

TARTU RIIKLIK ÜLIKOOI

R. LIAS

KVAINT-
MIEHIAIAIKAI

TARTU 1966

TARTU RIIKLIK ÜLIKOOL
Teoreetilise füüsika kateeder

R. Iias

KVANTMEHHAANIKA

Tartu 1966

E e s s õ n a .

Kvantmehhaanika konspekt on määratud füüsikaosakonna üliõpilastele, kes ainega tutvuvad esmakordselt. Lugejalt ei ole eeldatud rühmateooria ega funktsionaalanalüüsi tundmist. Olulised mõisted on teooria esitamise käigus vajalikus ulatuses defineeritud.

Materjali esitamisel on kasutatud peamiselt deduktiivset meetodit. Abstraktsele ja võimalust mööda üldisemale teooriale järgnevad konkreetseid rakenduslikud näited. Viimaste mõistmine eeldab mõningaid teadmisi aatomifüüsikast ja elektrodünaamikast. Kvantmehhaanika põhimõtteline ülesehitus ja põhimõisted aga tuginevad suurel määral klassikalise mehhaanika (analüütilise mehhaanika) põhimõistetele.

Täielikult on käesolevast konspektist välja jäetud relativistlik kvantmehhaanika, mida on otstarbekam käsitleda sissejuhatava peatükina kvantelektrodünaamika kursusele.

Konspekti rakenduslike näidete avardamise ja arvutusmeetodite tutvustamise eesmärki taotleb konspektiga vahetult seotud ülesannete kogu, mis sisaldab ka mõningaid matemaatilisi meetodeid käsitleva lisa.

Autor avaldab sügavat tänu ENSV TA Füüsika ja Astroonoomia Instituudi teaduslikule töötajale sm. R. Preemile väärtuslike näpunäidete eest.

R. L i a s .

S i s s e j u h a t u s .

XIX saj. lõpuks oli teoreetilises füüsikas välja kujunenud see ideede ja kujutluste süsteem, mis on nn. klassikalise füüsika aluseks. Tolleaegse teoreetilise füüsika juhtivatest harudest - Newtoni mehhaanikast ja Maxwelli elektrodünaamikast lähtudes suudeti rahuldavalt seletada peaaegu kõiki eksperimentaalselt avastatud fakte. Kuid juba siis tunti nähtusi, millele ei saadud anda kooskõlalist teoreetilist põhjendust seniste kujutluste raames. Niisuguste nähtuste hulk kasvas eriti kiiresti käesoleva sajandi esimestel aastakümnetel seoses aatomi ehituse tundmaõppimisega. Osutus, et need arvukad katsetulemused on siiski üsna hõlpsasti ette arvatavad, kui vaid loobuda mõnedest makroskoopiliste kehade teoorias enesestmõistetavatest oletustest. Uus ideede ring, mis on mikromaailma füüsika aluseks, arenes oluliselt välja käesoleva sajandi kolme esimese aastakümne jooksul.

Esimeseks sammuks klassikalise füüsika kujutlustest loobumisel oli M. Plancki hüpotees (1900. a.) energiakvantide olemasolu kohta. Selle hüpoteesi abil tuletas Planck katsega kooskõlalise valemi absoluutselt musta keha (õõnesruumi) kiirgusenergia spektraalse jaotuse jaoks. Energiakvandi mõiste ja

tema vajalikkuse juurde jõuame Plancki eeskujul järgmiste mõttekäikude põhjal.

Oletame lihtsustuseks, et õõnesruumi seinad koosnevad lineaarselt võnkuvatest harmoonilistest ostsillaatoritest, mille vahel on termiline tasakaal (ostsillaatoritest koosneval konkreetsel mudelil ei ole põhimõttelist tähtsust). Absoluutsel temperatuuril T on iga ostsillaatori (ühe vabadusastmega süsteem) keskmine kineetiline energia $\frac{\kappa T}{2}$ (κ on Boltzmanni konstant). Sama suur on keskmine potentsiaalne energia, mistõttu keskmine koguenergia \bar{E} võrdub:

$$\bar{E} = \frac{1}{2} m \omega^2 A^2 = \kappa T, \quad (0.1)$$

kus m on ostsillaatori mass, ω - omavõnkesagedus, A - võnkeamplituud.

Valem (0.1) näitab, et antud temperatuuril T on kõikide ostsillaatorite keskmised energiad võrdsed. Analoogiline valem kehtib mistahes süsteemi keskmise energia kohta.

Teiselt poolt aga kiirgub iga harmooniliselt võnkuv ($x(t) = A \cos \omega t$) laetud osake (laenguga e) ajaühikus energiahulga \mathcal{E} , kus

$$\mathcal{E} = \frac{2e^2}{3c^3} \overline{\left(\frac{d^2x}{dt^2}\right)^2} \sim \omega^4 A^2. \quad (0.2)$$

Siin on c valguskiiruse konstant, kriips tähistab keskväärtust üle võnkeperioodi.

Valemitest (0.1), (0.2) järgneb, et ostsillaatori välja kiiratud energia ajaühikus on seda suurem, mida suurem on sa-

gedus ω , s. t.

$$\xi \sim \omega^2 \kappa T = \omega^2 \bar{E}. \quad (0.3)$$

Valem (0.3) viitab nn. "ultravioletsele katastroofile": kiirgusenergia tihedus kasvab piiramatult kiirguse sageduse suurenemisel (ω on ühtlasi kiiratud laine sagedus). See tulemus on vastuolus katsega. Niisugust ebasoovitavat tulemust võime vältida, kui mõtleme välja mehhanismi, mis takistaks suurte omavõnkesagedustega ostsillaatorite ergastumist termiliste pörgete teel teiste ostsillaatoritega. Siis jääks nende energia praktiliselt samaks, mis ta on temperatuuril $T = 0$, (seega kaotaks valem (0,1) kehtivuse ning niisugused ostsillaatorid ei saaks kiirata). Keelava mehhanismi annab ostsillaatori energia kvantiseerituse (diskreetsuse) hüpotees.

Oletame, et ostsillaatoril on kindlad võimalikud energianivood, kusjuures naabernivodevaheline kaugus ΔE on võrdeline omavõnkesagedusega ω , s. o.

$$\Delta E = \hbar \omega, \quad (0.4)$$

kus \hbar on mõju dimensiooniga võrdetegur (võrduse (0.4) parem pool peab olema energia dimensiooniga). Termilistel pörgetel ülekantav energia on suurusjärgus κT . Kui $\kappa T \ll \Delta E$, ei ole termiliste pörgetega praktiliselt võimalik ostsillaatorit üle viia kõrgemale nivoole. Sellega ongi takistatud suurte ω väärtustega ostsillaatorite ergastumine ja järelikult ka vastavate sagedustega elektromagnetiliste lainete kiirgumine. Konstanti $\hbar = 2\pi \hbar$ (mis ei sõltu õõnes-

ruumi seinete ainest) nim. Plancki konstandiks.

Lähtudes ostsillaatorite energia diskreetsusest (võimalikud väärtused on arvutatavad valemist $E_n = E_0 + n \hbar \omega$ kus n on täisarv, E_0 - minimaalne energia), arvutas Planck kiirgusenergia spektraalse jaotuse valemi ja määras esmakordselt \hbar väärtuse katseliselt saadud jaotuskõveratest:

$$\hbar = 6,625 \cdot 10^{-27} \text{ erg. sek.}, \quad \hbar = 1,054 \cdot 10^{-27} \text{ erg.sek.}$$

Oletus, et mingi keha (antud näites ostsillaator) võib energiat vastu võtta ainult kindlate annuste (kvantide) kaupa, on klassikalisele füüsikale täiesti võõras. Klassikalisele mehhaanikale vastavalt on iga keha energia (ja samuti muud füüsikalised suurused) pidevalt muudetavad.

Edasised katsed aatomitega jt. mikrosüsteemidega näitasid, et peale energia esineb veel teisigi suurusi (näit. impulssmoment), mille väärtused võivad muutuda ainult hüppeliselt. Sellepärast nimetataksegi mikromaailma füüsikalistele nähtustele kohandatud teooriat kvantteooriaks. (Täpsustuseks olgu märgitud, et kõikide mikrosüsteemide energiad ei ole tingimata diskreetsete väärtustega, vaid võivad olla ka pidevad.)

1905/06. a. rakendas A. Einstein kvantide hüpoteesi edukalt ka tahke keha erisoojuse ja fotoefekti teorias.

Vaadeldes N aatomist koosnevat tahket keha $3N$ lineaarse harmoonilise ostsillaatori kogumina (igal võnkaval aatomil on 3 vabadusastet) ja nõudes energianivoode diskreetsust (valem (0.4)), on lihtne leida erisoojuse sõltuvust

temperatuurist. Erinevalt klassikalisest teoriast (igale vabadusastmele vastab energia $\frac{\kappa T}{2}$ ja erisoojus järelt temperatuurist ei sõltu) kirjeldab kvantteooria õigesti erisoojuse vähenemist madalatel temperatuuridel ("vabadusastmete kinnikülmumise" efekt).

Fotoefekti põhiline seaduspärasus - fotoelektronide energia ei sõltu kiirgusvoo intensiivsusest, vaid kiirguse sagedusest - näitab, et antud juhul ei allu ka elektromagnetiline kiirgus (röntgenikiirgus, ultraviolettkiirgus) Maxwelli klassikalisele teorialele. Viimase kohaselt peaks elektronidele üleantav energia olema just võrdeline voo intensiivsusega (laine amplituudi ruuduga). Küsimuse lahendas Einstein valguskvantide hüpoteesi abil. Sellele hüpoteesile vastavalt ei või elektromagnetiline laine oma energiat teistele kehadele üle anda mistahes hulgal, vaid ainult kogustes, mis on võrdelised laine sagedusega ω . Seejuures oletas Einstein, et võrdetegur on sama mis valemis (0.4), s. o. universaalne Plancki konstant h . Niisiis võib monokromaatset kiirgust sagedusega ω vaadelda energeetilises mõttes energiakvantide $h\omega$ kogumina, kus kvantide tiheduse määrab laine amplituudi ruut (intensiivsus).

Arvestades kvandi energia valemit:

$$E = h \omega, \quad (0.5)$$

on selge, miks kvantefektid ilmnevad ainult lühilainelise kiirguse (ω suur) korral. Väikeste ω väärtuste puhul on ülekantav energia praktiliselt lõpmata väike ja energia muutusi võib lugeda pidevateks.

Valguskvantide hüpoteesi kinnitab 1923. a. Comptoni avastatud efekt, mille kohaselt elektronidelt hajunud kiirguse lainepikkus λ' on suurem esialgse kiirguse lainepikkusest λ , kusjuures

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos \vartheta). \quad (0.6)$$

Siin on m elektroni mass, c - valguskiirus, ϑ - hajumisnurk. Valemit (0.6), mis on kooskõlas katsega, saab tuletda, kui vaadelda kiirgust kvantidena, mida iseloomustab nii energia (0.5) kui ka impulss \vec{p} :

$$\vec{p} = h \frac{\omega}{c} \vec{n}_0 = h \vec{k}, \quad (0.7)$$

kus $\vec{k} = \frac{\omega}{c} \vec{n}_0$ on laine levikuvektor (\vec{n}_0 - laine levimise suunaline ühikvektor). Valem (0.6) järgneb energia ja impulsi jäävuse seadustest kahe osakese mehhaanilisel pörkel. (Antud juhul tuleb kasutada relativistliku mehhaanika valemid, kuna suurte kvantidega pörkudes omandavad elektronid valguskiirusega võrreldavaid kiirusi.) Klassikalise elektrodünaamika kohaselt ei tohiks hajunud kiirguse lainepikkus muutuda. Pealelangev laine sagedusega ω kutsuks esile elektroni sundvõnkumised sama sagedusega. Sagedusega ω võnkuv laeng aga kiirgaks uuesti laineid ainult sagedusega ω , seejuures olenemata suunda iseloomustavast nurgast ϑ .

Seega on Comptoni efekt üheks klassikalise füüsika kehtetuse kinnituseks suure sagedusega kiirguse ja laetud osakese (elektroni) vastastikuse mõju uurimisel (vastav kaasaegne teooria kannab kvantelektrodünaamika nimetust).

