2m\lambda^2}.$$

- ▶ Sijoittamalla tähän aallonpituusrajoitus laatikossa saadaan laatikkoon diskreetit energiatasot

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- ▶ Hiukkanen voi olla laatikossa vain ja ainoastaan jollain näistä energiatiloista.

Hiukkanen laatikossa



Schrödingerin yhtälö ja aaltofunktio

- ▶ Aaltofunktion ratkaiseminen on kvanttimekaanisten ongelmien ytimessä, sillä aaltofunktio sisältää kaiken tiedon tarkasteltavasta systeemistä.
- ▶ Aaltofunktion selvittämiseksi täytyy ratkaista Schrödingerin yhtälö, jota ei sinällään voi johtaa mistään muista fysikaalisista periaatteista.
- ▶ Ajasta riippuva Schrödingerin yhtälö on

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{dx^2} + V\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

- ▶ Usein (onneksi) hiukkaseen vaikuttavat voimat (potentiaali-terminissä V) eivät riipu ajasta, jolloin Schrödingerin yhtälö tulee ajasta riippumattomaan muotoon

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + V(x)\psi = E\psi(x)$$

Hiukkanen laatikossa

- ▶ Hiukkasen laatikossa Schrödingerin yhtälö on muotoa

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0,$$

sillä potentiaali on nolla laatikon sisällä.

- ▶ Ratkaisuksi saadaan aaltofunktio

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$