

8. Operaatorid

Operaator, lineaarne operaator, operaatorite summa, operaatorite korrutis, operaatorite kommuteeruvus

Seni me oleme vaadanud ülesandeid, mille lahendamine annab osakese energiad ja neile vastavad lainefunktsioonid. On alust arvata, et kvantmehaanikas saab ka kõiki teisi füüsikalisi suurusi leida. Selleks tuleb meil kõigepealt tutvust teha mõnede kvantmehaanikas kasutatavate matemaatiliste mõistetega. Nagu me eelnevas oleme juba näinud, on kvantmehaanika "mängureeglid" teistsugused ja see nõuab ka teistsuguse matemaatika rakendamist. Põhisuuruseks kvantmehaanikas on lainefunktsioon ψ , mis kirjeldab täielikult osakese olekut. See tähendab, et kogu informatsiooni peab saama kätte lainefunktsioonist mingite matemaatiliste operatsioonidega. Et nendest aru saada, tuleb meil kõigepealt tutvust teha operaatoritega, st suurustega, mis teisendavad ühtesid funktsioone teisteks.

Siin § anname operaatori definitsiooni ja vaatame nendega opereerimist, järgnevas § aga anname operaatorite füüsikalise tähenduse ja analüüsime nende rolli kvantmehaanikas. Olgu siinkohal öeldud, et operaatorid kuuluvad kvantmehaanika põhimõistete hulka. See aga tähendab, et ilma nendest ei ole võimalik aru saada kvantmehaanika formalismist, ega ka füüsikalisest sisust.

Olgu meil mingi funktsioonide hulk X . Operaatoriks nimetatakse eeskirja, mille abil saab mistahes funktsioonist $f \in X$ mingi teise funktsiooni $g \in X$. Tähistades konkreetset operaatorit \hat{A} , võime kirjutada

$$g = \hat{A}f .$$

Viimase seose kohta öeldakse, et operaatoriga \hat{A} mõjumisel saame funktsioonist f funktsiooni g .

Võimalike eeskirjade hulk funktsioonide teisendamiseks on ilmselt lõputu, kvantmehaanikas vajaminevad operaatorid moodustavad üldiste operaatorite hulgast üsna kitsa alamhulga. Kvantmehaanikas vajaminevaid operaatorid on saadavad kahte tüüpi operaatoritest: arvuga korrutamise operaatoritest ja diferentseerimisoperaatoritest.

Vaatame mõnda lihtsat näidet. Olgu meil funktsioonideks ühe muutuja funktsioonid. Operaator \hat{A} olgu defineeritud selliselt, et selle mõju tähendab kõikide funktsioonide korrutamist kahega, st

$$\hat{A} = 2 .$$

Võttes mingi suvalise funktsiooni $f(x)$, tuleks see korrutada kahega

$$g(x) = \hat{A}f(x) = 2f(x) .$$

Kuna see kehtib mistahes funktsiooni korral, siis näiteks $f(x) = x^3$ jaoks saame $g(x) = 2x^3$.

Arvuga korrutamise operaatoriks võib ka olla operaator

$$\hat{B} = x ,$$

mis tähendab kõikide funktsioonide korrutamist x -ga. Nüüd saame funktsiooni $f(x)$ korral

$$h(x) = \hat{B}f(x) = xf(x)$$

Konkreetses funktsiooni $f(x) = x^3$ korral $h(x) = \hat{B}x^3 \equiv x \cdot x^3 = x^4$.

Diferentseerimisoperaatori näiteks oleks operaator

$$\hat{C} = \frac{d}{dx} ,$$

mis nõuab funktsioonist $f(x)$ tuletise arvutamist

$$k(x) = \hat{C}f(x) \equiv \frac{df(x)}{dx} = f'(x) .$$

Sama funktsiooni $f(x) = x^3$ korral $k(x) = \hat{C}x^3 \equiv \frac{d}{dx}(x^3) = 3x^2$.

Kvantmehaanikas kasutatavad operaatorid on lineaarsed. Definitsiooni kohaselt rahuldab lineaarne operaator järgmist kahte seost

$$\hat{A}(f_1 + f_2) = \hat{A}f_1 + \hat{A}f_2 ,$$

$$\hat{A}(af) = a \hat{A}f ,$$

kus $f_1, f_2, f \in X$ ja $a \in C$ on mingi suvaline arv. Lihtne on kontrollida, et eespool vaadatud operaatorid on lineaarsed: arvuga korrutamisel on see ilme, tuletise korral aga järeldub tuletise omadustest, et summa tuletis on võrdne tuletiste summaga ja konstandi võib tuletise märgi alt välja tuua.

Operaatorite summa ja korrutis. Järgnevalt defineerime operaatorite summa ja korrutise. Operaatorite \hat{A} ja \hat{B} summa on iga $f \in X$ korral defineeritud valemiga

$$(\hat{A} + \hat{B})f = \hat{A}f + \hat{B}f ,$$

korrutis aga valemiga

$$\hat{A}\hat{B}f = \hat{A}(\hat{B}f) .$$

Operaatorite summa tähendab seda, et antud funktsioonile tuleb eraldi rakendada operaatoriga \hat{A} seotud eeskirja ja operaatoriga \hat{B} seotud eeskirja ning seejärel tulemused liita.

Operaatorite korrutamine aga tähendab nende järjestikust rakendamist: kõigepealt peame rakendama operaatoriga \hat{B} seotud eeskirja ja seejärel saadud tulemusele operaatoriga \hat{A} seotud eeskirja. Seetõttu on operaatorite järjekord korrutises reeglina oluline, sest korrutis $\hat{B}\hat{A}f = \hat{B}(\hat{A}f)$ võib anda teistsuguse tulemuse, kuna enne tuleb rakendada operaatoriga \hat{A} seotud eeskirja ja seejärel operaatoriga \hat{B} seotud eeskirja.

Illustreerime seda ühe lihtsa näitega. Olgu $\hat{A} = x$ ja $\hat{B} = d/dx$ ning $f(x)$ olgu suvaline diferentseeruv funktsioon. Siis

$$\hat{A}\hat{B}f = x\left(\frac{df}{dx}\right) \equiv xf'$$

ja

$$\hat{B}\hat{A}f = \frac{d}{dx}(x \cdot f) = f + xf' .$$

Antud juhul seega $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$.

Juhul kui $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, öeldakse, et operaatorid \hat{A} ja \hat{B} kommuteeruvad, kui aga $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$, siis operaatorid ei kommuteeru. Suurust

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \equiv [\hat{A}, \hat{B}]$$

nimetatakse operaatorite \hat{A} ja \hat{B} kommutaatoriks.

Kommuteeruvate operaatorite korral

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 ,$$

mittekommuteeruvate operaatorite korral aga

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C} ,$$

kus \hat{C} on mingi nullist erinev operaator. Eespool vaadatud operaatorite $\hat{A} = x$ ja $\hat{B} = d/dx$ korral näiteks

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -1 ,$$

ehk $\hat{C} = -1$.

Kui operaatorid kommuteeruvad, et sõltu tulemus operaatorite rakendamise järjekorrast, mittekommuteeruvatel operaatoritel on aga operaatorite rakendamise järjekord oluline.

Kommentaari:

Operaatoritega opereerimisel on mõned iseärasused, millega tuleb veidi harjuda. Nimelt, igasuguste operaatorvõrduste korral, nagu näiteks

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$$

mõistetakse tegelikult seda, et iga $f \in X$ korral kehtib võrdus

$$\hat{A}\hat{B}f = \hat{B}\hat{A}f .$$

Põhjus on selles, et tegelikult mõjuvad operaatorid alati funktsioonidele ja seetõttu tuleb igasuguste operaatorvõrduste kontrollimisel või tuletamisel arvutada nende mõju vastavate funktsioonide hulga X suvalisele funktsioonile f ja näidata, et saadud tulemused on ühesugused. Võrdused kirjutatakse aga tavaliselt operaatorvõrdustena ilma funktsioone juurde kirjutamata.

Nii ka meie poolt vaadatud operaatorite $\hat{A} = x$ ja $\hat{B} = d/dx$ korral me tegelikult arvutasime seose

$$[\hat{A}, \hat{B}]f = \hat{A}\hat{B}f - \hat{B}\hat{A}f = -f ,$$

mis operaatorvõrdusena annab $[\hat{A}, \hat{B}] = -1$.

9. Operaatorid kvantmehaanikas

Füüsikaliste suuruste operaatorid (koordinaat, impulss, impulsimoment, energia), operaatori omaväärtusülesanne, omaväärtused, omafunktsioonid, nende füüsikaline tõlgendus, impulsioperaatori omaväärtusülesanne, füüsikaliste suuruste samaaegne mõõdetavus

Siin § räägime sellest, millist rolli mängivad operaatorid kvantmehaanikas. Kõige olulisem on siin see, et igale füüsikalisele suurusele A , olgu selleks näiteks energia, impulss, jne, vastab kvantmehaanikas mingi kindel operaator \hat{A} (selleks, et teha vahet füüsikalise suuruse A ja tema operaatori vahel, tähistame vastavaid operaatoreid enamasti sama sümboliga, lisades sellele „katus“).

Kuidas saada füüsikaliste suuruste operaatoreid? Enamuse operaatorite saamiseks on vaja teada kahe füüsikalise suuruse - koordinaadi ja impulsi operaatoreid. Anname need ilma põhjendusteta. Ristkoordinaatides on koordinaadi operaatorid

$$\hat{x} = x, \hat{y} = y, \hat{z} = z ,$$

st operaatoriteks on vastavad koordinaadid ise. Nagu näha, on meil tegemist arvuga korrutamise operaatoritega. Vektorkujul kirjutades

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r} .$$

Impulsi operaatorid on

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} .$$

Nagu näha, on siin tegemist diferentseerimisoperaatori ja arvuga korrutamise operaatori korrutisega (tuleb võtta vastav osatuletis ja tulemus korrutada arvuga $-i\hbar$). Vektorkujul kirjutades

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

kus operaator ∇ ("nabla") tähistab lühidalt diferentseerimist kolme koordinaadi järgi. Kuna operaator ∇ on seotud gradiendiga, võib impulsi operaatori anda ka teisel kujul

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \text{grad} ,$$

sest

$$\hat{\vec{p}}f = -i\hbar \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z} \right) \equiv -i\hbar \text{grad} f .$$

Kvantmehaanikas kasutatakse siiski rohkem esimest operaatoriga ∇ .

Teades koordinaadi ja impulsi operaatoreid, saab iga füüsikalise suuruse, mis avaldub koordinaadi ja impulsi kaudu, operaatori leida selliselt, et asendame need suurused vastavate operaatoritega. Ehk sümboolselt

$$A(\vec{r}, \vec{p}) \rightarrow \hat{A} = A(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}}) .$$

Kuna koordinaadi operaator on võrdne vastava koordinaadi endaga, siis tegelikult tuleb asendada ainult impulss vastava operaatoriga

$$A(\vec{r}, \vec{p}) \rightarrow \hat{A} = A(\vec{r}, \hat{\vec{p}}) .$$

Impulsimomendi operaator. Esimese näitena anname impulsimomendi operaatori

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \hat{\vec{p}} \equiv -i\hbar \vec{r} \times \nabla .$$

Ristkoordinaadistikus oleks impulsimomendi komponentidele vastavad operaatorid järgmised

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \hat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad \hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) .$$

Energia operaator. Anname järgnevalt ka koguenergia operaatori üldkuju

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2M} + U(\vec{r}) \rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2M} + U(\vec{r}) .$$

Enne kui kirjutame energia operaatori pikemalt välja, veel kaks märkust. Esiteks, kuna potentsiaalne energia $U(\vec{r})$ sõltub ainult koordinaadist, koordinaadi operaatoriks on aga vastav koordinaat ise, siis seetõttu on $\hat{U} = U$. Teiseks, koguenergia operaatorit tähistatakse enamasti tähega \hat{H} , mitte \hat{E} , ja nimetatakse Hamiltoni operaatoriks.

Energiaoperaatori väljakirjutamiseks arvutame \hat{p}^2 . Nagu meie definitsioon ütleb, on operaatorite korrutis nende järjest rakendamine. Seega tuleks meil arvutada

$$\hat{p}^2 f \equiv \hat{p} \cdot \hat{p}f = \hat{p} \cdot (\hat{p}f) .$$

Kuna siin on meil tegemist skalaarkorrutisega, siis tuleb arvutada

$$\begin{aligned} & \hat{p}_x(\hat{p}f)_x + \hat{p}_y(\hat{p}f)_y + \hat{p}_z(\hat{p}f)_z = \\ & = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left(-i\hbar \frac{\partial f}{\partial x}\right) - i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \left(-i\hbar \frac{\partial f}{\partial y}\right) - i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \left(-i\hbar \frac{\partial f}{\partial z}\right) = \\ & = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \right) \equiv -\hbar^2 \Delta f . \end{aligned}$$

Seega on impulsi ruudu operaator seotud Laplace'i operaatoriga

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta$$

ja Hamiltoni operaatori üldkuju on järgmine

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + U(\vec{r}) .$$

Operaatori omaväärtusülesanne. Selleks, et aru saada füüsikaliste operaatorite vajalikkusest kvantmehaanikas, peame vaatama kõigepealt ühte operaatoritega seotud matemaatilist ülesannet – operaatori omaväärtusülesannet

Olgu meil mingi konkreetne operaator \hat{A} . Operaatori \hat{A} omaväärtusülesandeks loetakse järgmise probleemi lahendamist: leida sellised funktsioonid f ja arvud a , mis rahuldavad võrdust

$$\hat{A}f = af .$$

Teisiti öeldes, tuleb leida sellised funktsioonid f , mille korral operaatoriga \hat{A} mõjumisel (st vastava eeskirja rakendamisel) saame tulemuseks sama funktsiooni, korrutatuna mingi konkreetse arvuga a . On selge, et meid huvitavad omaväärtusülesande mittetriviaalsed lahendid, sest funktsioon $f = 0$ on alati lahendiks suvalise omaväärtusega a .