Francki ja Hertzi katsed 1913. ja järgnevatel aastatel

näitasid, et mehhaanilistel pöörgetel teiste osakestega (elektronidega) võivad ka aatomid omandada või ära anda energiat ainult kindlates kogustes, mis on täiesti iseloomulikud igale aatomiliigile. Samale järeldusele viib aatomi kiirgus- ja neeldumisspektrite uurimine. Kui ühelt poolt arvestada, et elektromagnetilise kiirguse energia võib muutuda ainult sagedusest sõltuvate kvantide kaupa suurusega $\hbar\omega$ ning teiselt poolt pidada silmas Plancki ja Hertzi katse tulemusi, on ilmne, et iga aatom võib neelata ainult nnisuguseid kiirguskvante, mis vastavad tema mõnesuguse kahe energianivoo E_1 ja E_2 vahelisele ΔE , s. o.

$$\Delta E = \hbar\omega. \quad (0.8)$$

Samasuguseid kvante võib ta ka kiirata. Esitatud mõttekõik annab seletuse nii aatomispektrite diskreetsusele kui ka klassikalises füüsikas mõistatuslikuks jäänud Ritz'i kombinatsiooniprintsiibile spektri joonte sageduste kohta - kõik sagedused avalduvad kahe termi (teatud matemaatilise avaldise kahe liikme) vahena. Valemist (0.8) järgneb, et nimetatud kahe termi all tuleb mõista aatomi kahte energianivood E_1 ja E_2 , jagatud Plancki konstandiga:

$$\omega = \frac{E_1}{\hbar} - \frac{E_2}{\hbar}. \quad (0.8')$$

Kui vaatleksime aatomis viibivat elektroni klassikalise teooria põhjal, võiks ta liikumise esitada perioodiliste võnkumiste superpositsioonina, kusjuures kõikide võngete sagedused ω_n on mõnesuguse põhisageduse ω_1 täisarvkordsed:

$\omega_n = n \omega_1$, kus n on täisarv. Niisugane elektron peaks kiirgama samade sagedustega elektromagnetilisi laineid. Järelikult peaksid ühe optilise elektroniga aatomite kõikide spektrijoonte sagedused ω_n rahuldama tingimusi:

$$\omega_n = n \omega_1, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

See on aga vastuolus eksperimendiga.

1921. ja järgmistel aastatel teostatud katsed mittehomo-geenset magnetvälja läbivate aatomikimpudega (Sterni ja Gerlachi katsed) tõestasid otseselt, et elektronide (samuti ka teiste mikroosakeste) impulssmomendi ja tema magnetväljasihilise projektsiooni väärtused võivad olla ainult diskreetsed. Juba klassikalisest füüsikast pärineva kujutluse kohaselt on igasuguse laetud osakese impulssmomendiga \vec{J} seotud temaga võrdeline magnetmoment $\vec{\mu}$:

$$\vec{\mu} = \mu \vec{J}, \quad (0.9)$$

kus μ on võrdetegur.

Magnetväljas \vec{H} omandab osake täiendava energia

$$E_\mu = -\vec{\mu} \vec{H} = -\mu H J \cos(\vec{J} \vec{H}). \quad (0.10)$$

Kui väli on mittehomogeenne, mõjub osakesele tung \vec{F}_μ :

$$\vec{F}_\mu = -\nabla E_\mu = \mu J \text{grad } H \cos(\vec{J} \vec{H}). \quad (0.11)$$

Seega on antud magnetvälja kuju korral tung võrdeline impulssmomendi projektsiooniga magnetvälja suunale. Kui see projektsioon võiks olla mistahes väärtusega, venitaks mittehomo-geenne magnetväli kitsa kimbu lihtsalt laiaks ribaks. Sterni ja Gerlachi katsed aga näitasid, et kimp laguneb üksikuteks

teravalt eristatavateks komponentideks. See tulemus vastab $\cos(\vec{j} \cdot \vec{r})$ diskreetsetele väärtustele. Vastavalt valemile (0.11) peab loomulikult ka impulssmomendi absoluutväärtus J olema diskreetne.

(Tegelikult tõestasid Sterni ja Gerlachi katsed ka elektroni liikumisolekust sõltumatu, nn. omamomendi e. spini olemasolu, millel on ainult 2 võimalikku projektsiooni väärtust.)

Kaudseks optilise elektroni impulssmomendi kvantiseerituse tõestuseks on Zeemani efekt: magnetvälja paigutatud aatomite spektrijooned lagunevad mitmeks komponendiks (tänu lisaenergiale E_{μ}). Kui E_{μ} väärtused oleksid pidevad, toimuks lihtsalt spektrijoonte laienemine.

Aatomite diskreetsete energiatasemetega (statsioonärsete olekute) olemasolu ja kiirgustingimused (0.8) postuleeris esmakordselt N. Bohr (1913), kes andis ühtlasi ka retsepti vesinikuaatomi energiatasemetega arvutamiseks (hiljem täiendas seda A. Sommerfeld). Selle kvantiseerimisretsepti idee seisneb Plancki kvanttingimuse (0.4) üldistamises mistahes mehaanilistele süsteemidele (valem (0.4) seab ainult harmoonilise ostsillaatori naabernivoode vahe ostsillaatori omavõnkesagedusega). Lähtume harmoonilise ostsillaatori koguenergia avaldisest

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{\omega^2 m}{2} x^2. \quad (0.12)$$

p ja x - tasandil on (0.12) ellipsi võrrand, mille pindala S avaldub E ja ω kaudu:

$$S = 2\pi \frac{E}{\omega} . \quad (0.13)$$

Tingimuse (0.4) kohaselt on kahele naaberenergiale vastavate ellipsite pindalade vahe

$$\Delta S = 2\pi \hbar \equiv \hbar \quad (0.14)$$

Kuna p_x -tasandil võime S arvutada valemist

$$S = \iint dp dx = \oint p(x) dx ,$$

saame kvanttingimuse

$$S_n = S_0 + n \hbar , \quad n = 1, 2, \dots$$

või

$$\oint p dx = n \hbar , \quad (S_0 = 0) . \quad (0.15)$$

Kujul (0.15) on kvanttingimus juba üldistatav mistahes süsteemile, seejuures ka mitme vabadusastmega. k -ndale vabadusastmele vastava koordinaadi (q_k) ja kanoonilise impulsi p_k korral:

$$\oint p_k dq_k = n_k \hbar , \quad n_k = 1, 2, \dots \quad (0.16)$$

Tingimused (0.16) on Bohr-Sommerfeldi kvantteooria aluseks ja määravad elektroni lubatud orbiidid, energia ja impulssmomenti väärtused aatomis.

Neid tingimusi kasutati edukalt vesinikusarnaste aatomite spektrite arvutamiseks.

Kuid sellel kvantteooria varasemal variandil on tõsiseid puudusi. Selle teooria kohaselt liiguvad punktikujujulised elektronid kõverjoonelistel orbiitidel klassikalise mehhaanika sea-

duste kohaselt, kusjuures ainult orbiidi suurus ja kuju (pooltelg, raadius, ekstsentrilisus) on määratud kvanttingimustega. Bohri hüpoteesi kohaselt ei kiirga elektron nendel nn. statsionaarsetel orbiitidel energiat, kuigi klassikalise füüsika seaduste kohaselt peaks kiirgama (kiirendatult liikuv laeng kiirgab elektromagnetilisi laineid). Põhjendust sellele statsionaarsuse postulaadile varasem kvantteooria ei anna. Kiirguse emissioon esineb siis, kui elektron läheb ühelt lubatud orbiidilt teisele. Elektroni trajektoori kohta selle nn. kvantthüppe jooksul ei anna teooria mingeid andmeid. Samuti pole võimalik ennustada kvantthüpete sagedust või tõenäosust ja järelikult ei saa arvutada ka spektrijoonte suhtelist intensiivsust. Mis puutub kvanttingimustesse (0.16), siis osutub, et üldiselt rääkides võttuvad need koordinaatsüsteemi valikust ja seepärast ei saa olla mingisuguse lõpliku teooria põhialuseks.

Peale nimetatud raskuste sattus varasem kvantteooria teatud juhtudel ka eksperimendiga vastuollu. Nii ei õnnestunud selle teooria alusel arvutada heeliumiaatomi terme ega lahendada üldse ühtegi mitme keha probleemi. Ebakõla katsega tekkis ka impulssmomendi väärtuste arvutamisel: teooria andis impulssmomendi ruudu väärtusteks $\hbar^2 l^2$, kus $l = 1, 2, \dots$, kuni katseandmed vastasid väärtustele $\hbar^2 l(l+1)$, kus $l = 0, 1, 2, \dots$

Kaasaegse kvantmehhaanika alused rajati oluliselt aastail 1925 - 1928.

1925. a. arendas W. Heisenberg aatomspektrite arvutamiseks välja nn. matriksmehhaanika. Selleni jõudis ta mõõtmise-

le alluvate ja mitterõõdetavate suuruste kriitilise analüüsi tulemusena. Nii näiteks on aatomite korral mõtet rääkida kiiratud elektromagnetiliste lainete sagedustest ja elektronide energiatasemetest. Seevastu ei saa me elektroni tiirlemis-sagedusest statsionaarsel orbiidil või nendest orbitidest enestest andmeid ühestki katsest. Niisugused mõisted ei või kuuluda teooria põhimõistete hulka.

Maatriksmehhaanika formuleeringuni jõuame vaadeldes elektroni kiiratud energiat. Vastavalt klassikalisele teooriale on ajaühikus kiiratud energia w arvutatav valemist:

$$w = \frac{2e^2}{3c^3} \left(\frac{d^2q}{dt^2} \right)^2, \quad (0.17)$$

kus $q(t)$ on elektroni trajektoori määrav koordinaat. Kasutades Fourier' arendust:

$$q(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} q_n e^{i\omega_n t},$$

võime w esitada:

$$w = \sum_{n=1}^{\infty} w_n, \quad w_n = \frac{4e^2}{3c^3} \omega_n^4 |q_n|^2. \quad (0.18)$$

Järelikult peaks elektron klassikalise teooria kohaselt kiirgama sagedusi ω_n suhteliste intensiivsustega $|q_n|^2$.

Tegelikult jälgitavad sagedused on $\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$ (vt. val. (0.8')), kusjuures üleminek energiatasemelt E_m energiatasemele E_n toimub spontaanselt. Niisuguste spontaansete üleminekute kohta võib teooria teha ainult statistilist

laadi ennustusi. Kui w_{mn} on ajaühikus kiiratud energia, mis vastab üleminekule tasemelt E_m tasemele E_n , siis kvandi $\hbar \omega_{mn}$ kiirgamise tõenäosus ajaühikus on (vrd. val. (0.18)):

$$y_{mn} = w_{mn} / \hbar \omega_{mn} = \frac{4a^2}{3c^3 \hbar} \omega_{mn}^3 |q_{mn}|^2, \quad (0.19)$$

kus Fourier' komponendid q_n on asendatud suurustega q_{mn} . Suurused $|q_{mn}|^2$ iseloomustavad ülemineku tõenäosust. Kuna nad vastavad kindla sagedusega kvandile, on nende ajaline sõltuvus järgmine

$$q_{mn}(t) = q_{mn}(0) e^{i \omega_{mn} t}. \quad (0.20)$$

Kui omistame energiatasemeid määravatele indeksitele m ja n kõikvõimalikke väärtusi, saame $q_{mn}(t)$ asemel maatriksi:

$$q(t) = \begin{pmatrix} q_{11}(t) & q_{12}(t) & \dots \\ q_{21}(t) & q_{22}(t) & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = (q_{mn}(t)). \quad (0.21)$$

Seega asendab maatriks Heisenbergi käsitluses (0.21) klassikalises mehhaanikas trajektoori määravat koordinaati $q(t)$. Niisuguse asendusega kaotab ka klassikaline trajektoor oma tavalise piltliku tähenduse.

Et leida võrrandit, mida rahuldavad maatriksi (0.21) elemendid, diferentseerime avaldist (0.20) aja järgi ning asendame $\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar} (E_m - E_n)$. Saame

$$\frac{dq_{mn}}{dt} \equiv \dot{q}_{mn} = \frac{i}{\hbar} (E_m - E_n) q_{mn}. \quad (0.22)$$

Kui energiale E seame vastavusse diagonaalmaatriksi

$$E = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & \dots \\ 0 & E_2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = (E_n \delta_{mn}),$$

võime seose (0.22) kirjutada maatrikskorrutise kujul

$$\dot{q} = \frac{i}{\hbar} (E q - q E). \quad (0.23)$$

Võrrand (0.23) on Heisenbergi maatriksmehhaanika põhi-
võrrand.

Eespool kirjeldatud matemaatiline skeem võimaldas Heisenbergil arvutada nii võimalikke spektrijooni kui ka nende intensiivsusi. Ootuspäraselt tuleks üleminekul klassikalise mehhaanikast kvantmehhaanikasse asendada maatriksitega mitte ainult elektroni koordinaadid, vaid üldse kõik dünaamilised muutujad, nagu impulss, energia, impulssmoment jne., kusjuures kõik need maatriksid peaksid rahuldama (0.23) tüüpi maatriksseoseid. Niisugune kvantmehhaanika formuleering kannab Heisenbergi esituse nimetust.

Erinevalt lähenes mikroosakeste küsimusele de Broglie, kes 1924. a. kandis kiirguskvantide kohta püstitatud seose (0.5) üle nullist erineva seisumassiga osakestele ning kooskõlas relatiivsusteooria nõuetega postuleeris analoogilise seose kehtivust osakese impulsi p jaoks. Vastavad seosed,

$$E = h \nu = \hbar \omega, \quad p = \frac{h}{\lambda}, \quad (0.24)$$

kannavad de Broglie seoste nimetust. Need seosed väidavad, et iga mikroobjekt on peale korpuskulaarsete omaduste (E ,

p) iseloomustatud ka laineliste omadustega (ν , λ). Elektronilained omadused ning ühtlasi de Broglie seosed (0.24) leidsid kinnitust Davissoni ja Germeri katsetes (1927. a.), kus elektronkimpude hajumisel kristallvõres saadi iseloomulik difraktsioonipilt.

Valguse laineteooriaga analoogilise järjekindla teooria mikroosakeste jaoks andis Schrödinger (1926. a.), kes ka osakeste kirjeldamiseks võttis kasutusele lainefunktsiooni (olekufunktsiooni) ja leidis sellele sobiva võrrandi. Seejärel näitas Schrödinger, et tema loodud teooria on täiesti ekvivalentne Heisenbergi maatriksmehhanikaga.

1927. a. näitas Heisenberg, et uue kvantmehhanika matemaatilise aparatuurist järgnevad nn. määramatuse relatsioonid osakese koordinaatide ja vastavate impulsside jaoks. Kui koordinaadi q mõõtmisel saame ta väärtused vahemikus Δq ja samal ajal impulsi p väärtused vastavalt vahemikus Δp , siis on nende vahemikkude (määramatuste) vahel teatud korrelatsioon:

$$\Delta q \Delta p \geq \hbar . \quad (0.25)$$

Mida täpsemalt on võimalik fikseerida ühte suurust, seda suuremaks jääb määramatuse vahemik teise jaoks.

Määramatuse seostest võime otsekohe järeldada, et kõik kvantteooria ennustused mikrosüsteemide käitumise kohta võivad põhimõtteliselt olla ainult statistilist laadi. Me ei saa näiteks lahendada algväärtusülesannet osakese koordinaadi jaoks, sest pole võimalik püstitada täpseid algtingimusi.

Esimeses peatükis on esitatud kvantmehhaanika aksiomaatiline formuleering, lähtudes mõnede klassikaliste kujutluste kehtetusest mikromaailmas. § 12 on näidatud, et määramatuse seosed järgnevad kvantmehhaanika matemaatilisest formalismist kõige üldisemal kujul. Siinkohal on aga sobiv veenduda, järgides Bohri mõttekäike, et nimetatud seosed väljendavad mikroobjektide lainelis-korpuskulaarset dualismi.

Vaatleme, missuguste põhimõtteliste raskustega kohtume, kui püüame valguse difraktsiooni kirjeldada korpuskulaarteooria abil.

Laineteooria kohaselt võib võrel difrageerunud monokromaatne valgus sattuda ainult kindlatesse punktidesse ekraanil, mis vastavad võre erinevatest piludest tulnud lainete nendele käiguvahedele, mis on lainepikkuse täisarvkordsed. Saadud difraktsioonipilt on kooskõlas valguslainete superpositsiooni (liitumise) printsiibiga. Valguse korpuskulaarteooria kohaselt toimub järgmine protsess. Difraktsioonivõrele sattunud kvant hajub, andes võrele teatud impulsi, ning seejärel neeldub mõnesuguses ekraani punktis. Missuguses ekraani punktis footon võib neelduda, seda saab arvutada laineteooria abil. Missuguses punktis aga iga üksik footon tegelikult neeldub, seda ei ole võimalik ette arvutada, kuna katsed ülinõrka-de kimpudega näitavad, et difraktsioonipildi tekkimine (ekraani punktide tumenemine) toimub statistilise seaduspärasusega - footoni sattumise tõenäosus ekraani antud punkti on võrdeline difrageerunud laine amplituudi ruuduga selles punktis. Kui teiselt poolt oleksid footoni puhul kehtivad samad mõis-

ted mis klassikalise osakese puhulgi, oleks tal kindel trajektoor ning ta peaks läbima võre kindlat pilu. Sel juhul ei mängiks võre teised pilud difraktsioonipildi tekkimisel mingit rolli. Selline järeldus viib aga otsekohe vastuollu katsega: võre pilude arvu või nendevaheliste kauguste muutumine kajastub otseselt difraktsioonipildil, s. t. muudab footonite asukohtade statistilist jaotust ekraanil. Teiste sõnadega: kui tahame saada esialgset difraktsioonipilti, peame loobuma footoni trajektoori mõistest ja tema lokaliseerimise põhimõttelisest võimalusest võrel. Neid asjaolusid väljendavadki määramatuse seosed footoni koordinaadi ja impulsi vahel.

Nagu märgitud, on footonite statistiline jaotus määratud laineamplituudi maksimumi- ja miinimumitingimustega. Järelikult vastab footoni lokaliseatsioonile niisugune laine, mille amplituud on oluliselt nullist erinev ainult kitsas piirkonnas. Niisugune laine, nn. lainepakett on esitatav tasalainete superpositsioonina:

$$u(x, t) = \int a(\kappa) e^{i(\kappa x - \omega_{\kappa} t)} d\kappa. \quad (0.26)$$

Siin $a(\kappa)$ on vastava tasalaine amplituud, κ - lainearv, ω_{κ} - sagedus (lihtsustuseks on vaadeldud ühedimensionaalset laineprotsessi).

Kui $a(\kappa)$ on oluliselt nullist erinev ainult vahemikus $\kappa - \frac{\Delta\kappa}{2}$, $\kappa + \frac{\Delta\kappa}{2}$, saame ligikaudu

$$|u(x, t)| \approx |a(\kappa)| \Delta\kappa. \quad (0.27)$$

Teiselt poolt on Fourier' komponendid $a(\kappa)$ arvutatavad valemist:

$$a(\kappa) e^{-i\omega\kappa t} = \frac{1}{2\pi} \int u(x,t) e^{-i\kappa x} dx. \quad (0.28)$$

Kui $u(x,t)$ on oluliselt nullist erinev piirkonnas $x - \frac{\Delta x}{2}$, $x + \frac{\Delta x}{2}$, siis

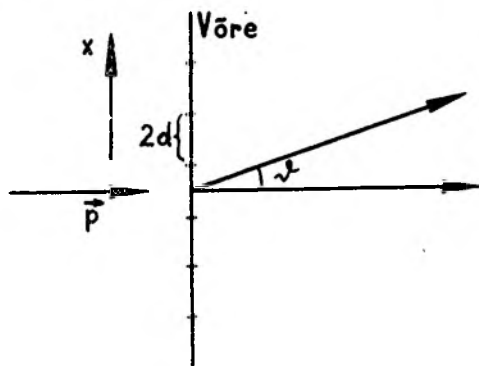
$$|a(\kappa)| \approx \frac{1}{2\pi} |u(x,t)| \Delta x. \quad (0.29)$$

Seoste (0.27) ja (0.29) kõrvutamine näitab, et vahemikud Δx ja $\Delta \kappa$ ei ole sõltumatud, vaid nende korrutise suurusjärg on allutatud tingimusele

$$\Delta x \Delta \kappa \sim 2\pi. \quad (0.30)$$

Kasutades footoni impulsi mõistet vastavalt valemile (0.7) näeme, et see tingimus on ekvivalentne määramatuse seosele footoni jaoks:

$$\Delta p \Delta x \sim h. \quad (0.31)$$



Joon. A.

Antud võre konstandi d ja pealelangeva laine pikkuse λ korral on esimest järku interferentsmaksimumile vastav nurk ϑ määratav valemist (vt. joonis A)

$$\sin \vartheta = \frac{\lambda}{2d} \quad (0.32)$$

Olgu footoni esialgne suund risti võrega ja risti x -teljega.

Kui oleme footoni x -koordinaadi fikseerinud täpsusega $\Delta x \lesssim 2d$, mis tähendab, et oleme fikseerinud võre pilu, mida ta läbib, siis kooskõlas valemiga (0.31)

$$\Delta p_x \geq \frac{h}{2d} = \frac{h}{\lambda} \sin \vartheta. \quad (0.33)$$

Teiselt poolt, kui footonil on oluliselt nullist erinev tõenäosus saavutada ekraanile kulla nurkadega $\pm \vartheta'$ määratud suundade vahel, siis ta p_x komponendil võib olla väärtus vahemikus Δp_x , kus

$$\Delta p_x = p \sin \vartheta' = \frac{h}{\lambda} \sin \vartheta' \geq \frac{h}{2d}. \quad (0.34)$$

Kõrvutades valemid (0.34) ja (0.33) näeme, et $\vartheta' \geq \vartheta$, s. t. sel korral ei ole enam peamaksimum ja esimene kõrvalmaksimum eristatavad, esialgne difraktsioonipilt on hävinud.

Kui oletaksime, et footoni läbimisel saaksime võrele antud impulsi määrata täpsemalt, kui lubavad seosed (0.31), võiksime impulsi jäävuse seadusest lähtudes arvutada täpsemalt ka p_x footoni jaoks ja seega kitsendada vahemikku Δp_x . Niisugune võimalus viiks uuesti esialgse difraktsioonipildi taastumiseni, mis, nagu eespool märgitud, ei ole kooskõlas

katsega. Järelikult peab määramatuse seoseid vaatlema mikroaailmas universaalselt kehtivatena. Nende universaalsuse postulaat kannab määramatuse printsiibi nimetust ja väljendab tõsiasi, et kõikidele mikroobjektidele on omane lainelis-korpuskulaarne dualism, mistõttu klassikaliste osakeste puhul kasutatavad mõisted omandavad siin uue sisu. (Need mõttekäigud põhjendavad ühtlasi de Broglie seoste universaalsust.) Tuleb rõhutada, et esitatud difraktsioonikatte analüüsi ei tohi mingil juhul vaadelda määramatuse printsiibi tõestusena. See analüüs aitab ainult mõista, missugused vastuolud tekiksid, kui antud juhul määramatuse printsiibist loobuksime ja püüaksime rakendada klassikalise füüsika mõisteid. Määramatuse printsiibi tõestuseks on need arvukad kvantteooria konkreetset järeldused, mis on kooskõlas eksperimendiga.

Lõpuks olgu märgitud, et makroskoopiliste kehade mõtted ja impulsid on nii suured, et nendega võrreldes on konstant \hbar kaduvväike. Seepärast võime makroskoopiliste kehade dünaamikas võtta lihtsalt $\hbar = 0$. Siis kaotavad mõtteka määramatuse relatsioonid (0.25) ja postulaat keha asukoha ja impulsi samaaegse täpse fikseerimise võimalusest (sõltumatult üksteise täpsusest) on õigustatud.

Tingimus, et piirjuhul $\hbar \rightarrow 0$ peavad kvantmehaanika seaduspärasused taanduma klassikalise mehhaanika seaduspärasusteks, kannab Bohri korrespondentsprintsiibi nimetust.