Selliseid funktsioone f , mis rahuldavad ülemist võrdust nimetatakse operaatori omafunktsioonideks ja vastvaid arve a operaatori omaväärtusteks.

Omaväärtusülesande füüsikaline tähendus. Kõigepealt - igale füüsikalisele suurusele A (energia, impulss, jt.) vastab kindel operaator \hat{A} :

$$A \rightarrow \hat{A} .$$

Lahendades vastava operaatori \hat{A} omaväärtusülesande, saame me üldiselt terve rea omaväärtusi

$$a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$$

ja neile vastavaid omafunktsioone

$$f_1, f_2, \dots, f_n, \dots .$$

Osutub, et füüsikalise suuruse A mõõdetavateks väärtusteks mikromaailmas on operaatori \hat{A} omaväärtused ja ainult need. Juhul kui omaväärtused on diskreetsed, on vastav füüsikaline suurus diskreetne, kui aga pidev, siis on füüsikaline suurus pidev. Omafunktsioon f_n kirjeldab aga vaadeldavat osakest (või süsteemi), milles füüsikalise suuruse väärtuseks on a_n . Teisisõnu, f_n on vastava oleku lainefunktsioon.

Nagu näha, saame omaväärtusülesande lahendamisel kaks olulist asja: esiteks antud füüsikalise suuruse mõõdetavad väärtused

$$a_n$$

ja olekuid väärtustega a_n kirjeldavad lainefunktsioonid

$$f_n .$$

Paraku on omaväärtusülesande lahendamine üsna keeruline, sest enamasti on tegemist tuletisi sialdavate operaatoritega ja seetõttu kujutab omaväärtusülesande lahendamine endast mingi diferentsiaalvõrrandi lahendamist.

Järgnevalt veendume selles, et statsionaarsete olekute Schrödingeri võrrandi lahendamine tähendab energiaoperaatori omaväärtusülesande lahendamist. Tõepoolest vaadates energiaoperaatori ehk Hamiltoni operaatori omaväärtusülesannet

$$\hat{H}\varphi = E\varphi$$

ja arvestades eespool toodud Hamiltoni operaatori üldkuju, saame siit

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta\varphi + U(\vec{r})\varphi = E\varphi ,$$

mis oli meie poolt varem vaadatud statsionaarsete olekute Schrödingeri võrrand. Seega oleme me omaväärtusülesande lahendamise järgi teinud. Lahendades potentsiaalaugu või harmoonilise ostsillaatori korral ülesande

$$\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n ,$$

saime me lubatud energiatega väärtused E_n ja lainefunktsioonid φ_n , mis kirjeldavad vastava energiaga olekuid.

Impulsioperaatori omaväärtusülesanne. Nagu me oleme juba näinud, on omaväärtusülesande lahendamine üldiselt üsna keeruline, sest see tähendab tavaliselt mingi diferentsiaalvõrrandi lahendamist. Ühe lihtsa näitena vaatame siin impulsi operaatori omaväärtusülesannet ühemõõtmelisel liikumisel. Impulsi operaatori kuju on nüüd

$$\hat{p} \equiv \hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx} .$$

Omaväärtusülesanne $\hat{p}\varphi = p\varphi$ oleks

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

Selle saame lihtsalt lahendada muutujate eraldamise meetodil

$$\frac{d\varphi}{\varphi} = \frac{ip}{\hbar} dx .$$

Konstandi täpsuseni on selle võrrandi lahendiks

$$\varphi(x) = A e^{\frac{ipx}{\hbar}} .$$

Kui meil liikumisele mingeid kitsendusi pole ($-\infty < x < +\infty$), siis ei ole ka impulsile p mingeid kitsendusi ja impulsi väärtused on pidevad $-\infty < p < +\infty$. Saadud lainefunktsioonid on meil juba tuttavad vaba osakese juurest. Tähistades $k = p/\hbar$, saaksime

$$\varphi(x) = A e^{ikx} ,$$

mis kirjeldades x -telje sihis liikuvat vaba osakest impulsiga $p = \hbar k$ ja energiaga $E = p^2/2M$.

Füüsikaliste suuruste samaaegne mõõdetavus. Eelmises, sissejuhatav peatükis me rääkisime määramatuse seostest, mis tähendas seda, et mikromaailmas ei ole kõik klassikalised füüsikalised suurused samaaegselt mõõdetavad ja neile kehtivad teatavad kitsendused. Osutub, et vastuse sellele, kas kaks füüsikalist suurust on samaaegselt kuidagi täpselt mõõdetavad, saame teada, analüüsides vastavate füüsikaliste suuruste operaatoreid. Seega, lisaks sellele, et operaatorite kaudu saab teada, milliseid tulemusi me antud füüsikalise suuruse mõõtmisel saame, saab otsustada ka samaaegse mõõdetavuse üle.

Osutub, et füüsikalised suurused A ja B on samaaegselt kuitahes täpselt mõõdetavad parajasti siis, kui neile vastavad operaatorid \hat{A} ja \hat{B} kommuteeruvad

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 .$$

Viimane seos tähendas seda, et operaatoritega \hat{A} ja \hat{B} mõjumisel ei ole nende rakendamise järjekord oluline. Nagu me järgnevas tõestame, garanteerib see suuruste samaaegse mõõdetavuse.

Kõigepealt tõestame selle, et kui suurused A ja B on samaaegselt kuitahes täpselt mõõdetavad, siis vastavad operaatorid kommuteeruvad ja seejärel tõestame vastupidise, et kui operaatorid kommuteeruvad, on vastavad suurused samaaegselt kuitahes täpselt mõõdetavad.

Oletame, et füüsikalised suurused A ja B on samaaegselt kuitahes täpselt mõõdetavad. See tähendab seda, et leidub selline olek φ , mis on samaaegselt nii operaatori \hat{A} kui ka operaatori \hat{B} omafunktsiooniks ja milles need suurused omavad kindlaid väärtusi a ja b

$$\hat{A}\varphi = a\varphi , \quad \hat{B}\varphi = b\varphi .$$

Teisisõnu väljendades tähendab samaaegne mõõdetavus seda, et operaatoritel on ühised omafunktsioonid.

Nüüd näitame, seda, et operaatorid kommuteeruvad (nende mõju ei sõltu rakendamise järjekorrast). Rakendame esimesele seosele operaatorit \hat{B} , saame

$$\hat{B}\hat{A}\varphi = a\hat{B}\varphi = ab\varphi .$$

Sama tulemuse saame kui rakendame teisele seosele operaatorit \hat{A}

$$\hat{A}\hat{B}\varphi = b\hat{A}\varphi = ba\varphi ,$$

mis tõestabki operaatorite kommuteeruvuse ($ab = ba$, sest tegemist on arvudega).

Tõestame ka vastupidise. Oletame, et operaatorid kommuteeruvad

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} .$$

Vaatame mingit operaatori \hat{A} omafunktsiooni φ omaväärtusega a

$$\hat{A}\varphi = a\varphi$$

ja näitame, et see on ka operaatori omafunktsiooniks mingi omaväärtusega b . Rakendades ülemisele seosele operaatorit \hat{B}

$$\hat{B}\hat{A}\varphi = a\hat{B}\varphi ,$$

võime selle võrduse vasakus pooles vahetada operaatorite järjekorra ja kirjutada

$$\hat{A}(\hat{B}\varphi) = a(\hat{B}\varphi) ,$$

millest järeldub, et funktsioon $\hat{B}\varphi$ on samuti operaatori \hat{A} omafunktsioon omaväärtusega a ja saab seetõttu sellest erineda ainult mingi konstandi poolest. Teisisõnu $\hat{B}\varphi \sim \varphi$, ehk tuues sisse võrdeteguri

$$\hat{B}\varphi = b\varphi ,$$

näemegi, et φ on samaaegselt ka operaatori \hat{B} omafunktsioon, mis tähendab, et antud olekus on ka suurus b määratud. Analoogiliselt saab tõestada, et operaatori \hat{B} omafunktsioonid on samaaegselt ka operaatori \hat{A} omafunktsioonideks.

Sellega oleme tõestanud seose füüsikaliste suuruste mõõdetavuse ja operaatorite kommuteeruvuse vahel. Juhul kui füüsikaliste suuruste operaatorid ei kommuteeru, st

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C} ,$$

kus \hat{C} on mingi nullist erinev operaator, ei ole vastavad füüsikalised suurused samaaegselt kuitahes täpselt mõõdetavad ja nende korral kehtivad teatavad määramatuse seosed, mis mõõtmisi kitsendavad. Kuna määramatuse seoste tuletamine ei kuulu käesoleva kursuse raamesse, siis piirdume ainult ühe näitega. x -koordinaadi ja vastava impulsi korral kehtib määramatuse seos

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} .$$

See seos järeldub asjaolust, et koordinaadi ja impulsi operaatorid ei kommuteeru. Näitame seda siis ainult ühedimensionaalse liikumise jaoks kui

$$\hat{x} = x \quad \text{ja} \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} .$$

Arvutades vastavalt

$$\hat{x}\hat{p}\varphi(x) \equiv x(-i\hbar \frac{d\varphi(x)}{dx}) = -i\hbar x \frac{d\varphi(x)}{dx}$$

ja

$$\hat{p}\hat{x}\varphi(x) = -i\hbar(\frac{d(x\varphi(x))}{dx}) = -i\hbar\varphi(x) - i\hbar x \frac{d\varphi(x)}{dx} ,$$

näeme, et tulemused on erinevad ja operaatorid ei kommuteeru. Lahutades esimesest tulemusest teise ja kirjutades selle operaatorkujul, saame

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar .$$

Viimasest tuletataksegi ülaltoodud määramatuse seos koordinaadi ja impulsi jaoks.

10. Hermiitilised operaatorid

Skalaarkorrutis, kaasoperaator, enesekaasne ehk hermiitiline operaator, omaväärtuste reaalsus, omafunktsioonide ortogonaalsus, olekufunktsiooni reaksarendus, selle füüsikaline tõlgendus

Seni oleme rääkinud operaatoritest ja nende seostest füüsikaga. Nagu öeldud, vastab igale füüsikalisele suurusele A kindel operaator \hat{A} , operaatori omaväärtused aga annavad selle füüsikalise suuruse mõõdetavad väärtused. Teatavasti on kõik füüsikaliselt mõõdetavad suurused reaalarvulised ja seepärast peavad ka füüsikaliste operaatorite omaväärtused olema reaalarvulised. Osutub, et mitte iga lineaarse operaatori omaväärtused pole reaalsed ja seetõttu moodustavad reaalarvuliste omaväärtustega operaatorid teatava spetsiifiliste operaatorite alamhulga, mida me antud punktis asume lähemalt vaatama.

Kõigepealt toome sisse funktsioonide bilineaarse vormi ehk skalaarkorrutise. Vaatame üldiselt kompleksarvuliste funktsioonide hulka X , kus $|\vec{r}| \rightarrow \infty$ korral $\varphi(\vec{r}) \rightarrow 0$. Funktsioonide $\psi(\vec{r})$ ja $\varphi(\vec{r})$ skalaarkorrutis $\langle \psi | \varphi \rangle$ on defineeritud valemiga

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) dV ,$$

kus integreeritakse üle kogu ruumi (üle piirkonna, kus funktsioonid on erinevad nullist).

Skalaarkorrutist kasutades defineerime kaasoperaatori mõiste. Olgu meil mingi operaator \hat{A} . Vaatame integraali

$$\langle \psi | \hat{A} \varphi \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) \hat{A} \varphi(\vec{r}) dV .$$

Operaatorit \hat{B} , mille korral

$$\int (\hat{B} \psi(\vec{r}))^* \varphi(\vec{r}) dV = \int \psi^*(\vec{r}) \hat{A} \varphi(\vec{r}) dV$$

ehk

$$\langle \hat{B} \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | \hat{A} \varphi \rangle ,$$

nimetatakse operaatori \hat{A} kaasoperaatoriks.

Kuna meil on tegemist arvuga korrutamise ja diferentseerimise operaatoritega, siis on arusaadav, et kaasoperaatorit saab alati lihtsalt leida. Arvuga korrutamise operaatorite korral on vastava arvu ülekandmine ühe funktsiooni juurest teise juurde lihtne. Kuna teisest funktsioonist võetakse kaaskompleks, siis reaalarvu korral $\hat{B} = \hat{A}$, kompleksarvu korral aga $\hat{B} = (\hat{A})^*$.