I. KVANTMEHHAANIKA PÕHIMÕISTED.

1. Uurimisobjekt ja iseärasused.

Kvantmehhaanika uurimisobjektiks on mikroosakesed ja nende süsteemid. Nagu sissejuhatuses märgitud, viib klassikalise füüsika mõistete ja seaduste rakendamine mikromaailmas katsega vastuolulistele tulemustele. Peatume lähemalt mõnedel makrofüüsikas apriorsetaks peetavatel seisukohtadel, millele baseerub klassikaline mehhaanika.

1°. Kõiki klassikalist süsteemi iseloomustavad suurused - koordinaadid, impulsid, impulssmomentid, energia jne. - võivad muutuda ainult pidevalt.

2°. Kõiki nimetatud suurusi on põhimõtteliselt võimalik määrata süsteemi igas olekus kuitahes täpselt. Klassikalise süsteemi kohta on olemas maksimaalne informatsioon, kui on antud tema liikumisvõrrandid koos vastavate algtingimustega. Nendest andmetest saame arvutada kõik dünaamilised suurused mistahes ajahetkel. Klassikaliste algtingimuste valik tähendab süsteemi kõikide koordinaatide ja impulsside (ka üldistatud mõttes) väärtuste etteandmist mingil fikseeritud ajamomendil, s. o. süsteemi teatud olekus. Liikumisvõrrandite ühese lahendamise võimalus on seega seotud hüpoteesiga 2°. Järelikult on see hüpotees mää-

rava tähtsusega klassikalise kausaalsuse printsiibi puhul: süsteemi olek, mis mistahes ajahetkel on määratud kõikide koordinaatide ja impulsside väärtustega, on põhjuslikult seotud olekutega eelnevatel ajahetkedel.

Kuna impulsside ja koordinaatide väärtuste kaudu on arvatavad kõikide teiste dünaamiliste suuruste väärtused, siis on ka kõik teised suurused põhimõtteliselt täpselt mõõdetavad mistahes ajahetkel. Mikromaailmas hüpoteesid 1^o ja 2^o ei kehti.

Hüpoteesi 1^o lükkavad ümber katsed, mis näitavad diskreetsete energiatasemete olemasolu mikrosüsteemides (aatomikimpude ergutamine, joonspektrid).

Hüpotees 2^o on vastuolus mikropartiklike dualistliku loomusega.

Näiteks difraktsioonikatses ei ole põhimõtteliselt võimalik määrata difraktsioonivõret läbiva elektroni asukohta.

Vastuoluni jõuame samuti, kui tahame omistada trajektoori, s. t. kindlaid koordinaatide väärtusi elektronile aatomi statsionaarses olekus (klassikalise aatomimudeli raskused).

2. Kvantmehaanilise oleku mõiste ja kvantmehaanika põhiülesanded.

Mikromaailma iseärasusi arvestades peame täpsustama mikroobjekti oleku mõistet. Vastavalt §-le 1 võime makroobjekti oleku antud hetkel defineerida välistingimuste ja kõikide sellele objektile iseloomulikkude füüsikaliste suuruste väär-

tuste kompleksi abil. Mikroobjekti korral aga niisugused kõikidele suurustele vastavad väärtuste kompleksid ei eksisteerigi. Näiteks isoleeritud vesinikuaatomis viibival elektronil on küll kindel energia ja kindel impulssmoment, elektroni kohakoordinaadil ja impulsil aga ei ole kindlat väärtust, s. t. teostades seeria katseid koordinaadi määramiseks, saaksime igakord isesuguse tulemuse, kusjuures need tulemused kuhjuvad teatud statistilise korrapärasusega. Seda statistilist korrapärasust nimetatakse koordinaadi tõenäosuse jaotuseks. Analoogilist olukorda täheldame muudelgi mikroobjektidel. Sellepärast oletame, et mikroobjekti olek on defineeritud välistingimustega ja objekti iseloomustavate kõikide füüsikaliste suuruste tõenäosuse jaotusega. Erijuhul, kui mõne suuruse teatud väärtus esineb tõenäosusega 1, ütleme, et sel suurusel on antud olekus see kindel väärtus.

Kõik füüsikalised suurused, millel antud tingimustes on kindlad väärtused, moodustavad nende tingimuste korral samaaegselt mõõdetavate füüsikaliste suuruste täieliku kompleksi (aatomi statsionaarses olekus kuuluvad siia näit. energia ja impulssmoment). Kõikide teiste suuruste kohta ütleme, et nad ei ole eelmistega samaaegselt mõõdetavad (näit. elektroni koordinaat ja energia statsionaarses olekus ei ole samaaegselt mõõdetavad suurused).

Olles loobunud nõudest, et kõik füüsikalised suurused on samaaegselt mõõdetavad (printsipiaalselt) ja seega ka üksteise kaudu arvutatavad, võime formuleerida kvantmehhanika põhiülesanded.

1) Määrata süsteemi (mikroobjekti) olek antud füüsikalistes tingimustes:

- a) leida seda olekut iseloomustavate samaaegselt mõõdetavate suuruste arvulised väärtused,
- b) leida kõikide teiste suuruste arvuliste väärtuste tõenäosuse jaotus.

2) Leida oleku muutumise seadus antud tingimustes ja määrata ühest olekust teise ülemineku tõenäosus.

Kausaalsuse printsiip väidab, et mikroobjekti olek mistahes momendil on põhjuslikult seotud tema olekutega eelnevatel ajahetkedel.

Erinevus klassikalise mehhaanika kausaalsuseprintsiibist johtub sellest, et kvantmehhaaniline olek ei määrata üheselt kõikide suuruste arvulisi väärtusi (mõõtmistulemusi). Seega võime mikromaailmas kausaalsuste seoste olemasolu sedastada ainult füüsikaliste suuruste tõenäosuste vahel.

Kuna teatud katsetes, näit. elektronkimpude liikumisel elektri- ja magnetiväljades, on klassikaline mehhaanika hästi rakendatav, siis peame nõudma, et vastavates tingimustes annaksid kvantmehhaanika valemid piirjuhuna klassikalise mehhaanika valemid.

3. Olekufunktsioon. Superpositsiooniprintsiip.

Nagu sissejuhatuses märgitud, võib kvantmehhaanika probleemide lahendamiseks arendada matemaatilist formalismi mittemeti. Vastavalt Heisenbergi ideele võime igale mikroobjekti iseloomustavale suurusele vastavusse seada mõnesuguse (üldiselt ka välistingimustest sõltuva) maatriksi. Kui sobivalt interpreteerime maatriksite elemente ja karakteristikke arve, võime niisuguste maatriksite hulgaga täielikult kirjeldada objekti olekuid.

Kui meid ei huvita niivõrd üksiku füüsikalise suuruse omadused kui just objekti olekud tervikuna, on maatriksite hulga asemel otstarbekam igale olekule vastavusse seada mõnesugune funktsioon, mis kannab olekufunktsiooni nimetust (nimetatakse ka lainefunktsiooniks, kuna sellist funktsiooni kasutas esmakordselt Schrödinger mikroosakeste jaoks kohandatud lainevõrrandis).

Kui nõuame, et olekufunktsioon kätkeks maksimaalse informatsiooni vastava oleku kohta, peame eeskätt nõudma, et saaksime selle funktsiooni abil arvutada füüsikaliste suuruste tõenäosusi. Kui funktsiooni enda väärtusi tahaksime interpreteerida vahetult tõenäosustena, saaksime olekufunktsioonide jaoks liiga kitsa klassi, s. o. funktsioonide klassi, millesse kuuluvatel funktsioonidel on väärtused ainult vahemikus 0 - 1. Funktsioonide klassi on võimalik laiendada sel teel, et tõenäosusliku tähenduse seome mitte funktsiooni enda, vaid tema mooduli ruudu väärtustega (lubades funktsioonile seega ka kompleksseid väärtusi).

Siis teeme olekufunktsiooni (tähistus ψ) kohta järgmised oletused:

1) ψ võib olla funktsioon mistahes samaaegselt mõdetavate suuruste täieliku kompleksi väärtustest.

ψ argumentide valikut nimetatakse esituse valikuks.

Kui ψ argumentideks valime osakese (osakeste) koordinaadid, nimetame esitust koordinaatesituseks (q -esitus).

Kui ψ argumentideks on osakese impulsi komponendid, on tegemist impulss- e. p -esitusega.

Kui ψ sõltub energiast kui argumentist, saame energiaesituse (E -esitus) jne. ψ arvulised väärtused võivad olla üldiselt kompleksed.

Oleku määrab ψ kuju (mitte arvuline väärtus).

2) Vaheü füüsikaline mõte on olekufunktsiooni absoluutväärtuse ruudul $|\psi(q)|^2$. Kui argument q muutub pidevalt, siis $|\psi(q)|^2|_{q=q_0} dq$ on võrdeline tõenäosusega leida suuruse q väärtust q_0 infinitesimaalses vahemikus dq mikroobjekti olekus, mida kirjeldab $\psi(q)$. $|\psi(q)|^2$ on võrdeline tõenäosusega ühikintervalli kohta ($dq = 1$) ehk tõenäosuse tihedusega.

Kui argument muutub diskreetselt (näit. energia E), siis $|\psi(E)|^2|_{E=E_0}$ annab tõenäosuse (on üldiselt rääkides võrdeline, eriti juhul võrdne tõenäosusega), et olekus, mida kirjeldab $\psi(E)$, on mikroobjekti energia väärtuseks E_0 . Nagu näeme, ei ole tõenäosuse arvutamisel tähtsust teguril $e^{i\alpha}$ (α on reaalarv), mida nimetatakse faasikordajaks. Kui meid huvitavad ainult tõenäosuste suhted q eri väärt-

tustel, võime olekufunktsiooni korrutada veel mõnesuguse teguriga K (normeerimistegur), ilma et need suhted sellest muutuksid. Järelikult kirjeldavad olekufunktsioonid ψ ja $\psi' = \kappa \psi e^{i\alpha}$ ühte ja sama olekut, s. t. olekufunktsioon on määratud normeerimisteguri ja faasikordaja täpsuseni.

3) Vastavalt eelmises punktis kasutatud interpretatsioonile on integraal üle q määramispiirkonnas Ω (diskreetsete q väärtuste korral summa)

$$\int_{\Omega} |\psi(q)|^2 dq = N^2; \quad \left(\sum_q |\psi(q)|^2 = N^2 \right); \quad (3.1)$$

võrdeline tõenäosusega leida mistahes q väärtust selle määramispiirkonnas Ω . Kui võrd peaks eksisteerib, on alati võimalik leida mingisugust q väärtust (mis igas üksikatses võib olla erinev). Seega peab olema $N^2 \neq 0$. Nii-
siis: olekufunktsiooni norm peab nullist erinevama.

Kui N on lõplik, võime κ alati nii valida, et funktsioon oleks normeeritud:

$$\int_{\Omega} |\psi(q)| dq = 1; \quad \left(\sum_q |\psi(q)|^2 = 1 \right). \quad (3.2)$$

Füüsikalise mõtte kohaselt peab tõenäosus leida q mistahes väärtus võrduma ühega. Järelikult: normeeritud olekufunktsiooni absoluutväärtuse ruut annab tõenäosuse tiheduse (diskreetse q korral tõenäosuse) arvulise väärtuse.

Kui ψ ei ole normeeritav ($N \rightarrow \infty$), saame väita ainult seda, et $|\psi(q)|^2$ on võrdeline tõenäosuse tihedusega q - ruumi antud punktis, kusjuures võrdetegur ei sõltu

ψ - ruumi punktist. Sel korral on mõte ainult tšenäosuste suhetel erinevates punktides.

4) Kvantmehhanika üheks põhihüpoteesiks on hüpotees superpositsioonilisest seosest olekute vahel.

Selle hüpoteesi kohaselt peituvad igas olekus potentsiaalsed võimalused lõpmata paljude teiste olekute realiseerumiseks teatava, mõnel juhul nulliga võrduva tšenäosusega. Illustreerime öeldut järgmise lihtsa näitega. Vaatleme polariseeritud valguskiirt. Jätame fikseerimata kõik muud võimalikud parameetrid ja iseloomustame footonite olekuid laine polarisatsiooniga. Kahele sõltumatule polarisatsioonitasandile vastab 2 sõltumatut footoni olekut. Kui niisugune footonite voog langeb turmaliinkristallile, siis see analüsaator võimaldab kindlaks teha kahte tüüpi sõltumatuid olekuid: kui footon on olekus, millele vastav polarisatsioonivektor on paralleelne kristalli optilise teljega (tähistame seda olekut funktsiooniga ψ_{\parallel}), siis läbib footon kristalli; kui polarisatsioonivektor on risti optilise teljega (olek ψ_{\perp}), siis footon kristalli ei läbi. Olgu üldiselt olek, mis vastab polarisatsioonivektori ja optilise telje vahelisele nurgale α , tähistatud ψ_{α} . Kui vastava polarisatsiooniga kiirgusvoog intensiivsusega J langeb analüsaatorile, osutub läbinud kiirguse intensiivsus võrdseks arvuga $J \cos^2 \alpha$, polarisatsioon aga vastavaks olekule ψ_{\parallel} . Footonite mõiste abil võime tulemust tõlgendada selliselt. Iga footoni polarisatsiooni mõõtmisel olekus ψ_{α} realiseerub kas olek ψ_{\parallel} või ψ_{\perp} , kusjuu-

res ψ_n realiseerub tõenäosusega $\cos^2 \alpha$, ψ_{\perp} - tõenäosusega $\sin^2 \alpha$. ψ_n ja ψ_{\perp} on üksteist väljasulgevad o. sõltumatud olekud. Kumb neist olekutest antud footoni korral realiseerub, seda teooria ei ennusta. Ette arvatada võib ainult tõenäosusi. Selles avaldubki kvantteooria statistiline loomus.

Olekute superpositsiooniline seos peab matemaatiliselt väljenduma olekufunktsioonide vastava seosena, mis võimaldaks olekute realiseerumise tõenäosusi arvutada. Katsega hea koosõla annab lineaarse seose postuleerimine olekufunktsioonide vahel, s. t. mistahes olekufunktsioon $\psi(q)$ on esitatav mõnesuguste teiste olekufunktsioonide $\psi_1(q)$, $\psi_2(q)$, $\psi_3(q)$, ... lineaarkombinatsioonina:

$$\psi(q) = a_1 \psi_1(q) + a_2 \psi_2(q) + a_3 \psi_3(q) + \dots, \quad (3.3)$$

kusjuures kordajad a_1 , a_2 , a_3 , ... on seotud vastavate olekute realiseerumise tõenäosustega (vt. § 7).

Valem (3.3) näitab, et olekufunktsioone võime käsitleda mõnesuguse lineaarse ruumi elementide - vektorite - komponendidena (vt. § 32). Seda ruumi nimetatakse Hilberti ruumiks.

§ 4. Füüsikalistele suurustele vastavad operaatorid.

Täpsustame kvantmehhaanika matemaatilist aparatuuri, silmas pidades superpositsiooniprintsiipi, ja diskreetse väärtuste spektriga füüsikaliste suuruste olemasolu.

Matemaatikas on tuntud ülesanded, millede lahenduvus-tingimused tõstavad esile mõnesuguse parameetri väärtuste diskreetse hulga. Need on omaväärtuseülesanded lineaarsete diferentsiaal- ja integraalvõrrandite ning üldse lineaarsete operaatorite teooriast.

Õeldu põhjal on loomulik mingisuguse füüsikalise suuruse arvuliste väärtuste määramise ülesannet vaadelda kui teatud lineaarse operaatori omaväärtuste määramise ülesannet. Siit järgneb kvantmehhaanika matemaatilise aparatuuri põhiidee: I g a l e f ü ü s i k a l i s e l e s u u - r u s e l e s e a t a k s e v a s t a v u s s e t e a - t u d l i n e a a r n e o p e r a a t o r , m i d a r a k e n d a t a k s e o l e k u f u n k t s i o o n i - l e . S e l l e o p e r a a t o r i o m a v ä ä r t u - s e d a n n a v a d v a s t a v a f ü ü s i k a l i - s e s u u r u s e a r v u l i s e d v ä ä r t u s e d , s . o . m õ õ t m i s t u l e m u s e d t e a t u d o l e - k u t e s .

Operaatori omaväärtuste järjestatud hulka nimetatakse tema omaväärtuste spektriks. Operaatori omaväärtuste spekter võib olla kaš pidev või diskreetne või osaliselt pidev, osaliselt diskreetne.

Operaatorite märkimiseks kasutame suuri tähti märgiga tähe kohal, näit. \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} , \hat{L} , \hat{M} , ... Operaatori sümbol kirjutatakse tavaliselt vasakule funktsioonist, millele ta mõjub. Kui operaator \hat{L} seab funktsioonile $\psi(q)$ vastavusse funktsiooni $\varphi(q)$, siis kirjutame selle seose:

$$\hat{L} \psi(q) = \varphi(q).$$

Funktsioone $\psi(q)$, mis rahuldavad tingimust

$$\hat{L} \psi(q) = \lambda \psi(q), \quad (4.1)$$

kus λ on arvuline parameeter, nimetatakse operaatori \hat{L} omafunktsioonideks. Neid parameetri λ väärtusi, millel võrrandil (4.1) on lahendeid, nim. operaatori \hat{L} omaväärtusteks (ka karakteristlikeks arvudeks).

Operaator \hat{L} on lineaarne, kui kehtib tingimus:

$$\hat{L} [a_1 \psi_1(q) + a_2 \psi_2(q)] = a_1 \hat{L} \psi_1(q) + a_2 \hat{L} \psi_2(q). \quad (4.2)$$

Siin on a_1 , a_2 arvulised konstandid, $\psi_1(q)$, $\psi_2(q)$ - suvalised funktsioonid.

Igale operaatorile on võimalik vastavusse seada nn. kaasoperaatori.

Olgu operaatorid \hat{A} ja \hat{B} defineeritud mõnesugusel funktsioonide $\psi_1(q)$, $\psi_2(q)$, ... hulgal. Kui mistahes ψ_i ja ψ_k korral

$$\int \psi_i^* \hat{A} \psi_k dq = \int (\hat{B} \psi_i)^* \psi_k dq, \quad (4.3)$$

siis nim. operaatorit \hat{B} operaatori \hat{A} kaasoperaatoriks ja tähistatakse $\hat{B} = \hat{A}^+$. Valemis (4.3) on tähekesega märgitud kaaskompleksne funktsioon. Kasutades kaasoperaatori definitsiooni ja tähistust võime valemi (4.3) parema poole kirjutada

$$\int (\hat{B} \psi_i)^* \psi_k dq = \int \psi_i^* \hat{B}^+ \psi_k dq. \quad (4.3')$$

Ilmselt $(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}$.

Kui kehtib seos $\hat{A}^+ = \hat{A}$, nim. operaatorit enese-
 kaaseks e. hermiitiliseks (prantsuse matemaatiku Hermite'i
 järgi), kui $\hat{A}^+ = -\hat{A}$ - antihermiitiliseks. Seega rahuldab
 hermiitiline operaator tingimust

$$\int \psi_i^* \hat{A} \psi_k dq = \int (\hat{A} \psi_i)^* \psi_k dq \quad (4.4)$$

mistahes ψ_i ja ψ_k korral antud funktsioonide hulga.

Korrutame võrrandi (4.1) mõlemad pooli funktsiooniga
 ψ^* ja integreerime üle kogu määramispiirkonna. Arvestades,
 et $\int |\psi|^2 dq \neq 0$, võime avaldada λ :

$$\lambda = \frac{\int \psi^* \hat{L} \psi dq}{\int |\psi|^2 dq}; \quad \lambda^* = \frac{\int \psi (\hat{L} \psi)^* dq}{\int |\psi|^2 dq} \quad (4.5)$$

Kui \hat{L} on hermiitiline operaator, siis valemi (4.4)
 põhjal $\lambda = \lambda^*$, s. t. hermiitilise ope-
 raatori kõik omaväärtused on
 reaalsed. Järelikult, kui operaatori omaväärtusi
 tahame tõlgendada füüsikalise suuruse mõõtmistulemustena,
 peavad kõikidele reaalsele füü-
 sikalistele suurustele vastavus-
 se neastavad operaatorid olema
 hermiitilised.

§ 5. Teoreemid hermiitilise operaatori
omafunktsioonide kohta.

Teoreem 1: Erinevatele omaväärtustele vastavad hermiitilise operaatori omafunktsioonid on ortogonaalsed.

Olgu ψ_1 omafunktsioon, mis vastab operaatori \hat{L} omaväärtusele λ_1 , ψ_2 - omaväärtusele λ_2 , s. o.

$$\hat{L}\psi_1 = \lambda_1\psi_1, \quad \hat{L}\psi_2 = \lambda_2\psi_2; \quad \lambda_1 \neq \lambda_2. \quad (5.1)$$

Siis väidab teoreem, et

$$\int \psi_1^* \psi_2 dq = 0 = \int \psi_2^* \psi_1 dq. \quad (5.2)$$

Tõestuseks korrutame (5.1) esimest võrrandit ψ_2^* -ga ja teist võrrandit ψ_1^* -ga ning integreerime üle kogu määramispiirkonna. Saame

$$\int \psi_2^* \hat{L}\psi_1 dq = \lambda_1 \int \psi_2^* \psi_1 dq, \quad (5.3)$$

$$\int \psi_1^* \hat{L}\psi_2 dq = \lambda_2 \int \psi_1^* \psi_2 dq. \quad (5.4)$$

Moodustame (5.4) mõlemast pooldest kaaskompleksse avaldise, pidades silmas λ_2 reaalsust. Saame.

$$\int (\hat{L}\psi_2)^* \psi_1 dq = \lambda_2 \int \psi_2^* \psi_1 dq. \quad (5.5)$$

Lahutame võrrandist (5.3) võrrandi (5.5),

$$\int \psi_2^* \hat{L}\psi_1 dq - \int (\hat{L}\psi_2)^* \psi_1 dq = (\lambda_1 - \lambda_2) \int \psi_2^* \psi_1 dq. \quad (5.6)$$

Avaldise (5.6) vasak pool on null operaatori hermitilisuse tõttu (valem (4.4)). Kuna eelduse põhjal $\lambda_1 - \lambda_2 \neq 0$, siis

$$\int \psi_2^* \psi_1 dq = 0, \quad \text{m.o.t.t.}$$

Teoreem 2. Hermitilise operaatori erinevatele omaväärtustele vastavad omafunktsioonid on lineaarselt sõltumatud.

Tõestame vastuväiteliselt. Oletame, et kehtib seos

$$a_1 \psi_1 + a_2 \psi_2 + a_3 \psi_3 + \dots = 0, \quad (5.7)$$

kus kõik a -d ei ole identselt nullid. ψ_1, ψ_2, \dots on erinevatele omaväärtustele vastavad omafunktsioonid.

Korrutame (5.7) vasakut poolt funktsiooniga ψ_1^* ja integreerime üle määramispiirkonna, saame

$$a_1 \int \psi_1^* \psi_1 dq + a_2 \int \psi_1^* \psi_2 dq + a_3 \int \psi_1^* \psi_3 dq + \dots = 0. \quad (5.8)$$

Kõik teised liidetavad peale esimese on nullid eelmise teoreemi põhjal. Kuna ψ_1 norm ei tohi olla null (vt. p. 3), siis (5.8) kehtivuseks peab olema $a_1 = 0$.

Seost (5.7) korrutades funktsioonidega ψ_2^* , ψ_3^* jne. ning integreerides saab analoogiliselt näidata, et ka kõik teised kordajad a_2, a_3, \dots peavad olema nullid, mis viibki vastuollu eeldusega.

Üldiselt võib operaatori ühele omaväärtusele vastata mitu omafunktsiooni, mis ei tarvitse sel korral olla ortogonaalsed. Ent lineaarsete kombinatsioonide abil saab alati

kõiki sõltumatuid omafunktsioone ortogonaliseerida. Seega võime alati oletada, et operaatori kõik omafunktsioonid moodustavad ortogonaalsete funktsioonide süsteemi. Funktsioonide süsteemi, mille iga element on normeeritud ja kõikide teiste elementidega ortogonaalne, nim. $o r t o n o r m e e r i t u d$ $s ü s t e e m i k s$ (ON-süsteem).