Diferentseerimisoperaatori saab aga üle kanda ositi integreerimisega. Näitame seda ühe muutuja funktsioonide korral, mis lõpmatuses saavad võrdseks nulliga. Olgu

$$\hat{A} = \frac{d}{dx},$$

siis

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} dx = \psi^*(x)\varphi(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\psi^*(x)}{dx} \varphi(x) dx .$$

Kuna me eeldasime, et lõpmatuses $\psi(x), \varphi(x) \rightarrow 0$, siis saame

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\psi^*(x)}{dx} \varphi(x) dx \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-\frac{d\psi(x)}{dx}\right)^* \varphi(x) dx ,$$

millest

$$\hat{B} = -\frac{d}{dx} .$$

Operaatorit, mille korral $\hat{B} = \hat{A}$, st. kaasoperaator on võrdne selle operaatori endaga, nimetatakse enesekaasseks ehk hermiitiliseks operaatoriks. Pikemalt kirjutades, on hermiitiline operaator see, mis rahuldab võrdust

$$\langle \psi | \hat{A} \varphi \rangle = \int \psi^* \hat{A} \varphi dV = \int (\hat{A} \psi)^* \varphi dV = \langle \hat{A} \psi | \varphi \rangle .$$

Osutub, et füüsikaliste suuruste operaatorid peavad olema hermiitilised. Järgnevalt näitame, et hermiitilise operaatori omaväärtused on reaalsed ja omafunktsioonid moodustavad ortonormeeritud süsteemi.

Hermiitilise operaatori omaväärtused on reaalarvulised. Olgu meil hermiitiline operaator \hat{A} . Selle omaväärtused olgu a_n ja vastavad omafunktsioonid φ_n , st

$$\hat{A} \varphi_n = a_n \varphi_n .$$

Lihtsuse mõttes oletame, et igale omaväärtusele a_n vastab ainult üks omafunktsioon φ_n .

Vaatame kõigepealt integraali

$$\int \varphi_m^* \hat{A} \varphi_n dV = a_n \int \varphi_m^* \varphi_n dV .$$

Arvestades, et \hat{A} on hermiitiline, võime selle kirjutada ka kujul

$$\int \varphi_m^* \hat{A} \varphi_n dV = \int (\hat{A} \varphi_m)^* \varphi_n dV = a_m^* \int \varphi_m^* \varphi_n dV ,$$

kus me arvestasime, et $(\hat{A} \varphi_m)^* = a_m^* \varphi_m^*$. Kuna saadud avaldised peavad võrduma, saame

$$a_n \int \varphi_m^* \varphi_n dV = a_m^* \int \varphi_m^* \varphi_n dV$$

ehk

$$(a_n - a_m^*) \int \varphi_m^* \varphi_n dV = 0 .$$

Olgu nüüd $m = n$, siis

$$(a_n - a_n^*) \int \varphi_n^* \varphi_n dV = 0 .$$

Kuna integraal mittenegatiivsest funktsioonist $\varphi_n^* \varphi_n = |\varphi_n|^2$ ei saa null olla, siis järelikult

$$a_n - a_n^* = 0 \quad \text{ehk} \quad a_n = a_n^* ,$$

mis tõestabki väite, et hermiitilise operaatori omaväärtused on reaalsed.

Järgnevalt näitame, et hermiitilise operaatori omafunktsioonid moodustavad ortonormeeritud süsteemi. Olgu $m \neq n$, siis sel juhul $a_n - a_m^* \neq 0$ ja järelikult

$$\int \varphi_m^* \varphi_n dV = 0 ,$$

mis tähendab, et erinevatele omaväärtustele vastavad omafunktsioonid on ortogonaalsed (nende skalaarkorrutis on võrdne nulliga). Kuna me võime kõik omafunktsioonid φ_n normeerida ühele

$$\int \varphi_n^* \varphi_n dV = 1 ,$$

siis saamegi, et hermiitilise operaatori omafunktsioonid moodustavad ortonormeeritud süsteemi

$$\int \varphi_m^* \varphi_n dV = \delta_{mn} .$$

Saadud tulemuse saab üldistada ka juhule, kus ühele omaväärtusele vastab üle ühe omafunktsiooni. Viimast väidet me siinkohal aga ei tõesta.

Nagu öeldud, seisneb hermiitiliste operaatorite tähtsus kvantmehaanikas selles, et kõikide füüsikaliste suuruste operaatorid on hermiitilised.

Ühe lihtsa näitena vaatame siin impulsi operaatorit ühemõõtmelises ruumis

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

ja näitame, et see on hermiitiline. Selleks kasutame eelmist näidet tuletise operaatori ümbertõstmiseks. Saame

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_m^* \hat{p} \varphi_n dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_m^* \frac{d\varphi_n}{dx} dx = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varphi_m^*}{dx} \varphi_n dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} (-i\hbar \frac{d\varphi_m}{dx})^* \varphi_n dx \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{p}\varphi_m)^* \varphi_n dx .$$

Kuna $\langle \hat{p}\varphi_m | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_m | \hat{p}\varphi_n \rangle$, on operaator \hat{p} tõepoolest hermiitiline.

Hermiitilise operaatori omafunktsioonide täielikkus. Järgnevalt anname ilma tõestuseta ühe hermiitiliste operaatorite omafunktsioonide tähtsa omaduse, millel on oluline füüsikaline rakendus: omafunktsioonid $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n, \dots$ moodustavad täieliku süsteemi. Teisisõnu öeldes tähendab see seda, et mistahes funktsiooni ψ saab antud funktsioonide ruumis esitada omafunktsioonide φ_n lineaarse kombinatsioonina

$$\psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 + \dots + c_n\varphi_n + \dots = \sum_n c_n\varphi_n ,$$

kus c_n on mingid arvulised kordajad. Reaksarenduse kordajate c_n leidmine on etteantud funktsiooni ψ korral põhimõtteliselt lihtne, kui arvestada omafunktsioonide ortonormeeritust. Korrutades ψ funktsiooniga φ_m^* ja integreerides, saame

$$\int \varphi_m^* \psi dV = \sum_n c_n \int \varphi_m^* \varphi_n dV = \sum_n c_n \delta_{mn} = c_m .$$

Seega avalduvad kordajad c_n kujul

$$c_n = \int \varphi_n^* \psi dV .$$

Reaksarenduse füüsikaline tähendus. Oletame, et ψ on vaadeldava osakese lainefunktsioon ja esitame ta mingi füüsikalise suuruse operaatori \hat{A} omafunktsioonide kaudu kujul

$$\psi = \sum_n c_n \varphi_n .$$

Osutub, et kordajad c_n on seotud suuruse A mõõtmise tõenäosusega. Kuna φ_n kirjeldab olekut, milles füüsikalise suuruse A väärtuseks on a_n , siis

$$|c_n|^2$$

annab tõenäosuse, et olekus ψ saame me suuruse A mõõtmisel väärtuseks a_n . Kuna nende väidete tõestamine ei kuulu käesoleva elementaarse kvantmehaanika kursuse raamesse, siis võtame nimetatud asjaolu teadmiseks. Oluline on siin see, sellisel viisil saame lainefunktsioonist teada, milliseid tulemusi me antud oleku korral suuruse A mõõtmisel saame.

Esitades nüüd lainefunktsiooni ψ mingi teise operaatori \hat{B} omafunktsioonide kaudu

$$\psi = \sum_n d_n \psi_n ,$$

annavad $|d_n|^2$ tõenäosuse, et suuruse B mõõtmisel saame me väärtuseks b_n .

Eelöeldust selgub mitu huvitavat tõsiasja, mis eristavad makromaailma seaduspärasusi mikromaailma omast. Kõigepealt see, et mingi füüsikalise suuruse A mõõtmisel me võime tulemuseks saada ainult ühe arvudest $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$, mis on vastava operaatori \hat{A} omaväärtusteks. Osake aga võib olla olekus, kus suurusel A kindlat väärtust ei ole. Sel juhul on see olek esitatav eespooltoodud reaksarenduse kujul ja sõltuvalt kordajatest c_n me saame mõõtmisel erinevaid väärtusi a_1, a_2, \dots . Oletame näiteks, et ψ avaldub kujul

$$\psi = c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2 .$$

Nüüd saame suuruse A mõõtmisel tulemuseks, kas a_1 või a_2 . Väärtuse a_1 esinemise tõenäosus on $|c_1|^2$ ja väärtuse a_2 esinemise tõenäosus on $|c_2|^2$ (seejuures $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$). Ühe väärtuse, näiteks a_1 saame ainult siis kui

$$\psi = \varphi_1 .$$

See on meie eelneva tõlgendusega kooskõlas, sest nüüd $c_1 = 1$ ja $|c_1|^2 = 1$, mis ütleb, et a_1 esinemise tõenäosus on 1.

Järgmiseks väärib märkimist see, et lainefunktsioon ψ , mis kirjeldab osakese konkreetset olekut, sisaldab informatsiooni kõikide osakest puudutavate füüsikaliste suuruste kohta. Suuruse A mõõtmisest me eespool rääkisime. Kui meid nüüd huvitab mingi teine füüsikaline suurus B, siis tuleb toimida analoogiliselt ja esitada ψ vastavate omafunktsioonide kaudu, kusjuures reaksarenduse kordajad annavad vastavate mõõtmiste tõenäosused. Eespool vaadatud olek

$$\psi = c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2$$

võib näiteks operaatori \hat{B} omafunktsioonide ψ_1, ψ_2, \dots kaudu avalduda kujul

$$\psi = d_2 \psi_2 + d_3 \psi_3 + d_4 \psi_4 .$$

See tähendab nüüd, et B mõõtmisel saame me tõenäosusega $|d_2|^2$ tulemuseks b_2 , tõenäosusega $|d_3|^2$ tulemuseks b_3 ja tõenäosusega $|d_4|^2$ tulemuseks b_4 .

Arusaadavalt kehtib ka järgmine väide. Kui füüsikaline süsteem võib olla olekus lainefunktsiooniga ψ ja olekus lainefunktsiooniga ψ' , siis ta võib olla olekus lainefunktsiooniga

$$\Psi = a_1 \psi + a_2 \psi' ,$$

st. olekus, mis on mingi lubatud olekute lineaarne kombinatsioon.

Illustreerime oma eelnevat juttu mõne konkreetse näitega. Esimesena vaatame mingi osakese põhiolekut lõputus potentsiaalaugus energiaga E_1 . Seda kirjeldas järgmine normeeritud lainefunktsioon

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} .$$

Nagu me §6 nägime, võib selle esitada ka kujul

$$\psi_1 = -\frac{i}{\sqrt{2a}} \left(e^{\frac{i\pi x}{a}} - e^{-\frac{i\pi x}{a}} \right) .$$

Funktsioonid

$$\varphi_1 = \frac{i}{\sqrt{a}} e^{\frac{i\pi x}{a}} \quad ja \quad \varphi_2 = \frac{i}{\sqrt{a}} e^{-\frac{i\pi x}{a}}$$

on aga impulsioperaatori \hat{p} normeeritud omafunktsioonid impulsi väärtustega vastavalt

$$p_1 = \frac{\hbar\pi}{a} \quad ja \quad p_2 = -p_1 = -\frac{\hbar\pi}{a} .$$

Seega on ψ_1 esitus antav kujul

$$\psi_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \varphi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \varphi_2 ,$$

millest

$$c_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad ja \quad c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} .$$

Järelikult saame me põhiolekus energiaga E_1 impulsi mõõtmisel väärtuse p_1 tõenäosusega $(c_1)^2 = 1/2$ ja väärtuse $p = -p_1$ tõenäosusega $(c_2)^2 = 1/2$. See tulemus on juba varasemast tuttav, sest potentsiaalaugu lahendid kujutavad endast seisvaid laineid, mis tekivad x-tele positiivses ja negatiivses suunas liikuvate võrdvastupidiste lainearvudega ning sama amplituudiga lainete liitumisel.

Teise näitena vaatame järgmist osakese võimalikku lainefunktsiooni lõputus potentsiaaliaugus

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \left(0,8 e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} \sin \frac{\pi x}{a} + 0,6 e^{-\frac{iE_3 t}{\hbar}} \sin \frac{3\pi x}{a} \right) .$$

Analüüsime seda, pealtnäha keerulist avaldist, veidi lähemalt. Kõigepealt on lihtne veenduda, et antud olekufunktsioon on üldise Schrödingeri võrrandi $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 \psi}{dx^2}$ lahendiks, ei ole

aga statsionaarsete olekute võrrandi $E\psi = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 \psi}{dx^2}$ lahendiks (jätame selle asjaolu lugejale

kontrollimiseks). See tähendab, et antud olek ei ole osakese statsionaarne olek, küll aga on üks osakese võimalikest füüsikalistest olekutest. Näitame, et tegemist on nn „segaolekuga”, milles osakese energia ei ole üheselt määratud. Kuna olekud

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} \quad \text{ja} \quad \psi_3 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{3\pi x}{a}$$

vastavad statsionaarsetele olekutele energiatega E_1 ja E_3 , siis see lainefunktsioon avaldub kujul

$$\psi = 0,8 e^{-\frac{i E_1 t}{\hbar}} \psi_1 + 0,6 e^{-\frac{i E_3 t}{\hbar}} \psi_3$$

See lainefunktsioon kirjeldab järelkult olekut, milles energia mõõtmine annab tulemuseks, kas E_1 või E_3 . Energia E_1 esineb tõenäosusega $|c_1|^2 = 0,8^2 = 0,64$ ja energia E_3 tõenäosusega $|c_3|^2 = 0,6^2 = 0,36$, kus

$$c_1 = 0,8 e^{-\frac{i E_1 t}{\hbar}} \quad \text{ja} \quad c_3 = 0,6 e^{-\frac{i E_3 t}{\hbar}} .$$

Siin saadud tulemus on huvitav selle poolest, et klassikalises füüsikas analoogilisi olekuid ei ole, seal füüsikalised suurused tavaliselt liituvad. Siin aga saime oleku, kus energia ei ole üheselt määratud. Kuna statsionaarsete olekute leidmisel saime teada, millise energiaga olekus osake olla saab, siis ei ole võimalik energia mõõtmisel muid energia väärtusi saada. Antud oleku korral võisime saada kas E_1 või E_3 . Seega on tegemist omapärase olekuga, kus osakese energia ei ole üheselt määratud suurus ehk teisisõnu, olekuga, kus energia ei ole kindlalt fikseeritud suurus. Fikseeritud suurus on ntud juhul osakese keskmine energia, mis arvestades mõõtmiste tõenäosusi oleks $E = 0,64 E_1 + 0,36 E_3$. Et sellest aru saada, toome ühe konkreetse arvulise näite. Oletame, et meil on 100 ühesugust osakest, mis kõik on ühes ja samas olekus lainefunktsiooniga ψ . Sel juhul peaks me energia mõõtmisel 64 osakese korral saama tulemuseks E_1 ja 36 osakese korral tulemuseks E_3 . Kui näiteks $E_1 = 1 \text{ eV}$, siis $E_3 = 9 \text{ eV}$ ja keskmine energia oleks $E = 0,64 \cdot 1 + 0,36 \cdot 9 = 3,88 \text{ eV}$.

Kuna lainefunktsiooni ritta arendamine on üldjuhul väga keerukas, siis siin me analüüsisime juba etteantud lainefunktsioone.

Kommentaari:

Rääkides omafunktsioonide ortogonaalsuseks, me kasutasime analoogiat vektorite esitamisega kolmruumis. Mistahes vektori \vec{A} võime ristkoordinaadistikus esitada kujul

$$\vec{A} = a_1 \vec{e}_1 + a_2 \vec{e}_2 + a_3 \vec{e}_3 = \sum_{i=1}^3 a_i \vec{e}_i ,$$

kus \vec{e}_1, \vec{e}_2 ja \vec{e}_3 on x, y ja z telje sihilised ühikvektorid (tavalistes tähistes $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$), mis rahuldavad ortonormeerituse tingimust

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij} .$$

Kordajad a_1, a_2 ja a_3 on vektori \vec{A} koordinaadid (\vec{A} projektsioonid koordinaat-telgedele) antud ristkoordinaadistikus.

Funktsioonide korral me defineerisime skalaarkorrutise (bilineaarse vormi)

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) dV$$

ja näitasime, et hermiitilise operaatori omafunktsioonide korral on erinevate funktsioonide korral skalaarkorrutis võrdne nulliga ja samade funktsioonide korral võime selle normeerida ühele. Analogia põhjal vektoritega võime erinevaid omafunktsioone lugeda ortogonaalseteks ja peale normeerimist ühele vaadata neid kui „koordinaattelgede” sihilisi ühikvektoreid. Seetõttu etendavad funktsioonide reaksarendusel omafunktsioonid φ_1, \dots koordinaattelgede sihiliste ühikvektorite rolli ja kordajad c_1, \dots on analoogilised vektori koordinaatidele antud koordinaatsüsteemis.

Nii nagu me saame vektori \vec{A} esitada mõnes teises ristkoordinaadistikus

$$\vec{A} = \sum_{i=1}^3 b_i \vec{e}_i ,$$

saab ka funktsiooni ψ esitada mingi teise operaatori \hat{B} omafunktsioonide ψ_1, \dots kaudu

$$\psi = \sum_n d_n \psi_n .$$

11. Impulsimoment kvantmehaanikas

Impulsimomendi operaator, impulsimomendi komponentide mõõdetavus, impulsimomendi diskreetsus, orbitaalne kvantarv, magnetiline kvantarv, kerafunktsioonid, impulssmomendi piltlik kujutamine

Klassikalises mehaanikas on impulsimoment oluliseks füüsikaliseks suuruseks, kuna paljudel juhtudel kehtib impulsimomendi jäävus. Üheks selliseks näiteks on liikumine tsentraalsümmeetrilise jõu väljas. Nii nagu teised klassikalise füüsika suurused on pidevad ja võivad omada mistahes väärtusi, on seda ka impulsimoment. Kvantmehaanikas on impulsimoment samuti tähtis füüsikaline suurus. Selle kirjeldamisel on aga rida iseärasusi, mida me järgnevas asume vaatama. Kuna omaväärtusülesande lahendamine on impulsimomendi korral keeruline, siis antud kursuses esitame ainult põhitulemused.

Impulsimomendi operaator avaldus kujul (vaata §9)

$$\hat{L} = \vec{r} \times \hat{p} \equiv -i\hbar \vec{r} \times \nabla .$$

Ristkoordinaatides saame siit järgmised impulsimomendi operaatori komponendid

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \hat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad \hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) .$$

Impulsimomendi projektsioonide mõõdetavus. Selgitame kõigepealt impulsimomendi projektsioonide samaaegse mõõdetavuse. Selleks arvutame kommutaatorid (vaata järgnevaid kommentaare). Otsene arvutus annab

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y \right] = i\hbar \hat{L}_z, \quad \left[\hat{L}_z, \hat{L}_x \right] = i\hbar \hat{L}_y, \quad \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z \right] = i\hbar \hat{L}_x .$$

Siit selgub esimene impulsimomendi eripära mikromaailmas. Kuna operaatorid ei kommuteeru, siis pole neile vastavad füüsikalised suurused samaaegselt mõõdetavad. Täpselt saab mõõta ainult ühte impulssmomendi projektsiooni, näiteks z-teljele, ülejäänud kaks on aga sel juhul määramatud. Edaspidi võtamegi mõõdetavaks suuruseks z-telje sihilise projektsiooni L_z .

Osutub, et koos ühe projektsiooniga on mõõdetav ka impulssmomendi ruut ja seega ka impulssmoment ise. Tõepoolest, arvutades

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 ,$$

on otsese arvutuse teel võimalik veenduda (vaata järgnevaid kommentaare), et

$$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_x \right] = \left[\hat{L}^2, \hat{L}_y \right] = \left[\hat{L}^2, \hat{L}_z \right] = 0 .$$

Kuna samaaegselt mõõdetavatel operaatoritel on ühised omafunktsioonid, tuleks meil impulsimomendi ruudu ja tema projektsiooni arvutamiseks lahendada järgmine omaväärtusülesanne

$$\hat{L}^2 Y = L^2 Y, \quad \hat{L}_z Y = L_z Y.$$

Selle ülesande lahendamine on üsna keerukas, mistõttu anname ainult tulemuse. Eespool toodud omaväärtusülesandel on järgmised lahendid

$$\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm},$$

$$\hat{L}_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm},$$

kus impulsimomendi ruutu määraval kvantarvul l võivad olla väärtused

$$l = 0, 1, 2, \dots$$

ja antud l korral võib impulsimomendi projektsiooni määraval kvantarvul m korral olla $2l+1$ väärtust

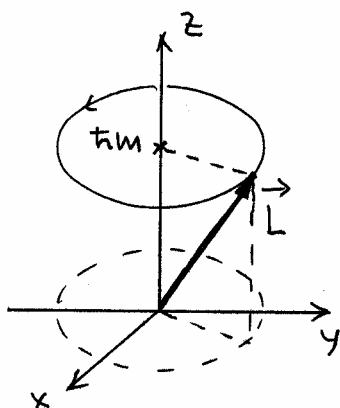
$$m = l, l-1, \dots, 0, \dots, -(l-1), -l.$$

Kvantarvu l nimetatakse orbitaalseks kvantarvuks, sest tsentraalsümmeetrilise välja korral iseloomustab ta osakese impulsimomenti (nõ orbitaalset liikumist). Kvantarvu m , mis määrab impulsimomendi projektsiooni, nimetatakse ajalooliselt magnetiliseks kvantarvuks. Viimane nimetus on tulnud sellest, et kvantarvuga m on seotud elektroni orbitaalsest olekust tingitud magnetmoment, samuti spektrijoonte lõhustumine magnetväljas.

Omafunktsioone Y_{lm} , mis kirjeldavad kindla impulsimomendi ja selle projektsiooniga olekuid, nimetatakse kerafunktsioonideks.

Teine impulsimomendi eripära mikromaailmas on selles, et nii impulsimoment kui ka selle projektsioon on diskreetne

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad L_z = \hbar m.$$



See on oluliselt erinev klassikalisest füüsikast, kus impulsimoment on pidev füüsikaline suurus ja võib omada mistahes mittenegatiivseid väärtusi.

Arvestades kvantarvule m lubatud väärtusi, saame me veel ühe olulise erinevuse klassikalisest füüsikast: impulsimoment on suurem kui tema maksimaalne projektsioon

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1) > (L_z)_{\max}^2 = \hbar^2 l^2.$$

Nimetatud iseärasus võimaldab anda klassikalise pildi

impulssmomendist kvantmehaanikas. Selleks kujutame impulsimomendi vektorina pikkusega $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ ja oletame, et see pretsesseerib ühtlaselt z-telje ümber nii, et projektsioon z-teljele omab kogu aeg kindlat väärtust $\hbar m$. Selle pildi järgi on impulssmomendi z-telje sihiline projektsioon täpselt määratud, projektsioonid x- ja y-teljele aga pidevalt muutuvad ja on seega määramata. Kuna $L > (L_z)_{\max}$, siis sobib see pilt ka maksimaalse projektsiooni $\hbar l$ korral. Nagu me varem juba mitmel korral oleme maininud, ei saa paljusid mikromaailma iseärasusi piltlikult ette kujutada ja seetõttu ei ole kasutatavad piltlikud mudelid täpsed. Seepärast ei saa ka siin esitatud mudelit eriti tõsiselt võtta. See annab küll pildi sellest, kuidas saaks olla võimalik, et üks projektsioon on täpselt määratu, ülejäänud aga mitte. Miks aga projektsioon on diksreetne ja teisi iseärasusi see ei seleta.

Kommentaariid:

1. Tõestame kommutatsiooniseose $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$. Selleks arvutame eraldi $\hat{L}_x \hat{L}_y f$ ja $\hat{L}_y \hat{L}_x f$, kus $f(x,y,z)$ on mingi suvaline diferentseeruv kolme muutuja funktsioon. Kasutades operaatorite kuju, saame

$$\hat{L}_x \hat{L}_y f = -\hbar^2 (y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}) (z \frac{\partial f}{\partial x} - x \frac{\partial f}{\partial z}) = -\hbar^2 (y \frac{\partial f}{\partial x} + yz \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial x} - xy \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} - z^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} + zx \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial z})$$

$$\hat{L}_y \hat{L}_x f = -\hbar^2 (z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}) (y \frac{\partial f}{\partial z} - z \frac{\partial f}{\partial y}) = -\hbar^2 (zy \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial z} - z^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} - xy \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} + x \frac{\partial f}{\partial y} + xz \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial y})$$

Lahutades alumise avaldi ülemisest, taanduvad teist järku tuletised välja ja tulemuseks saame

$$(\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x) f = -\hbar^2 (y \frac{\partial f}{\partial x} - x \frac{\partial f}{\partial y}) = i\hbar (-i\hbar) (x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}) f \equiv i\hbar \hat{L}_z f,$$

Mis tõestabki ülemise kommutatsiooniseose. Ülejäänud saame vastavate indeksite tsüklilise ümberpaigutamisega.

2. Tõestame kommutatsiooniseose $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$ (ülejäänud kahe tõestus on analoogiline). Siin

lähume \hat{L}^2 üldisest avaldisest ja kasutame impulsimomendi projektsioonide vahelisi kommutatsiooniseoseid. Lähtume seosest

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_z] = [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2, \hat{L}_z] = [\hat{L}_x^2, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_z]$$

(teises võrduses me kasutasime asjaolu, et iga operaator kommuteerub alati iseendaga, samuti ka iseenda ruuduga).

Arvutame kõigepealt $[\hat{L}_x^2, \hat{L}_z] = \hat{L}_x^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x^2$, tõstes esimeses liikmes kommutatsiooniseost $\hat{L}_x \hat{L}_z = \hat{L}_z \hat{L}_x - i\hbar \hat{L}_y$ kasutades operaatori \hat{L}_z järk-järgult vasakule. Saame

$$[\hat{L}_x^2, \hat{L}_z] = \hat{L}_x^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x^2 = \hat{L}_x \hat{L}_z \hat{L}_x - i\hbar \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_z \hat{L}_x^2 = -i\hbar \hat{L}_y \hat{L}_x - i\hbar \hat{L}_x \hat{L}_y$$

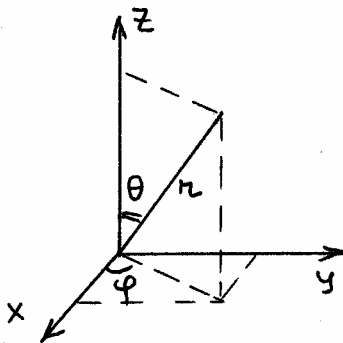
(projektsiooni ruuduga liikmed taandusid välja).