Olgu ψ_i ja ψ_κ meelevaldsed ON-süsteemi elemendid, siis peab kehtima

$$\int \psi_i^* \psi_\kappa dq = \delta_{i\kappa}. \quad (5.9)$$

Kui funktsiooni indeksid i, κ muutuvad pidevalt, siis valemi (5.9) üldistus seisneb Kroneckeri sümboli $\delta_{i\kappa}$ asendamises δ -funktsiooniga $\delta(\epsilon - \alpha)$ (ϵ, α - mingisugused pidevaid väärtusi omandavad suurused), s. o.

$$\int \psi_\epsilon^* \psi_\alpha dq = \delta(\epsilon - \alpha). \quad (5.10)$$

Valem (5.10) näitab, mida mõista funktsioonide ON-süsteemi all juhul, kui funktsioonide norm ei ole lõplik. Ühtlasi näitab valem (5.10), et δ -funktsiooni abil saame "normeerida" niisuguse operaatori omafunktsioone, mille omaväärtuste spekter on pidev (ϵ, α - indeksid, mis vastavad testud omaväärtustele, muutuvad pidevalt). Funktsiooni normi ruut võrdub sel korral δ -funktsiooniga argumenti väärtusel null.

Funktsiooni normi definitsioonist (3.1) järgneb, et lõpliku normiga funktsioonidega kirjeldatavates olekutes võib osake viibida ainult lõplikus q piirkonnas (kui $|\psi(q)|^2 > 0$ lõpmata suures piirkonnas, siis integraal hajub). Tõsi-

asi, et pidevale spektrile vastavas olekus funktsiooni norm on lõpmatu ja järelikult osakese viibimise tõenäosus nullist erinev lõpmatus piirkonnas, leiab põhjendamist järgmises punktis.

§ 6. Omafunktsioonide süsteemi täielikkus.

Kvantmehhaanikas kasutatavate operaatorite kohta peame esitama täiendava nõude, mis garanteeriks superpositsioonilise seose kehtivuse mistahes oleku ja operaatorile vastava füüsikalise suuruse omaolekute vahel.

Selleks peame nõudma, et mistahes olekufunktsioon oleks arendatav antud operaatori sõltumatute omafunktsioonide järgi ritta vähemalt keskmise koonduvuse mõttes. Funktsioonide süsteemi, mille abil saame meelevaldse samasse klassi kuuluva funktsiooni aproksimeerida kuitahes täpselt keskmise koonduvuse mõttes, nimetatakse täielikuks süsteemiks.

Järelikult: kõikide kvantmehhaaniliste operaatorite omafunktsioonide süsteemid peavad olema täielikud.

Vaatleme konkreetsuse mõttes diskreetse omaväärtuste spektriga operaatorit \hat{L} ning oletame, et omaväärtuste jada on lõpmatu: $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \dots$

Olgu vastavate omafunktsioonide jada

$$\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$$

Üldisust kitsendamata võime oletada, et ψ_n -d moodustavad ON-süsteemi.

Mistahes olekufunktsiooni ψ võime aproksimeerida reaga

$$\psi = a_1 \psi_1 + a_2 \psi_2 + \dots + a_n \psi_n \quad (6.1)$$

kus a -d on üldiselt rääkides komplekssed arenduse kordajad.

Funktsioonide süsteemi $\{\psi_n\}$ täielikkuse kriteeriumi saame siis kujus

$$\int |\psi|^2 dq = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{\kappa=1}^n |a_\kappa|^2, \quad (6.2)$$

s. t. rida (6.1) koondub keskmiselt mistahes olekufunktsiooniks ψ , kui sobivalt valida arenduse kordajad a_κ .

Seejuures

$$\psi^* = a_1^* \psi_1^* + \dots + a_n^* \psi_n^*. \quad (6.3)$$

Eeldusel, et funktsioonide süsteem $\{\psi_n\}$ on täielik, võime vahetult kirjutada

$$\int |\psi|^2 dq = \sum_{\kappa=1}^{\infty} |a_\kappa|^2. \quad (6.4)$$

Kui olekufunktsioon ψ on normeeritud, siis

$$\sum_{\kappa=1}^{\infty} |a_\kappa|^2 = 1. \quad (6.5)$$

Punktis 3 esitatud kaalutlustel võime (6.5) vasakut poolt vaadelda tõenäosuste summana. Iga liidetav $|a_\kappa|^2$ annab tõenäosuse funktsiooniga ψ_κ kirjeldatava oleku realiseerimiseks. Sellepärast nim. kordajaid a_κ tõenäosuse amplituudideks.

Seda tulemust võime üldisemalt sõnastada järgmiselt:

Kui mistahes normeeritud olekufunktsiooni arendame mõnesuguse operaatori täieliku ON-süsteemi moodustavate oma-

funktsioonide järgi ritta, siis on arenduse kordajateks vastava oleku esinemise tõenäosuse amplituudid.

Moodustagu operaatori \hat{L} omaväärtuste hulk pideva spektri. Siis vastab arendusele (6.1) valem

$$\psi(q) = \int_{\lambda_{\min}}^{\Lambda} a(\lambda) \psi_{\lambda}(q) d\lambda \quad (6.1')$$

ja

$$\psi^*(q) = \int_{\lambda_{\min}}^{\Lambda} a^*(\lambda) \psi_{\lambda}^*(q) d\lambda. \quad (6.3')$$

Funktsioonide ψ_{λ} süsteemi täielikkuse kriteerium avaldub siis kujul

$$\int |\psi(q)|^2 dq = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int_{\lambda_{\min}}^{\Lambda} d\lambda |a(\lambda)|^2. \quad (6.2')$$

Teiselt poolt, valemitest (7.1', 3')

$$\int |\psi(q)|^2 dq = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int_{\lambda_{\min}}^{\Lambda} d\lambda' a_{\lambda'}^* \int_{\lambda_{\min}}^{\Lambda} d\lambda a_{\lambda} \cdot \int \psi_{\lambda'}^*(q) \psi_{\lambda}(q) dq. \quad (6.6)$$

Kui $\int \psi_{\lambda'}^* \psi_{\lambda} dq = \delta(\lambda' - \lambda)$, siis (6.6) ühtib parem pool valemi (6.2') parema poolega. Kui aga funktsioonid ψ_{λ} , ψ_{λ} oleksid ortogonaalsed, kuid lõpliku normiga, siis *

$$\int_{\lambda_{\min}}^{\Lambda} d\lambda' a_{\lambda'}^* \int_{\lambda_{\min}}^{\Lambda} d\lambda a(\lambda) \int \psi_{\lambda'}^*(q) \psi_{\lambda}(q) dq = 0.$$

Järelikult, kui ka pideva spektriga füüsikalise suuruse korral nõuame, et mistahes olekus saaksime arvutada tema

* Eeldatud on, et $a(\lambda)$ on kõikjal lõplik, excl. isoleeritud punktid, kusjuures integraal $\int |a(\lambda)|^2 d\lambda$ üle iga lõpliku piirkonna, mis võib sisaldada ka singulaarsuse, peab olema lõplik.

väärtuste tšenõosuse jaotuse, s. t. arenduse kordajaid $\alpha(\lambda)$ tõlgendada tšenõosuseamplituudidena, peab vastava operaatori omafunktsioonide norm olema lõpmatu. Ainult niisugused suurused on füüsiliselt mõõdetavad e. jälgitavad.

Niisiis peame igale füüsilisele suurusele vastavusse seatud operaatorile esitama nõuded, et 1) ta oleks hermiitiline vähemalt tema enda omafunktsioonide hulgal, 2) tema omafunktsioonid moodustaksid täieliku süsteemi.

7. Füüsilise suuruse keskvaertuse arvutamine.

Vaatleme operaatori rakendamist olekufunktsioonile, mis ei ole tema omafunktsiooniks.

Kirjeldagu uuritavat olekut funktsioon ψ , mille arendame ritta operaatori \hat{L} omafunktsioonide $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$ järgi, mis vastavad omaväärtustele $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \dots$. Kasutades arendust kujul (6.1), operaatori \hat{L} lineaarsuse omadust (4.2) ja omaväärtusprobleemi võrrandit (4.1), saame

$$\begin{aligned}\hat{L}\psi &= a_1 \hat{L}\psi_1 + \dots + a_n \hat{L}\psi_n + \dots = \\ &= \lambda_1 a_1 \psi_1 + \dots + \lambda_n a_n \psi_n + \dots\end{aligned}$$

või kompaktsemalt

$$\hat{L}\psi = \sum_n \lambda_n a_n \psi_n. \quad (7.1)$$

Võrduse (7.1) mõlemaid pooli korrutame ψ^* -ga (arendatud vastavalt valemile (6.3)) ja integreerime

$$\int \psi^* \hat{L} \psi dq = \sum_{n,m} a_m^* a_n \lambda_n \int \psi_m^* \psi_n dq$$
 või, arvestades omafunktsioonide ortonormaalsust,

$$\int \psi^* \hat{L} \psi dq = \sum_n \lambda_n |a_n|^2. \quad (7.2)$$

Parempoolse summa iga liidetav koosneb omaväärtusest, mis on korrutatud vastava oleku esinemise tõenäosusega. Summa, kus iga liidetav koosneb arvu ja tema esinemise tõenäosuse korrutisest, annab teatavasti nende arvude keskvärtuse (nimetatakse ka matemaatiliseks ooteks). Järelikult annab integraal $\int \psi^* \hat{L} \psi dq$ operaatorile \hat{L} vastava füüsikalise suuruse keskvärtuse funktsiooniga ψ kirjeldatavas olekus:

$$\bar{L} = \int \psi^* \hat{L} \psi dq, \quad (7.3)$$

kus \bar{L} tähistab keskvärtust (kasutatakse ka tähistust $\langle L \rangle$).

Operaatori \hat{L} hermiitilisuse tõttu on tema keskvärtused reaalsed, mis järgneb ka vahetult (7.2) paremast poolest.

Kui ψ on mõneks \hat{L} omafunktsiooniks, näit. $\psi = \psi_k$, siis ψ arenduses (6.1) on kõik kordajad nullid, excl. a_k , kusjuures (6.5) põhjal $|a_k|^2 = 1$.

Sel korral ühtib keskvärtus füüsikalise suuruse L mõõtmistulemusega, s. o.

$$\int \psi_k^* \hat{L} \psi_k dq = \lambda_k. \quad (7.4)$$

Me ütleme, et antud olekus saame füüsikalise suuruse L mõõtmistulemuseks λ_k , kui samades tingimustes teostatud korduvad katsed (katsed paljude samades tingimustes viibivate osakestega) annavad tulemuseks λ_k . Kui igal üksikmõõtmisel

misel saame üldiselt rääkides erineva tulemuse, $\lambda_{\kappa_1}, \lambda_{\kappa_2}, \dots$ jne., kus iga λ_{κ} esineb teatud suhtelise sagedusega, siis antud olekus on määratav ainult füüsikalise suuruse L tõenäosuse jaotus (ja selle abil arvutatav L keskväärtn \bar{L}).