Analoogiliselt arvutame $[\hat{L}_y^2, \hat{L}_z] = \hat{L}_y^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y^2$, kasutades seost $\hat{L}_y \hat{L}_z = \hat{L}_z \hat{L}_y + i\hbar \hat{L}_x$.
Tulemuseks saame

$$[\hat{L}_y^2, \hat{L}_z] = \hat{L}_y^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y^2 = i\hbar \hat{L}_y \hat{L}_x + i\hbar \hat{L}_x \hat{L}_y .$$

Nagu näha, on tulemus eelmisega vastasmärgiline, mis tähendabki, et $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$.

3. \hat{L}_z omaväärtusülesanne. Impulsimomendi omaväärtusülesannet on otstarbekas lahendada sfäärilistes koordinaatides. Põhjus on selles, et impulsimoment on üldiselt seotud ruumi isotroopsusega ja meid huvitab sõltuvus ruumisuunast.



Kasutades joonisel toodud sfäärilisi koordinaate r, θ ja φ oleks nende seos ristkoordinaatidega järgmine

$$x = r \sin \theta \cos \varphi ,$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi ,$$

$$z = r \cos \theta .$$

Meie poolt kasutatavate operaatorite teisendamine sfäärilistesse koordinaatidesse ei ole põhimõtteliselt keeruline, küll aga aeganõudev, seepärast esitame siin impulssmomendi ruudu ja z-telje sihilise projektsiooni operaatori kuju ilma tuletuseta

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] ,$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} .$$

Kuna siin mingit radiaalsihilist sõltuvust ei ole, siis sõltuvad kerafunktsioonid ainult nurkadest θ ja φ

$$Y_{lm} = Y_{lm}(\theta, \varphi) .$$

Et operaatori \hat{L}_z kuju on sfäärilistes koordinaatides eriti lihtne, siis vaatame näitena operaatori \hat{L}_z omaväärtusülesannet ja näitame, millest tuleb L_z diskreetsus. Omaväärtusülesanne taandub antud juhul diferentsiaalvõrrandiks

$$-i\hbar \frac{\partial Y}{\partial \varphi} = L_z Y .$$

Selle võrrandi integreerimine annab tulemuseks (analoogilise võrrandi lahendasime impulsioperaatori korral)

$$Y(\varphi) = A e^{\frac{iL_z \varphi}{\hbar}},$$

kus A on mingi konstant. Kuna peale täispööret ümber z-telje me jõuame jälle samasse punkti tagasi, siis selleks, et saadud lahend oleks ühene, peab kehtima võrdus

$$Y(\varphi) = Y(\varphi + 2\pi).$$

See annab meile ülal leitud $Y(\varphi)$ kuju kasutades tingimuse

$$e^{\frac{iL_z 2\pi}{\hbar}} = 1,$$

millest saamegi L_z diskreetsuse

$$L_z = \hbar m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Nagu me näeme, annab \hat{L}_z omaväärtusülesande lahendamine kerafunktsioonide Y_{lm} sõltuvuse nurgast φ , \hat{L}^2 omaväärtusülesande lahendamine aga nende üldkuju, kus lisandub veel sõltuvus nurgast θ .

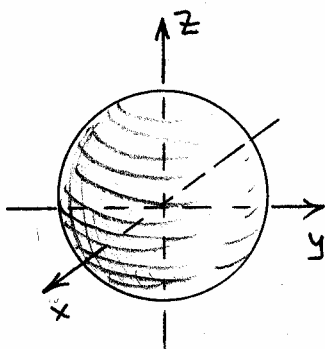
4. Kerafunktsioonid. Näitena kirjutame välja kerafunktsioonide üldkuju $l = 0$ ja $l = 1$ korral ning vaatame nende graafilist kujutamist.

$l = 0$ korral $m = 0$ ja saame

$$Y_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}},$$

$l = 1$ korral on $m = +1, 0, -1$ ja saame kolm funktsiooni

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}.$$

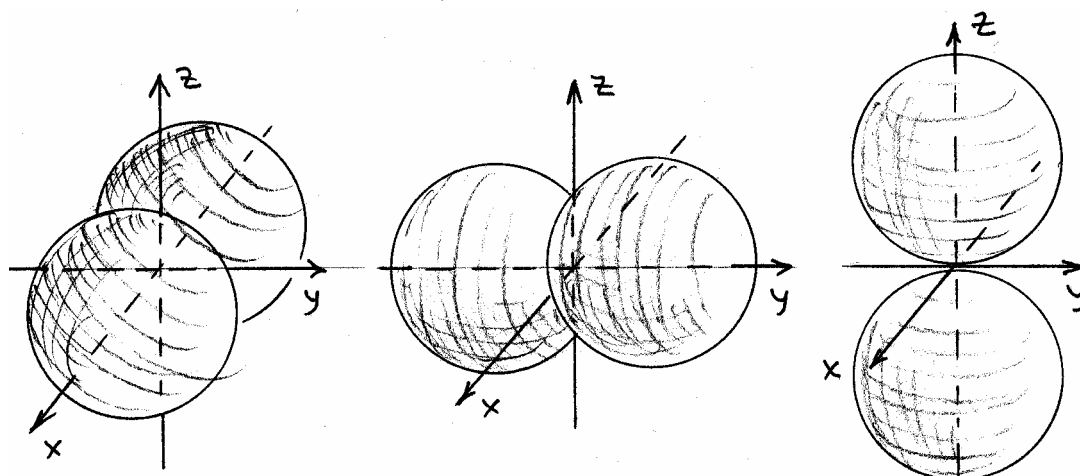


Kerafunktsioonide kujutamiseks kasutatakse järgmist meetodit: iga θ ja φ väärtuse korral kujutab funktsiooni $Y(\theta, \varphi)$ punkt, mille kaugus koordinaatide alguspunktist on võrdne funktsiooni $Y(\theta, \varphi)$ enda väärtusega. $l = 0$ korral kujutaks funktsiooni Y_{00} kerapind raadiusega $1/2\sqrt{\pi}$.

Kuna $l = 1$ korral on Y_{11} ja Y_{1-1} kompleksarvulised, siis sama meetodi rakendamiseks joonistatakse välja nende reaalarvulised lineaarkombinatsioonid

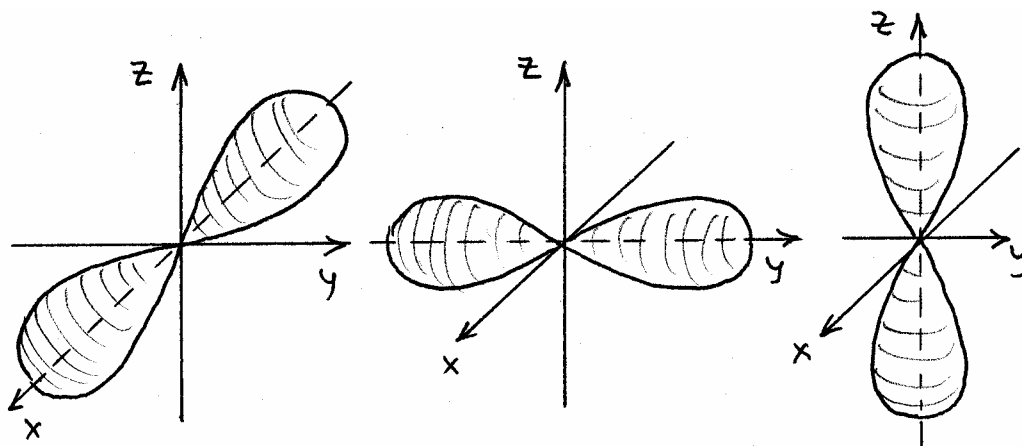
$$Y_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{1-1} - Y_{11}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \cos \varphi,$$

$$Y_y = \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{1-1} + Y_{11}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \sin \varphi .$$



(Ülaltoodud joonisel on kujutatud kerafunktsioonid Y_x , Y_y ja Y_{10} .)

Nagu me järgnevas näeme, on elektroni olekud tsentraalsümmeetrilises väljas seotud kerafunktsioonidega ja seetõttu on laengujaotuse sõltuvus nurkadest θ ja φ määratud samuti kerafunktsioonidega. Kuna laengujaotus on seotud tõenäosusega, siis on see määratud kerafunktsiooni mooduli ruuduga - $|Y_{lm}|^2$. Olekus $l = 0$ on laengujaotus kera-sümmeetriline, sest $|Y_{00}|^2 = 1/4\pi$ ei sõltu suunast. Teistes olekutes on suunast sõltuv laengujaotus keerulisem. Näitena joonistame välja $l = 1$ funktsioonide $|Y_x|^2$, $|Y_y|^2$ ja $|Y_{10}|^2$ graafikud.



12. Vesiniku aatom kvantmehaanikas

Tsentraalsümmeetriline väli, impulsimomendi jäävus, elektroni energia, peakvantarv, orbitaalne kvantarv, magnetiline kvantarv, elektroni olekud vesiniku aatomis, tõenäosustihedus vesiniku aatomis, elektroni kvantolek

Schrödingeri võrrandi lahendamisel H-aatomi korral puutume me kokku nn. tsentraalsümmeetrilise välja juhuga, kus elektroni potentsiaalne energia $U = U(r)$ sõltub ainult kaugusest

$$U(r) = -\frac{be^2}{r}$$

ja tuleb lahendada järgmine statsionaarsete olekute Schrödingeri võrrand

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta\varphi - \frac{be^2}{r}\varphi = E\varphi .$$

(Siin ja edaspidi on meil massi tähistamiseks M , sest olekud sõltuvad magnetilisest kvantarvust m .)

Klassikalises füüsikas on tsentraalsümmeetrilises väljas liikumisel lisaks energiale jäävaks suuruseks veel impulsimoment. Nii kehtib näiteks planeedi tiirlemisel ümber Päikese nii energia kui ka impulsimomendi jäävuse seadus. Viimasest järeldub see, et planeedi trajektoor asetseb alati ühes tasandis, samuti ka Kepleri II seadust, mille kohaselt planeedi sektoriline kiirus on jääv. Kuna nii energia kui ka impulsimomendi jäävuse seadused on üldise iseloomuga, siis peavad nad kehtima ka kvantteoorias. Osutub, et see on tõepoolest nii. Selleks tuleb aga näidata, et energiaoperaator (Hamiltoni operaator) ja impulsimomendi operaator kommuteeruvad, sest ainult siis on nad samaaegselt määratavad suurused.

Et näidata impulsimomendi jäävust, tuleb meil Schrödingeri võrrand välja kirjutada sfäärilistes koordinaatides r, θ ja φ . Selleks tuleb avaldada Laplace'i operaator Δ sfäärilistes koordinaatides. Jättes arvutused tegemata, anname ainult tulemuse

$$\Delta = \Delta_r - \frac{1}{r^2\hbar^2}\hat{L}^2 ,$$

kus Laplace'i operaatori radiaalosa Δ_r on kujul

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

ja nurkadest θ ja φ sõltuv osa annab eelmise punkti kommentaaris toodud impulsimomendi ruudu operaatori.

Schrödingeri võrrand kujutab endast teatavasti energiaoperaatori omaväärtusülesannet

$$\hat{H} \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) ,$$

kus \hat{H} avaldub antud juhul kujul

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_r - \frac{be^2}{r} + \frac{1}{2Mr^2} \hat{L}^2 .$$

Kuna \hat{H} nurkadest sõltuv osa annab impulssmomendi ruudu, siis on lihtne veenduda, et operaatorid \hat{H} ja \hat{L}^2 kommuteeruvad

$$\left[\hat{H}, \hat{L}^2 \right] = 0 ,$$

sest \hat{L}^2 radiaalmuutujale r ei mõju.

Et \hat{H} ja \hat{L}^2 kommuteeruvad, on neile vastavad füüsikalised suurused samaaegselt mõõdetavad ja seetõttu kehtib energia ning impulssmomendi jäävus ka kvantteoorias.

Samaaegselt mõõdetavate suuruste operaatoritel on teatavasti ühised omafunktsioonid. Kuna \hat{L}^2 omafunktsioonid $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ on meil põhimõtteliselt leitud, siis otsime energia omafunktsioone kujul

$$\varphi(\vec{r}) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) ,$$

kus $R(r)$ on mingi otsitav radiaalmuutuja funktsioon. Asendades $\varphi(\vec{r})$ Schrödingeri võrrandisse ja arvestades, et $\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$, saame peale kerafunktsioonide taandamist radiaalosa jaoks võrrandi

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_r R(r) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} - \frac{be^2}{r} \right) R(r) = E R(r) .$$

Elektroni energia. Saadud võrrandi lahendamise üldprotseduur on analoogiline harmoonilise ostsillaatori juures vaadatuga. Kuna lahndamine on keerukas ja lahendi leidmine ei kuulu antud kursuse raamesse, siis esitame ainult põhitulemused. Osutub, et füüsikaliselt rahuldavad lahendid on ainult järgmistel energia väärtustel

$$E_n = -\frac{Mb^2 e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} , \quad n = 1, 2, \dots ,$$

kus kvantarvu n nimetatakse peakvantarvuks. Nagu esitatud tulemusest on näha, annab kvantteooria samad lubatud energia väärtused kui Bohri teooria.

Energiale E_n vastavad radiaalfunktsioonid sõltuvad aga kahest kvantarvust n ja l : $R = R_{nl}(r)$, kusjuures orbitaalne kvantarv l saab antud n korral omada väärtusi

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1 .$$

Elektroni olekud vesinikuaatomis. Seetõttu avaldub Schrödingeri võrrandi üldlahend kujul

$$\varphi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) ,$$

mis kvantarvudele l ja m eespool toodud kitsendusi arvestades tähendab seda, et energiale E_n vastab üldjuhul mitu erinevat füüsikalist olekut. Kuna antud n korral $l = 0, 1, \dots, n-1$ ja iga l korral omab m $2l+1$ väärtust $m = +l, \dots, 0, \dots, -l$, siis saame

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$

eri olekut.

Põhiolekule energiaga E_1 vastab üks elektroni olek φ_{100} , sest $n = 1$ ja $l = m = 0$. Esimesele ergastatud nivoole E_2 aga vastab juba neli olekut, sest $n = 2$ korral saab orbitaalsel kvantarvul l olla kaks väärtust $l = 0$ ja $l = 1$. Esimesel juhul saame oleku φ_{200} ($n = 2, l = m = 0$), teisel juhul aga kolm olekut $\varphi_{211}, \varphi_{210}, \varphi_{21-1}$ ($n = 2, l = 1, m = +1, 0, -1$). Järgmisele nivoole E_3 aga vastab juba 9 olekut, sest nüüd võib orbitaalne moment omada ka väärtust $l = 2$, millel on viis projektsiooni.

Elektroni leidmise tõenäosus. Järgnevalt vaatame elektroni leidmise tõenäosust erinevates olekutes. Tõenäosus elektroni leidmiseks ruumielemendis dV avaldus valemiga

$$dP = |\varphi|^2 dV .$$

Sfäärilistes koordinaatides avaldub ruumielement kujul

$$dV = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi \equiv r^2 dr d\Omega ,$$

kus $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ on ruuminurga element. Arvestades lahendi üldkuju $\varphi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, saame

$$dP = |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega .$$

Siit on näha, et tõenäosuse sõltuvuse ruumisuunast suunast (nurkadest θ ja φ) määravad ära kerafunktsioonid. Järgnevas me näeme, et elektroni asukoht aatomis ei ole lokaliseeritud, elektron kujutab endast pigem teatava kindla kujuga elektronpilve. Elektronpilve üldkuju on määratud kerafunktsiooni mooduli ruuduga ($l=0$ ja $l=1$ korral me vaatame $|Y_{lm}|^2$ graafikuid eelmise punkti lõpus).

Järgnevalt vaatame tõenäosuse radiaalsihilist sõltuvust ehk sõltuvust kaugusest koordinaatide alguspunktist. Selleks, et saada elektroni leidmise tõenäosust dP_r vahemikus $r, r+dr$, peame ülaltoodud avaldist integreerima üle kogu ruuminurga (φ järgi $0 \div 2\pi$ ja θ järgi $0 \div \pi$). Kuna kerafunktsioonid normeeritakse ühele

$$\int_{\Omega} |Y_{lm}|^2 d\Omega = 1 ,$$

siis avaldub radiaalsihiline tõenäosus valemiga

$$dP_r = |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr ,$$

millest radiaalne tõenäosustihedus avaldub kujul

$$\rho(r) \equiv \frac{dP_r}{dr} = |R_{nl}(r)|^2 r^2 .$$

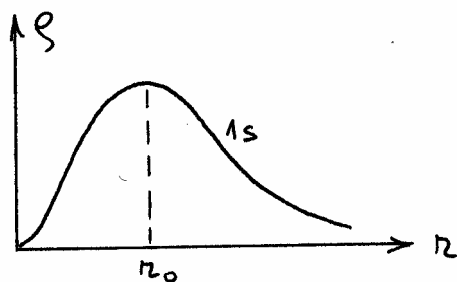
Joonistades välja erinevatele olekutele vastavad tõenäosustiheduse graafikud, saamegi ettekujutuse elektroni leidmise tõenäosusest erinevatel kaugustel tuumast.

Näitena vaatame kõigepealt H-aatomi põhiolekut. Seda kirjeldab radiaalfunktsioon

$$R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{r_0^3}} e^{-\frac{r}{r_0}} ,$$

kus $r_0 = \hbar^2 / Mbe^2$ on nn Bohri raadius. Põhioleku tõenäosustihedus avaldub valemiga

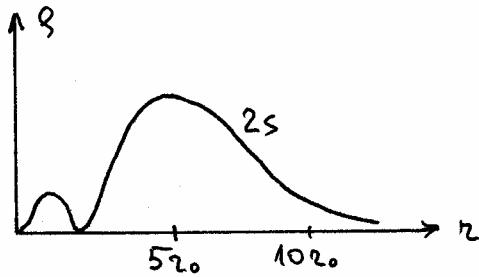
$$\rho = \frac{1}{r_0^3} e^{-\frac{2r}{r_0}} r^2 .$$



Vastav tõenäosustihedus on kujutatud kõrvaloleval joonisel. Nagu näha, on elektroni leidmise tõenäosus kõikjal nullist erinev ja seetõttu ei saa rääkida elektroni liikumisest mööda kindlat trajektoori. Täpsem oleks öelda, et elektroni laeng on tuuma ümber "laiali määratud" ja moodustab elektronpilve. Elektronpilve kuju on statsionaarne, st ei sõltu ajast.

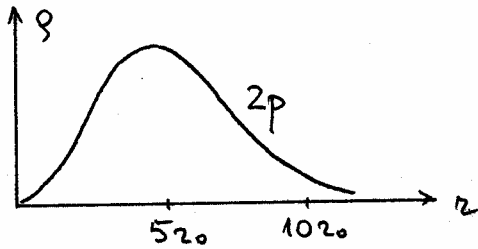
Graafikult on näha, et elektroni leidmise tõenäosus ei ole erinevatel kaugustel tuumast ühesugune. Tuumast lähedal ja tuumast kaugel on elektroni leidmise tõenäosus väike. Suurim tõenäosus on elektroni leida seal, kus graafiku all olev pindala on suurim. Leides võrrandist $d\rho/dr = 0$ tõenäosustiheduse graafiku maksimumi asukohta, näeme et tõenäosustihedus on maksimaalne kaugusel $r = r_0$. Seega on kõige tõenäosem leida elektroni tuumast Bohri raadiuse kaugusel või sellele lähedastel kaugustel. (Bohri teoorias oli r_0 teatavasti põhiolekule vastava Bohri orbiidi raadius.)

Esimese ergastatud oleku ($n = 2$) korral saame kaks radiaalfunktsiooni



$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{r_0^3}} \left(2 - \frac{r}{r_0}\right) e^{-\frac{r}{2r_0}},$$

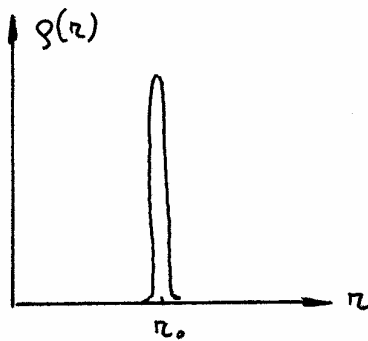
$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{r_0^3}} \frac{r}{r_0} e^{-\frac{r}{2r_0}}.$$



Need kirjeldavad olekuid orbitaalse kvantarvuga $l = 0$ ja $l = 1$. Vastavad tõenäosustihedused on kujutatud kõrvalolevatel joonistel. Nüüd on tõenäosusjaotus keerukam. Üldine tendents ergastatud olekute korral on aga ilmne: elektroni leidmise tõenäosus tuumast kaugemal kiiresti kasvab.

Kommentaariid:

1. Nagu eeltoodust on näha, erineb H-aatomi kvantmehaaniline käsitlus oluliselt Bohri teoorias toodust. Olgugi, et Bohri teooria andis õige energia ja seega ka õige spektri, oli kõik ülejäänud Bohri teoorias väär.



See ei ole üllatav, sest oli ju Bohri teooria alles esimene etapp tegeliku kvantteooria loomisel. Nagu me nägime, ei ole ettekujutus elektroni tiirlemisest kindlat trajektoori mööda õige. Kui me näiteks vaataksime põhiolekut Bohri teoorias, kus elektron peaks tiirlema tuuma ümber Bohri raadiuse kaugusel, siis kujutades seda analoogilise tõenäosusjaotusena, saaksime me kõrvaloleva pildi (tõenäosus erineb nullist ainult ühe kauguse $r = r_0$ korral). Lihtne on veenduda, et see erineb oluliselt eespool saadud tegelikust põhioleku tõenäosusjaotusest.

Huvitav on ka see, et Bohri kvanttingimus pole õige. Bohri teoorias oli energia E_n korral impulsimoment $L = n\hbar$, mis tähendaks, et $l = n$. Põhiolekus $n = 1$ oleks seega $L = \hbar \neq 0$. Tegelikult on aga põhioleku impulsimoment võrdne nulliga, samuti ei ole ühegi n korral impulsimomendi väärtus $l = n$ võimalik. Vaatamata mõningatele tõsistele puudustele oli Bohri teooria ikkagi väga oluliseks etapiks kvantmehaanika tekkimisel, sest kõige olulisem oli seal ettekujutus statsionaarsetest kindla energiaga olekutest.

2. Vesiniku aatomi analüüs kujutab endast olulist erijuhtu elektroni olekutest tsentraalsümmeetrilises väljas $U = U(r)$. Üldjuhul oleks lahendusprotseduur analoogiline ja ka statsionaarsete olekute üldkuju oleks samasugune

$$\varphi(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Radiaalfunktsioonide leidmiseks tuleks lahendada Schrödingeri võrrand

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_r R(r) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + U(r) \right) R(r) = E R(r) .$$

Millised on energia omaväärtused üldjuhul? Need on loomulikult iga $U = U(r)$ korral isesugused. Oluline on aga see, et energia on diskreetne ja sõltub üldjuhul kahest kvantarvust. Ainult kulonilise välja korral ($U \sim r^{-1}$) sõltub energia ühest kvantarvust - peakvantarvust n , kõikide muude tsentraalsümmeetriliste väljade korral aga ka veel orbitaalsest kvantarvust l

$$E = E_{nl} .$$

Viimane tulemus on meil vajalik siis kui me hakkame vaatama keerukamaid aatomeid, milles on rohkem kui üks elektron. Nende aatomite korral ei ole Schrödingeri võrrandi otsene lahendamine enam võimalik ja elektroni olekute ning energiatega leidmiseks tuleb pöörduda erinevate lähendusmeetodite poole. Osutub, et piisavalt heaks meetodiks on nn üheelektroniline lähend, mille me saame, vaadates iga elektroni sõltumatut liikumist teatud keskmistatud tsentraalsümmeetrilises väljas $U = U(r)$, mis lisaks tuumale arvestab kaudselt ka ülejäänud elektronide mõju. On ilmne, et selline tsentraalsümmeetriline väli ei ole enam kuloniline ja seetõttu sõltub elektroni energia ka orbitaalsest kvantarvust l .

3. Nagu me näeme, sõltub elektroni energia H-aatomis ainult peakvantarvust n , elektroni olek aga veel orbitaalsest kvantarvust l ja magnetilisest kvantarvust m , st orbitaalsest impulssmomentist ja selle projektsioonist. Osutub, et see ei ole veel kõik. Järgmises punktis näeme, et neile tuleb lisada veel üks kvantarv - elektroni spinni ehk omaimpulsimomendi projektsioon σ . Seega on elektroni olek aatomis määratud nelja kvantarvuga n, l, m, σ . Iga nelja kvantarvu lubatav kombinatsioon (n, l, m, σ) annab ühe konkreetse oleku, mida nimetatakse elektroni kvantolekuks.

4. Vaadates elektroni energiasid ja olekuid vesiniku aatomis, me eeldasime, et elektron liigub paigalseisva, st ülimalt väikese tuuma ümber. Selleks, et arvestada tegelikku tuuma massi, tuleb nii, nagu me Bohri teooria juures mainisime, võtta elektroni massi M asemele süsteemi elektron-tuum taandatud mass μ .

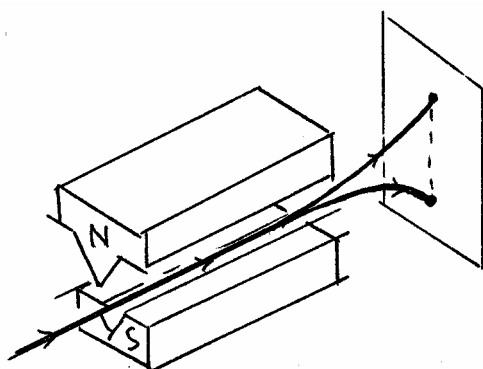
Nii, nagu Bohri teoorias, saab ka siin kõik tulemused üldistada vesinikusarnaste aatomite juhule. Selleks tuleb igal pool asendada $e^2 \rightarrow Ze^2$.