8. Operaatorite korrutamine.

Kahe operaatori \hat{F} , \hat{G} korrutamise all tuleb mõista nende järjest rakendamist olekufunktsioonile ψ , s. o.

$$\hat{F} \hat{G} \psi = \hat{F} (\hat{G} \psi). \quad (8.1)$$

Kahe operaatori korrutis ei ole üldiselt kommutatiivne. Olgu operaatorite \hat{F} , \hat{G} järjest rakendamine suvalisele funktsioonile ekvivalentne mõnesuguse kolmanda operaatori \hat{A} rakendamisega. Siis kirjutame

$$\hat{A} = \hat{F} \hat{G} \quad (8.2)$$

Avaldame \hat{A} kaasoperaatori \hat{A}^+ operaatorite \hat{F}^+ ja \hat{G}^+ kaudu. Lähtume definitsioonist (4.3) ja (8.2). Siis ühelt poolt

$$\int \psi_i^* \hat{A} \psi_{\kappa} dq = \int (\hat{A}^+ \psi_i)^* \psi_{\kappa} dq, \quad (8.3)$$

teiselt poolt

$$\int \psi_i^* \hat{A} \psi_{\kappa} dq = \int \psi_i^* \hat{F} (\hat{G} \psi_{\kappa}) dq. \quad (8.4)$$

Teisendame võrduse (8.4) paremat poolt. Kasutame tähistusi $\hat{G} \psi_{\kappa} = \varphi_{\kappa}$, $\hat{F}^+ \psi_i = \chi_i$

$$(8.5)$$

ja \hat{F}^+ ning \hat{G}^+ definitsiooni. Siis

$$\begin{aligned} \int \psi_i^* \hat{F} \hat{G} \psi_k dq &= \int \psi_i^* \hat{F} \psi_k dq = \int (\hat{F}^+ \psi_i)^* \psi_k dq = \\ &= \int \pi_i^* \psi_k dq = \int \pi_i^* \hat{G} \psi_k dq = \int (\hat{G}^+ \pi_i)^* \psi_k dq = \\ &= \int (\hat{G}^+ \hat{F}^+ \psi_i)^* \psi_k dq. \end{aligned} \quad (8.6)$$

Võrreldes valemeid (8.3, 4, 6), saame:

$$\text{kui } \hat{A} = \hat{F} \hat{G}, \text{ siis } \hat{A}^+ = \hat{G}^+ \hat{F}^+. \quad (8.7)$$

Teoreem 1. Kui kahe operaatori korrutis on kommutatiivne, siis on nendel operaatoritel ühine täielik omafunktsioonide süsteem.

Vaatleme operaatoreid \hat{F} , \hat{G} , kusjuures eelduse kohaselt

$$\hat{F} \hat{G} \psi = \hat{G} \hat{F} \psi \quad (8.8)$$

meelevaldse ψ korral.

Valime $\psi = \psi_g$, kusjuures ψ_g on defineeritud võrrandiga

$$\hat{G} \psi_g = g \psi_g. \quad (8.9)$$

Arendame ψ_g operaatori \hat{F} omafunktsioonide järgi ritta. (\hat{F} omafunktsioonid ψ_f moodustavad täieliku süsteemi).

Olgu see arendus

$$\psi_g = \sum_x c_x \psi_{fx}. \quad (8.10)$$

Funktsioonid ψ_{fx} on lineaarselt sõltumatud ja rahuldavad võrrandit

$$\hat{F} \psi_{fx} = f_x \psi_{fx}, \quad (8.11)$$

kus $\hat{F} \psi_k$ on operaatori \hat{F} vastavad omaväärtused. Valemite (8.9) ja (8.10) põhjal

$$\hat{G} \psi_g = g \sum_k c_k \psi_{fk} = \sum_k c_k \hat{G} \psi_{fk}, \quad (8.12)$$

s. t.

$$\sum_k c_k (\hat{G} - g) \psi_{fk} = 0. \quad (8.13)$$

Operaatorite \hat{G} ja \hat{F} kommuteeruvuse tõttu on ka $\hat{G} \psi_{fk} \hat{F}$ omafunktsiooniks omaväärtusel f_k , sest (8.8) põhjal

$$\hat{F} (\hat{G} \psi_{fk}) = \hat{G} (\hat{F} \psi_{fk}) = \hat{G} f_k \psi_{fk} = f_k (\hat{G} \psi_{fk})$$

\hat{F} erinevatele omaväärtustele vastavate omafunktsioonide lineaarse sõltumatuse tõttu (vt. § 5) võib võrdus (8.13) aset leida ainult siis, kui iga liidetav saab eraldi nulliks, s. o.

$$\hat{G} \psi_{fk} = g \psi_{fk}, \quad \text{m.o.t.t.}$$

Esitatud tõestus kehtib juhul, kui operaatoril \hat{F} ei ole kordseid omaväärtusi. Kõdunud omaolekute korral võib operaatori \hat{F} ühele ja samale omaväärtusele vastavatest omafunktsioonidest moodustada lineaarkombinatsiooni, mis on operaatori \hat{G} omafunktsiooniks.

Teoreem 2. Kui kahel operaatoril on ühine täielik omafunktsioonide süsteem, siis need operaatorid kommuteeruvad.

Moodustagu funktsioonid ψ_k operaatorite \hat{F} ja \hat{G} ühise täieliku omafunktsioonide süsteemi, s. t. olgu mistahes oleku funktsioon ψ arendatav ritta

$$\psi = \sum_k c_k \psi_k, \quad (8.14)$$

kusjuures

$$\hat{G} \psi_k = g_k \psi_k \quad (8.15)$$

ja

$$\hat{F} \psi_k = f_k \psi_k. \quad (8.16)$$

Valemite (8.15) ja (8.16) põhjal

$$\hat{F} \hat{G} \psi_k = \hat{F} (g_k \psi_k) = g_k \hat{F} \psi_k = g_k f_k \psi_k, \quad (8.17)$$

$$\hat{G} \hat{F} \psi_k = \hat{G} (f_k \psi_k) = f_k \hat{G} \psi_k = f_k g_k \psi_k. \quad (8.18)$$

Et f_k ja g_k on harilikud arvud, on nende korrutis kommutatiivne, seega

$$\hat{F} \hat{G} \psi_k = \hat{G} \hat{F} \psi_k. \quad (8.19)$$

Kuna valem (8.19) kehtib arenduse (8.14) iga liikme kohta; siis ka summa enese kohta, s. o.

$$\hat{F} \hat{G} \psi = \hat{G} \hat{F} \psi, \quad \text{m.o.t.t.}$$

ψ meelevaldsuse tõttu jäetakse ta sageli juurde märkimata ning kirjutatakse operaatorite kommutatiivsus sümbolisel kujul

$$\hat{F} \hat{G} = \hat{G} \hat{F}. \quad (8.20)$$

Teoreemidest 1 ja 2 järgneb, et kui kaks füüsikalist suurust on samaaegselt mõõdetavad, siis neile vastavad operaatorid kommuteeruvad ja ümberp.: kommuteeruvad operaatorid vastavad samaaegselt mõõdetavatele füüsikalistele suurustele.

Teoreem 3. Kui operaator \hat{F} kommuteerub operaatoriga

\hat{G} ja operaatoriga \hat{H} , kusjuures \hat{G} ja \hat{H} omavahel ei kommuteeru, siis on operaatori \hat{F} omaolekud kõdunud.

Olekut nim. kõdunuks, kui ühele ja samale omaväärtusele vastab mitu sõltumatut omafunktsiooni.

Olgu ψ_1 operaatori \hat{F} mõnesugune omafunktsioon, mis vastab omaväärtusele f_1 , s. o.

$$\hat{F} \psi_1 = f_1 \psi_1. \quad (8.21)$$

Olgu

$$\hat{G} \hat{H} \psi_1 = \varphi_1 \quad (8.22)$$

ja

$$\hat{H} \hat{G} \psi_1 = \chi_1. \quad (8.23)$$

Eelduse kohaselt üldiselt $\varphi_1 \neq \chi_1$.

Teiselt poolt

$$\hat{F} \varphi_1 = \hat{F} \hat{G} \hat{H} \psi_1 = \hat{G} \hat{H} \hat{F} \psi_1 = f_1 (\hat{G} \hat{H} \psi_1) = f_1 \varphi_1 \quad (8.24)$$

ning

$$\hat{F} \chi_1 = \hat{F} \hat{H} \hat{G} \psi_1 = \hat{H} \hat{G} \hat{F} \psi_1 = f_1 (\hat{H} \hat{G} \psi_1) = f_1 \chi_1. \quad (8.25)$$

Võrdused (8.24) ja (8.25) näitavad, et φ_1 ja χ_1 , mis üldiselt ei ühti, on \hat{F} ühele ja samale omaväärtusele f_1 vastavad omafunktsioonid, m.o.t.t.

Teoreem 4. Kahe hermiitilise operaatori korrutis on hermiitiline ainult siis, kui need operaatorid kommuteeruvad. Mittekommuteeruvate operaatorite korrutist võib lahutada hermiitiliseks ja antihermiitiliseks osaks.

Kahe operaatori korrutise võime kirjutada

$$\hat{F}\hat{G} = \frac{1}{2}(\hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F}) + \frac{1}{2}(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}). \quad (8.26)$$

Tähistame

$$\hat{H} = \hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F}; \quad \hat{A} = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} \quad (8.27)$$

ning näitame, et \hat{H} on hermitiline, \hat{A} - antihermitiline; s. t.

$$\int \psi_i^* \hat{H} \psi_k dq = \int (\hat{H} \psi_i)^* \psi_k dq, \quad (8.28)$$

$$\int \psi_i^* \hat{A} \psi_k dq = - \int (\hat{A} \psi_i)^* \psi_k dq, \quad (8.29)$$

kus ψ_i , ψ_k on meelevaldsed olekufunktsioonid.

Tõestame (8.28) kehtivust (tõestus (8.29) kehtivuse kohta on täiesti analoogiline). Tõestuseks kasutame operaatorite \hat{F} ja \hat{G} hermitilisust ja valemit (8.7):

$$\hat{H}^+ = \hat{G}^+ \hat{F}^+ + \hat{F}^+ \hat{G}^+.$$

Kuid $\hat{F}^+ = \hat{F}$, $\hat{G}^+ = \hat{G}$;

seega $\hat{H}^+ = \hat{G} \hat{F} + \hat{F} \hat{G} = \hat{H}$, m.o.t.t.

Kui oleme defineerinud operaatorite korrutise vastavalt valemile (8.1) ja lineaarkombinatsiooni: $\hat{C} = a\hat{A} + b\hat{B}$, kui suvalise ψ korral

$$\hat{C}\psi = a(\hat{A}\psi) + b(\hat{B}\psi), \quad (8.30)$$

a, b - konstandid, siis võime moodustada polünoomi operaatorist \hat{A} :

$$R(\hat{A}) = c_0 + c_1 \hat{A} + c_2 \hat{A}^2 + \dots + c_n \hat{A}^n. \quad (8.31)$$

Operaatoril $R(\hat{A})$ on ilmselt ühised omafunktsioonid operaatoril

toriga \hat{A} ja ta omaväärtused ϱ avalduvad operaatori \hat{A} omaväärtuste α kaudu järgmiselt:

$$\varrho = c_0 + c_1 \alpha + c_2 \alpha^2 + \dots + c_n \alpha^n, \quad (8.32)$$

s. t. ϱ on samasugune funktsioon α -st nagu operaator \hat{R} operaatorist \hat{A} . Selle tulemuse, mis astmefunktsiooni korral on valemitest (8.11, 30, 31) otseselt arvutatav, võtame aluseks -stahes funktsiooni F defineerimisel operaatorist \hat{A} .

Me ütleme, et operaator \hat{G} on funktsioon operaatorist \hat{A} , s. o. $\hat{G} = F(\hat{A})$, kui operaatoritel \hat{G} ja \hat{A} on ühised omafunktsioonid ja nende omaväärtuste γ ja α vahel on samasugune funktsionaalne sõltuvus, s. t. $\gamma = F(\alpha)$.

Mittekommuteeruvatest operaatoritest ei ole võimalik selle definitsiooni alusel funktsioone moodustada, sest mittekommuteeruvatel operaatoritel ei ole ühiseid omaolekuid. Ka ei saa neist moodustada astmefunktsioone, mis sisaldaksid erinevate operaatorite korrutisi, kuna tulemus sõltub tegurite järjekorrast. Mittekommuteeruvatest operaatoritest \hat{A} ja \hat{B} võime küll moodustada funktsiooni kujul $\hat{F} = F_1(\hat{A}) + F_2(\hat{B})$. Kuna aga operaator \hat{F} ei kommuteeru \hat{A} -ga ega \hat{B} -ga, leitakse ta omaväärtused viimastest sõltumatult. Üldisemate funktsioonide korral, mis sisaldavad mittekommuteeruvaid operaatoreid, on viimaste järjestus määratud funktsiooni definitsiooniga.

9. Klassikaline mehhaanika kvantmehhaanika piirjuhuna.

Klassikalise mehhaanika ja geomeetrilise optika põhi-
printsipiide ja põhivõrrandite sarnasus võimaldab võrrelda
lainefunktsioone laineoptikas olekufunktsioonidega kvant-
mehhaanikas (sageli nimetatakse olekufunktsioone ka laine-
funktsioonideks). Teades, kuidas toimub üleminek laineopti-
kalt geomeetrilisele, võime analoogia abil leida lainefunkt-
siooni kaju piirjuhul, kui klassikalise mehhaanika mõisted
on uuritavale süsteemile küllalt hästi rakendatavad. (Täp-
sem kriteerium on esitatud kvantmehhaanika ülesannete kogu-
lisa A punktis 3 b.) Olekufunktsiooni nimetatakse niisu-
gusel piirjuhul kvaasiklassikaliseks.