13. Elektroni spinn

Stern-Gerlachi katse, seos magnetmomendi ja impulsimomendi vahel, elektroni spinn, spinniga seotud magnetmoment, magnetmoment välises magnetväljas, energianivoode lõhustumine magnetväljas, Zeemani efekt, Bohri magneton, elektroni kogumoment, mikroosakese spinn

Seni me vaatasime mikroosakesi, sealhulgas ka elektroni objektina, millel on kindel seisumass ja elektrilaeng. Osakeste uurimine näitas, et mikroosakestel on veel omadusi, mis on nende omavahelistes mõjudes olulised. Siin vaatame ühte nendest - osakese omaimpulsimomenti ehk spinni ja sellega seotud magnetmomenti.

Omaimpulsimomendist võime rääkida ka klassikalises füüsikas. Vaadates näiteks Maa tiirlemist ümber Päikese, saab arvutada Maa impulsimomendi Päikese suhtes. See iseloomustab Maa orbitaalset liikumist ja on analoogiline näiteks elektroni orbitaalse momendiga aatomis. Sellest analoogiast on muide tulnudki orbitaalse kvantarvu nimetus. Lisaks orbitaalsele liikumisele iseloomustab Maad veel ööpäevane pöörlemine oma sümmeetriatelje ümber, mida samuti iseloomustab mingi kindel impulsimoment. Viimast võib nimetada Maa omaimpulsimomendiks. See, et ka mikroosakestel on omaimpulsimoment, ei tohiks ülaltoodud analoogia põhjal olla üllatav. Algul kui avastati, et elektronil on olemas ka omaimpulsimoment ehk spinn, püütigi seda tõlgendada elektroni pöörlemisena oma sümmeetriatelje ümber. Osutus, et selline klassikaline ettekujutus ei ole õige, spinn on oluliselt kvantmehaaniline suurus ja sellel puudub täpne klassikaline analoog. Kuidas spinn avastati ja miks tal klassikalist analoogi pole, püüame antud punktis selgitada.



Elektroni spinni ja sellega seotud magnetmomendi olemasolu selgus Stern-Gerlachi katses (1922). Oma katses uurisid O. Stern ja W. Gerlach hõbeda aatomite kõrvalekaldumist tugevalt mittehomogeenses magnetväljas. Osake, millel on magnetmoment $\vec{\mu}$, omab magnetväljas induksiooniga \vec{B} energiat

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} .$$

Magnetväljas mõjuv jõud avaldub kujul $\vec{F} = - \text{grad } U = \text{grad} (\vec{\mu} \cdot \vec{B})$. Oletades, et meil on mittehomogeenne magnetväli, milles magnetvälja suund muutub vähe, magnetvälja väärtus aga välja sihis muutub, mõjub osakesele väljasihiline jõud

$$\vec{F} = \mu_B \text{grad } B ,$$

kus μ_B on magnetmomendi väljasihiline komponent. Selle jõu mõjul kalduvad väljaga risti liikuvad osakesed oma esialgsest sihist kõrvale, kõrvalekalle on seda suurem, mida suurem on magnetvälja gradient (välja mittehomogeensus).

Stern-Gerlachi katse tulemused olid tol ajal üllatavad, sest magnetvälja läbinud osakeste kimp lõhustus kaheks, andes ekraanile ainult kaks teineteisest eraldatud sümmeetrilist jälge. Oletades, et osakeste magnetmomendi väärtus on μ , peaks ekraanile tekkima joonisel punktiirina märgitud pidev joon, mis vastaks magnetmomendi võimalikele projektsioonidele vahemikus $+\mu$ ÷ $-\mu$. Aatomite magnetmomendid on kimbuses orienteeritud kaootiliselt ja seetõttu esinevad klassikalisest füüsikast lähtudes kõik projektsioonid võrdse tõenäosusega.

Katse tulemustest saab järeldada, et magnetmoment omab ainult kahte väljasihilist projektsiooni $+\mu$ ja $-\mu$, mis tekitabki aatomite kimbu sümmeetrilise lahutumise kaheks kimbuks. Katse tulemustest sai mõõta ka magnetmomendi väärtuse μ , mida oleks loogiline lugeda elektroni magnetmomendiks. See, et hõbeda aatomitega tehtud katsest saame just elektroni magnetmomendi, seletame hiljem. Siinkohal võib ainult mainida, et sellist katset on hiljem korratud ka elektronkimbuga ja katsetulemus on sama.

Enne kui asuda Stern-Gerlachi katse juurde, vaatame seost orbitaalse momendi ja magnetmomendi vahel. Klassikalisel teoorias saame tuuma ümber tiirleva elektroni magnetmomendi ja impulsimomendi vahel seose

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2M} \vec{L} .$$

Täpselt sama seose, ainult et vastavate operaatorite vahel, saab tuletada kvantmehaanikas

$$\hat{\vec{\mu}} = -\frac{e}{2M} \hat{\vec{L}} .$$

Lihtne on näha, et orbitaalse magnetmomendiga Stern-Gerlachi katsetulemust seletada ei saa, sest orbitaalsel momendil on alati paaritu arv projektsioone. Nii oleks näiteks $l = 1$ korral kolm projektsiooni, mis vastaks magnetilise kvantarvu väärtustele $m = +1, 0, -1$ ja seetõttu peaks olema ka kolmas, magnetväljas otseliikuv komponent, mis vastaks nullprojektsioonile. Probleemile andsid 1925.a. lahenduse G.E. Uhlenbeck ja S.A. Goudsmit, oletades et elektronil on veel omaimpulsimoment ehk spinn ja sellega on seotud vastav magnetmoment.

Oletades, et elektroni spinn \vec{s} on samasuguste matemaatiliste omadustega, nagu impulsimoment, oleks spinni kirjeldavad lainefunktsioonid leitavad analoogilisest omaväärtusülesandest

$$\hat{s}^2 \chi = \hbar^2 s(s+1) \chi , \quad \hat{s}_z \chi = \hbar \sigma \chi ,$$

kus s oleks spinni kirjeldav kvantarv ja σ kirjeldaks spinni projektsiooni z-teljele, kusjuures

$$\sigma = +s, \dots, -s .$$

Kuna osakeste kimp lõhustus kaheks, on spinni projektsioone ainult kaks. Kuna projektsioonide arv on $2s+1$, tuleb meil järeldada, et elektroni spinn (spinni kirjeldav kvantarv) on üks kahendik

$$s = \frac{1}{2} .$$

Spinni projektsiooni väärtused aga on

$$\sigma = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} .$$

Olgugi, et orbitaalse momendi korral on võimalikud ainult täisarvulised orbitaalse kvantarvu väärtused, ei ole poolarvulised väärtused vastuolus üldise impulsimomendi formalismiga ja seetõttu lubab kvantmehaanika spinni jaoks väärtusi

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots .$$

st nii täis- kui ka poolarvulisi väärtusi.

Oletades, et elektroni spinniga on seotud magnetmoment, saame Stern-Gerlachi katse tulemustest lähtudes seose

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{M} \vec{s} .$$

Nagu näha, on see seos analoogiline seosega orbitaalse magnetmomendi ja orbitaalse momendi vahel, erinevus on ainult kordajas $1/2$.

Leides siit spinni magnetmomendi projektsiooni z-teljele

$$(\vec{\mu}_s)_z = -\frac{e\hbar}{M} \sigma ,$$

saame vastava magnetmomendi väärtuseks

$$\mu_s = \frac{e\hbar}{2M} \equiv \mu_B .$$

Nagu näha, on elektroni magnetmoment võrdne Bohri magnetoniga, mis on elektroni magnetmomendi loomulikuks ühikuks aatomis. Bohri magnetoni väärtuseks saame

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2M} = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2 .$$

Elektroni energianivoode muutus välises magnetväljas. Jättes elektroni spinniga seotud magnetmomendi arvestamata, vaatame mis juhtub aatomis liikuva elektroniga kui aatom asetseb välises homogeenses magnetväljas. Kuna elektron omab orbitaalse liikumise tõttu magnetmomenti, saab aatom magnetväljas lisaenergia

$$\Delta U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} .$$

Seetõttu tuleb meil vastava Schrödingeri võrrandi saamiseks lisada potentsiaalsele energiale seda lisaenergiat arvestav operaator

$$\Delta \hat{U} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B} ,$$

mis impulsimomendi kaudu avaldub kujul

$$\Delta \hat{U} = \frac{e}{2M} \hat{\vec{L}} \cdot \vec{B} .$$

Energianivoode arvutamiseks magnetväljas tuleks meil lahendada Schrödingeri võrrand

$$\hat{H}\varphi \equiv \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + U + \Delta \hat{U}\right)\varphi = E'\varphi .$$

Osutub, et antud juhul on selle võrrandi lahendamine on lihtne, kui me oskame lahendada võrrandit

$$\hat{H}_0 \varphi \equiv \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + U\right)\varphi = E_0 \varphi ,$$

st leida elektroni olekuid aatomis ilma magnetväljata. Viimane võrrand kirjeldab elektroni olekuid aatomis. Nagu me varem rääkisime, sõltub elektroni energia aatomis üldjuhul kahest kvantarvust

$$E_0 = E_{nl} ,$$

olekud aga endiselt kolmest kvantarvust

$$\varphi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) .$$

Kirjutame nüüd võrrandi magnetvälja korral kujul

$$\left(\hat{H}_0 + \frac{e}{2M}\hat{\vec{L}} \cdot \vec{B}\right)\varphi = E'\varphi .$$

Kuna magnetvälja võib aatomi piires lugeda konstantseks, on loogiline valida z-telg magnetvälja sihis. Sel juhul

$$\hat{\vec{L}} \cdot \vec{B} = \hat{L}_z B .$$

Arvestades, et φ_{nlm} on \hat{L}_z omafunktsioon, võime kirjutada

$$\hat{L}_z B \varphi_{nlm} = \hbar m B \varphi_{nlm}$$

ja ülaltoodud võrrand avaldub nüüd kujul

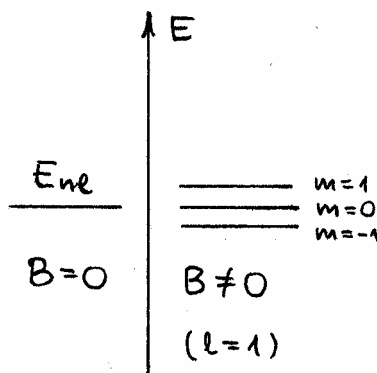
$$(\hat{H}_0 + \frac{e\hbar m B}{2M})\varphi_{nlm} = E'\varphi_{nlm} .$$

Kirjutades selle järgmiselt

$$\hat{H}_0 \varphi_{nlm} = (E' - \frac{e\hbar m B}{2M})\varphi_{nlm} ,$$

näeme, et meie uus ülesanne taandus juba lahendatud ülesandeks $\hat{H}_0\varphi = E_0\varphi$. Siit saame energia väärtusteks magnetväljas

$$E' = E_{nl} + \frac{e\hbar B}{2M} m .$$



Nagu näha, lõhustub nivoo E_{nl} $2l+1$ nivooks, sest kvantarv m omab $2l+1$ väärtust $+l, \dots, 0, \dots, -l$. Kvantarvu m , mis tegelikult iseloomustab impulsmomendi projektsiooni, hakati nimetama magnetiliseks kvantarvuks just seetõttu, et see määrab energianivoode lõhustumise magnetväljas.

Energianivoode lõhustumine magnetväljas tingib omakorda spektrijoonte lõhustumise, s.t. ühe spektrijoone asemel tekib magnetväljas mitu lähedal asetsevat spektrijoont.

Spektrijoonte lõhustumise magnetväljas avastas 1896.a. P. Zeeman ja seda hakati nimetama Zeemani efektiks. Siin esitatud energianivoode lõhustumise teooriat võiks nimetada naiivseks, sest me ei arvesta elektroni spinni ega ka aatomi energianivoode peenstruktuuri. Sellele vaatamata annab meie lihtne teooria Zeemani efekti seletamise põhijooned.

Vaatame veelkord saadud tulemust. Lisaenergia, mille võrra esialgne energia muutub, oli

$$\Delta E = (\frac{e\hbar}{2M} m) B .$$

Sulgudes olev suurus iseloomustab elektroni orbitaalset magnetmomenti. Siit on näha, et ka orbitaalset magnetmomenti iseloomustab Bohri magneton

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2M} .$$

Lõhustunud energianivood on sõltumata orbitaalse momendi väärtusest võrdse vahega

$$\mu_B B .$$

Viimane avaldis võimaldab hinnata energianivoode lõhustumise suurust. Võttes $B = 1$ T, saaksime energia $9 \cdot 10^{-24}$ J $\approx 10^{-23}$ J. Elektronvoltides oleks see ca 10^{-4} eV. Kuna energianivoode

vahe aatomis on elektronvoldi suurusjärgus, siis on energianivoode lõhustumine väiksemates väljades suhteliselt väike.

Kui veel rääkida Zeemani efektist, siis on kahte tüüpi Zeemani efekti, normaalne Zeemani efekt, kus magnetväljas tekib ühe spektrijoone asemel kolm spektrijoont ja anomaalne Zeemani efekt, kus magnetväljas tekib ühe asemel parisarv spektrijooni. Nimetused tekkisid seetõttu, et normaalse Zeemani efekti, st kolme joone tekkimise sai põhimõtteliselt ära seletada ka klassikalise elektrodünaamikaga, anomaalset aga ei saanud ja seetõttu oligi ta iseäralik ehk anomaalne. Olgu öeldud, et seletuse Zeemani efektile annab ainult kvantmehaanika. Kuna vastav tulemus on suhteliselt keeruline, siis anname ainult tulemuse, mis avaldub suhteliselt lihtsa valemiga.

Üldise Zeemani efekti käsitluse juures tuleb arvestada ka spinniga seotud magnetmomenti

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{M} \vec{s} ,$$

mis annab energiasse panuse

$$\Delta \hat{U}_s = -\hat{\vec{\mu}}_s \cdot \vec{B} = \frac{e}{M} \vec{s} \cdot \vec{B} .$$

Lisaks aga tuleb arvestada seda, et spinni arvestamisel määrab olekuid aatomis mitte orbitaalne moment, vaid kogumoment (orbitaalne moment kui ka spinn on samalaadsed füüsikalised suurused) \vec{J}

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{s} .$$

Kuna mõlemad liidetavad on diskreetsed, siis on põhjust arvata, et ka kogumoment on diskreetne, sest mistahes impulssmoment võib omada ainult väärtusi 0, 1/2, 1, Seetõttu saab ka kogumoment omada ainult samu väärtusi 0, 1/2, 1,

Kui orbitaalse kvantarvu väärtuseks on l, siis kogumomenti iseloomustav kvantarv j saab omada kahte võimalikku väärtust

$$j = l + \frac{1}{2} \quad ja \quad j = l - \frac{1}{2}$$

(l=0 korral teist väärtust ei ole). Esimene kogumoment tekib siis kui orbitaalne moment ja spinn on samasuunalised, teine siis kui nad on vastassuunalised.

Eelöeldut arvestades annab range Zeemani efekti teooria energianivoode lõhustumiseks valemi

$$\Delta E = \frac{e\hbar g B}{2M} m_j .$$

Pealtnäha on valem sarnane eespool toodud valemiga, kuid siin on kaks väga olulist erinevust. Esiteks sõltub ΔE kogumomendi projektsioonist m_j , mis omab $2j + 1$ väärtust

$$m_j = +j, \dots, -j .$$

Teiseks tuleb sisse tegur g , mida nimetatakse güromagnetiliseks kordajaks ehk Landé teguriks. Viimane iseloomustab seost magnetmomendi ja kogumomendi vahel ning sõltub nii orbitaalsest momendist kui ka spinnist. Kuna tegur g on erinevate energianivoode korral üldiselt erinev, siis on lõhustunud energianivoode vahed ka enamasti erinevad.

Ülaltoodud valemist me saame aga anomaalse Zeemani efekti, sest kogumoment on poolarvuline ja seetõttu omab kogumomendi projektsioon paarisarvu väärtusi, mis omakorda tingib ka paarisarvu spektrijoonte tekkimise. Nii näiteks on orbitaalse momendi $l=1$ korral kogumomendi väärtused $j=3/2$ ja $j=1/2$. Esimesel juhul tekib neli lõhustunud energianivood, teisel juhul kaks.

Paistab, et kvantteooriast järeldub ainult anomaalne Zeemani efek. Tegelikult on asi keerukam kui see, millest me siin rääkisime. Ülaltoodud valemit tuleks veel üldistada mitme elektroni juhule, mis tähendab, et tuleks arvestada elektronkate orbitaalset kogumomenti l ja koguspinni s . Sel juhul võib kogumoment j olla nii täisarvuline (kui koguspinn on null) või poolarvuline. Esimesel juhul lõhustub nivoo paarituks arvuks, teisel juhul paaris arvuks energianivooks. Seetõttu on võimalik ka spektrijoonte lõhustumine paarituks või paariarvuks spektrijooneks.

Siin esitatud lihtsustatud seletus näitab, et alles kvantmehaanika seletas ära Zeemani efekti olemuse. Enne kvantteooria loomist püüti Zeemani efekti seletada klassikalise teooriaga. Klassikalise teooria võimaldas seletada ainult spektrijoonte lõhustumise kolmeks jooneks. Kuna katses mõõdeti ka sellist lõhustumist ja selle tekkimist suudeti põhjendada, hakati seda nimetama normaalseks Zeemani efektiks. Katses mõõdetud lõhustumist kaheks ja enamaks paarisarvuliseks jooneks aga hakati nimetama anomaalseks Zeemani efektiks, kuna see klassikalise teooria raames ei olnud seletatav.

Kommentaariid:

1. Nagu me nägime, on elektronil omaimpulsimoment - spinn. Osutus, et spinn on kõikidel elementaarosakestel ja nende süsteemidel. Sama spinn $s = 1/2$, nagu elektronil, on näiteks ka prootonil ja neutronil. Footoni spinn on võrdne ühega. Kuna footonil seisumass puudub, siis on footoni spinnil see iseärasus, et tema projektsioon omab ainult kaks väärtust $+1$ ja -1 . Aatomituomad omavad spinni, mis tekib tuuma koostisse kuuluvate prootonite ja neutronite spinnide liitumisel. Tuuma spinni väärtused võivad samuti olla $0, 1/2, 1, 3/2, \dots$.

Erinevalt orbitaalsest momendist on osakese spinn teda iseloomustav kindel suurus. Muutuvaks suuruseks on ainult spinni projektsioon, omades väärtusi $\sigma = +s, \dots, -s$. Seetõttu jäetakse osakese oleku kirjeldamisel tihti spinni väärtus välja kirjutamata, andes ainult spinni projektsiooni. Nii näiteks elektroni korral tähendab $1/2$ spinni projektsiooni z-telje positiivses suunas ja $-1/2$ spinni projektsiooni z-telje negatiivses suunas. Nende kohta öeldakse ka "spinn üleval" või "spinn all".

Osutub, et spinn on täielikult kvantmehaaniline suurus ja sellel klassikalist analoogi tegelikult ei ole. Algul püüti elektroni spinni tõlgendada elektroni pöörlemisena (sellest ka tema nimetus "to spin" - pöörlema) sümmeetriatelje ümber. See ettekujutus viib aga vastuolule. Kui vaadata elektroni pöörleva kuulikesena, mille raadius võrdub näiteks elektroni klassikalise raadiusega, peaks selle kuulikese äärepunktide kiirus ületama valguse kiiruse. See aga pole teatavasti lubatud. Ka ei võimalda pöörleva elektroni mudel põhjendada, miks spinn omab ainult ühte kindlat väärtust.

2. Ühe lihtsa erijuhu analüüsiga näitame, et elektroni spinni väärtus põhimõttelisi raskusi ei tekita. Vaadates § 11 kommentaaris impulssmomendi projektsiooni omafunktsioone, saime tulemuseks

$$Y(\varphi) = A e^{im\varphi} ,$$

kusjuures need funktsioonid rahuldavad pidevuse tingimust

$$Y(\varphi) = Y(\varphi + 2\pi) .$$

Elektroni spinni projektsioonide kirjeldamiseks peaks me saama

$$Y_s(\varphi) = A e^{i\sigma\varphi} .$$

Võttes nüüd $\sigma = 1/2$, saaksime

$$Y_s(\varphi + 2\pi) = A e^{\frac{i\varphi}{2} + i\pi} = -Y_s(\varphi) .$$

Nagu näha, pole meie poolt varem nõutud pidevuse tingimus täidetud, sest funktsioon vahetab märki. Osutub, et see ei ole siiski põhimõtteline takistus, sest lainefunktsioon ise ei ole mõõdetav suurus, vaid annab tõenäosusamplituudi. tõenäosus on aga seotud lainefunktsiooni mooduli ruuduga. Kuna funktsioonid erinevad ainult märgi poolest, tõenäosus on aga seotud mooduli ruuduga, siis füüsiliselt on olekul $Y_s(\varphi)$ ja $-Y_s(\varphi)$ samaväärsed.

3. Arvestades elektroni spinni, tuleks meil Schrödingeri võrrandit üldistada juhule, kus oleks ka spinn arvesse võetud. Sellise võrrandi andis W. Pauli, kes ühtlasi tuletas ka matemaatilise formalismi elektroni spinni kirjeldamiseks.

1928.a. tuletas P.A.M. Dirac võrrandi, mis kirjeldas elektroni. Sellest võrrandist järelalus automaatselt nii elektroni spinn kui ka tema magnetmoment. Diraci võrrand on relativistlik ja sobib seetõttu ka suure energiaga protsesside kirjeldamiseks. Mitterelativistlikul piirjuhul annab aga Diraci võrrand Pauli võrrandi. Antud üldkursuse raames me kumbagi nendest võrranditest ei vaata. Mainime ainult, et Diraci võrrandist järelalus veel antielektroni ehk positroni olemasolu. Positron on samade omadustega nagu elektron, kannab aga erinevalt elektronist positiivset elementaarlaengut ja omab vastasmärglist magnetmomenti.

Hiljem selgus, et igal mikroosakesel võib olla antiosake, st osake, mis on sama massiga kuid vastasmärgilise laengu ja magnetmomendiga. Nii on näiteks olemas antiprooton ja antineutron. On ka osakesi, nagu näiteks foton, mis on identsed oma antiosakesega. Osakesed ja antiosakesed ei saa koos eksisteerida, sest nende kokkupõrkel muutuvad nad teisteks osakesteks. Elektroni ja positroni kokkupõrkel tekib näiteks kaks γ -kvanti

$$e^- + e^+ \rightarrow \gamma + \gamma .$$

Meie Universum koosneb osakestest (elektronid, prootonid, neutronid, ...), antiosakesed aga saavad tekkida ainult suure energiaga osakeste kokkupõrkel.

4. Stern-Gerlachi esialgses katses mõõdeti hõbeda aatomite kimbu käitumist magnetväljas. Kuna hõbeda aatomis on mitu elektroni, siis tekib küsimus, kas selles katses oli ikka tegemist elektroni spinniga. Osutub, et hõbeda aatomis on elektronide koguspinn määratud väliskihi elektroni spinniga, sest ülejäänud elektronide koguspinn on võrdne nulliga. Kuna lisaks sellele on väliskihi elektron olekus $l = 0$, siis on hõbedaaatomi kogumoment ergastamata oleku korral tõepoolest võrdne elektroni spinniga ja katse tulemuse määrab ära elektroni magnetmoment.

5. Mikroosakese spinn on üheks oluliseks suuruseks, mis määrab ära selle, kuidas käituvad identsetest osakestest koosnevad süsteemid. Elementide perioodilisuse süsteemi seletamiseks tõi Pauli sisse nn. keeluprintsiibi, mille kohaselt ühes ja samas kvantolekus ei saa olla üle elektroni. Aatomis on elektroni kvantolek määratud nelja kvantarvuga (n, l, m, σ) , st lisaks peakvantarvule n , orbitaalsele kvantarvule l ja magnetilisele kvantarvule m tuleb arvestada veel spinni projektsiooni σ . Pauli keeluprintsiip tähendab seda, et kui üks elektron aatomis on näiteks olekus $(2, 1, 1, 1/2)$, siis ükski teine elektron selles samas olekus enam olla ei saa. Küll aga võib teine elektron olla olekus $(2, 1, 1, -1/2)$, mis on küll sama energiaga, aga erineva spinni projektsiooniga.

Hiljem Pauli tõestas, et sama omadus on kõigil mikroobjektidel, mille spinn (või koguspinn) on poolarvuline $s = 1/2, 3/2, \dots$. Osakestel, mille spinn on täisarvuline, st. $s = 0, 1, 2, \dots$ sellisele keeluprintsiibile ei allu ning seetõttu võib täisarvulise spinniga osakesi olla ühes ja samas olekus põhimõtteliselt kuitahes palju. Sõltuvalt spinnist jaotuvad osakesed seetõttu kahte oluliselt erinevalt käituvasse klassi. Nende iseärasusi me antud raamatus ei vaata.

Ühe näitena osakeste käitumise sõltuvusest spinnist vaatame kahte heeliumi isotoopi ${}^2\text{He}^4$ ja ${}^2\text{He}^3$. Mõlemal juhul on aatomis kaks elektroni ja seetõttu nende keemilistes omadustes erinevusi ei ole. Spektrites on üliväikesed erinevused, mis on tingitud tuuma masside erinevusest. Mainitud kaks isotoopi aga erinevad tuuma spinni poolest. ${}^2\text{He}^4$ tuumas on kaks prootonit ja kaks neutronit ning seetõttu on tuuma spinn täisarvuline ($s = 0$), ${}^2\text{He}^3$ tuumas aga on kaks prootonit ja üks neutron, mistõttu tuuma spinn on poolarvuline ($s = 1/2$). Nagu näha, kuuluvad need isotoobid erinevalt käituvatesse klassidesse ja seetõttu on neil ka olulisi erinevusi, mis on tingitud vastava osakeste klassi üldistest omadustest. Mainime siin ainult ühte. Ülimadalatel temperatuuridel ($T \leq 2,7 \text{ K}$) muutub ${}^2\text{He}^4$ ülivoolavaks, ${}^2\text{He}^3$ aga mitte. ${}^2\text{He}^3$ korral tekib ülivoolavus alles tuhandiku kelvini juures ja seletub ${}^2\text{He}^3$ -paaride tekkimisega, mis on juba täisarvulise spinniga osakesed.