Elektromagnetilist lainet kirjeldav suurus ψ rahuldab
võrrandit

$$\sum_{\mu=1}^4 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_{\mu}^2} = 0, \quad (9.1)$$

kus $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z, x_4 = ict$.

Funktsiooni ψ võime esitada

$$\psi = a e^{i\varphi}, \quad (9.2)$$

kus a on laine amplituud, φ - faas. Geomeetrilisele op-
tikale üleminek toimub siis, kui lainepikkuse λ võime lu-
geda lõpmata väikeseks, s. o. $\lambda \rightarrow 0$. Kuna φ muutub
 λ - pikkusel lõigul 2π võrra, peavad piirjuhul $\lambda \rightarrow 0$ φ
ja tema tuletistel olema suured arvilised väärtused. Paigu-
tades neil eeldusel avaldise (9.2) võrrandisse (9.1) ning

säilitades suurimad liikmed, jõuame nn. eikonaali võrrandini

$$\sum_{\mu=1}^4 \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_{\mu}} \right)^2 = 0, \quad (9.3)$$

mis on geomeetrilise optika põhivõrrandiks.

Võrrand (9.3) on täiesti analoogiline relativistliku osakese Hamilton-Jacobi võrrandiga

$$\sum_{\mu=1}^4 \left(\frac{\partial S}{\partial x_{\mu}} \right)^2 + m^2 c^2 = 0, \quad (9.4)$$

kus S on osakese mõjufunktsioon, m - osakese seisumass, c - valguse kiirus vaakumis. Faasi ψ osa etendab mõjufunktsiooni S .

Oletades analoogiat ka laineoptika ja kvantmehhaanika vahel (mida kinnitab eksperiment mikropartiklite laineliste omaduste kohta), võime kvaasiklassikalist lainefunktsiooni otsida kujul

$$\psi = a e^{i\kappa S}, \quad (9.5)$$

kus a on koordinaatidest ja ajast nõrgalt sõltuv amplituud, S - mõjufunktsioon, κ - mõju pöördimensiooniga universaalne konstant, kusjuures

$$\kappa S \gg 1. \quad (9.6)$$

Niisuguseks universaalseks konstandiks on Plancki konstandi \hbar pöördväärtus. Seega võime kvaasiklassikalise lainefunktsiooni kirjutada

$$\psi = a e^{\frac{i}{\hbar} S}, \quad (9.7)$$

kus $a \approx \text{konst.}$, $S \gg \hbar$.

10. Poissoni sulud ja kommutaatorid.

Klassikalises mehhaanikas tuntud Poissoni sulge on võimalik üle kanda kvantmehhaanika matemaatilisse aparatuuri. Séejuures võetakse aluseks need klassikaliste Poissoni sulgude omadused, mis ei sõltu kanooniliste muutujate valikust. Osutub, et mõnesuguste füüsikaliste suuruste A ja B vaheliste klassikaliste sulgude kvantmehhaaniliseks analoogiks on vastavate operaatorite vaheline kommutaator. See tulemus võimaldab mõnel juhul arvutada kommutaatoreid, kui vastavad klassikalised Poissoni sulud on teada. Nii näiteks selgub, et need operaatorid, millele klassikalises füüsikas vastab kanooniliselt konjugeeritud füüsikaliste suuruste paar (näit. koordinaat-impulss, pöördenurk-impulssmoment), ei kommuteeru.

Klassikalised Poissoni sulud kahe füüsikalise suuruse F , G vahel defineeritakse järgmiselt:

$$\{F, G\} = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial F}{\partial p_k} \frac{\partial G}{\partial q_k} - \frac{\partial F}{\partial q_k} \frac{\partial G}{\partial p_k} \right), \quad (10.1)$$

kus F , G on funktsioonid kanoonilistest muutujatest p_k , q_k ning n on vabadusastmete arv.

Lähtudes definitsioonist, võib kontrollida järgmiste omaduste kehtivust:

$$\{F, G\} = -\{G, F\}; \quad (10.2)$$

$$\{F_1 + F_2, G\} = \{F_1, G\} + \{F_2, G\}; \quad (10.3)$$

$$\{F_1 F_2, G\} = F_1 \{F_2, G\} + \{F_1, G\} F_2; \quad (10.4)$$

$$\{F, G_1 G_2\} = \{F, G_1\} G_2 + G_1 \{F, G_2\}. \quad (10.5)$$

Oletame, et ka vastavate operaatorite \hat{F} , \hat{G} vahel võime defineerida testud viisil Poissoni sulud, mis alluvad seaduspärasustele (10.2 - 5) ning on sama dimensiooniga kui klassikalised suludki. Kui klassikalised Poissoni sulud võrduvad mingi konstandiga, peavad sama konstandiga võrduma ka kvantmehhaanilised Poissoni sulud. S. t. kui

$$\{F, G\} = \kappa, \quad (10.6)$$

siis ka

$$\{\hat{F}, \hat{G}\} = \kappa. \quad (10.7)$$

Seost (10.7) tuleb mõista järgmiselt:

$$\{\hat{F}, \hat{G}\} \psi = \kappa \psi, \quad (10.8)$$

kus ψ on meelevaldne olekufunktsioon.

Vaatleme nelja suvalist operaatorit $\hat{F}_1, \hat{F}_2, \hat{G}_1, \hat{G}_2$. Arvutame Poissoni sulu $\{\hat{F}_1 \hat{F}_2, \hat{G}_1 \hat{G}_2\}$, kasutades üks kord esmalt arendust (10.4) ja siis (10.5), teine kord ümberpöörduvalt. Tulemused peavad olema samad.

Siis saame ühelt poolt

$$\begin{aligned} \{\hat{F}_1 \hat{F}_2, \hat{G}_1 \hat{G}_2\} &= \hat{F}_1 \{\hat{F}_2, \hat{G}_1 \hat{G}_2\} + \{\hat{F}_1, \hat{G}_1 \hat{G}_2\} \hat{F}_2 = \\ &= \hat{F}_1 \{\hat{F}_2, \hat{G}_1\} \hat{G}_2 + \hat{F}_1 \hat{G}_1 \{\hat{F}_2, \hat{G}_2\} + \{\hat{F}_1, \hat{G}_1\} \hat{G}_2 \hat{F}_2 + \\ &+ \hat{G}_1 \{\hat{F}_1, \hat{G}_2\} \hat{F}_2, \end{aligned} \quad (10.9a)$$

teiselt poolt

$$\begin{aligned} \{\hat{F}_1 \hat{F}_2, \hat{G}_1 \hat{G}_2\} &= \{\hat{F}_1, \hat{F}_2, \hat{G}_1\} \hat{G}_2 + \hat{G}_1 \{\hat{F}_1, \hat{F}_2, \hat{G}_2\} = \\ &= \{\hat{F}_1, \hat{G}_1\} \hat{F}_2 \hat{G}_2 + \hat{F}_1 \{\hat{F}_2, \hat{G}_1\} \hat{G}_2 + \hat{G}_1 \hat{F}_1 \{\hat{F}_2, \hat{G}_2\} + \\ &+ \hat{G}_1 \{\hat{F}_1, \hat{G}_2\} \hat{F}_2. \end{aligned} \quad (10.9b)$$

Võrrutades võrduste (10.9a ja b) paremal poolel saame

$$\{\hat{F}_2, \hat{G}_2\}(\hat{F}_1 \hat{G}_1 - \hat{G}_1 \hat{F}_1) = -\{\hat{F}_1, \hat{G}_1\}(\hat{G}_2 \hat{F}_2 - \hat{F}_2 \hat{G}_2). \quad (10.10)$$

Operaatorite meelevaldsuse tõttu peab kehtima mistahes operaatorite paari \hat{F} , \hat{G} korral

$$i(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}) = \kappa \{\hat{F}, \hat{G}\}, \quad (10.11)$$

kus κ on mõju dimensiooniga universaalne konstant. Võrduse (10.11) vasaku poole oleme i -ga korrutanud, et saada hermitilist operaatorit, kuna Poissoni sulud reaalsete füüsikaliste suuruste vahel on reaalsed. Konstandi κ määramisel on silmas peetud, et Poissoni sulgude dimensioon on mõju dimensiooni võrra väiksem suuruste F , G korrutise dimensioonist. Õeldu põhjal võime võtta $\kappa = \hbar$ ning seos (10.11) omandab lõpliku kuju

$$\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = \frac{\hbar}{i} \{\hat{F}, \hat{G}\}. \quad (10.12)$$

Kui tähistame kanoonilised koordinaadid q_i ja neile vastavad impulsid p_i -ga, siis

$$\{p_i, q_k\} = \delta_{ik},$$

millest saame otsekohe arvutada kommutaatorite väärtused

$$p_i \hat{q}_k - \hat{q}_k p_i = \frac{\hbar}{i} \delta_{ik}. \quad (10.13)$$

Tavaliselt tähistatakse kommutaatorit sümboliga $[,]$ või $[,]_-$, s. o.

$$\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} \equiv [\hat{F}, \hat{G}].$$

Operaatorite kommutaatorid rahuldavad samuti seoseid

(10.2 - 5), mida saab kontrollida ka vahetu arvutuse teel.

Valem (10.13) on olulise tähtsusega kvantmehaanikas, sest teda saab põhimõtteliselt kasutada kõikide klassikalise analoogiaga füüsikaliste suuruste operaatorkuju määramiseks.

11. Määramatuse printsiip ja määramatuse relatsioonid.

Määramatuse printsiip kajastab kõige üldisemat erinevust makro- ja mikrofüüsika objektide omaduste vahel. Selle printsiibi kohaselt ei eksisteeri niisuguseid füüsikalisi tingimusi, kus vaadeldava objekti kõik fünaamilised karakteristikud eviksid kindlaid väärtusi (s. t., kus nende korduv mõõtmine annaks sama tulemuse). Teatud karakteristikute paaride väärtuste dispersioonide (määramatuse vahemike) vahel on olemas korrelatsioon, mida väljendavad määramatuse seosed. Osutub, et kanoonilise paari määramatuse vahemike korrutis ei saa üheski olukorras suurusjärgult väiksemaks Plancki konstandist \hbar . Sellest järeldub ka, et makrofüüsikas kaob vastav korrelatsioon, kuna makroskoopiliste mõjudega võrreldes on \hbar kaduvväike suurus.

Määramatuse printsiip on aluseks mikroobjektide mõõtmisteooriale näidates, mis liiki informatsiooni on mikromaailmast võimalik saada (vt. sissejuhatus). Määramatuse relatsioonid kasutatakse mitmesuguste suuruste väärtusvahemikkude hindamiseks (näit. energia suurusjärgud ja nivoode laused

mitmesugustes süsteemides. Vt. ka ülesannete kogu ül. 14 - 19, 23).

Näitame, et määramatuse seosed järgnevad vahetult kvantmehhaanika operaatorformalismist.

Viibigu füüsikaline objekt olekus, mida kirjeldab laine-funktsioon ψ . Iseloomustagu seda objekti 2 suurust A , ja B , millele vastavad hermiitilised operaatorid \hat{A} , \hat{B} .

Tähistame

$$i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = \hat{C}, \quad (11.1)$$

kus \hat{C} on hermiitiline operaator. Olgu \bar{A} ja \bar{B} vastavate füüsikaliste suuruste keskväärtused ning $\Delta\hat{A}$ ja $\Delta\hat{B}$ - nende hälvete operaatorid, kusjuures

$$\begin{aligned} \Delta\hat{A} &= \hat{A} - \bar{A}, \\ \Delta\hat{B} &= \hat{B} - \bar{B} \end{aligned} \quad (11.2)$$

ning kehtib seos

$$i[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = i[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}, \quad (11.3)$$

kuna harilikud arvud \bar{A} , \bar{B} kommuteeruvad mistahes operaatoritega.

Vaatleme integraali J üle funktsiooni ψ määramispiirkonna, tähistades ψ argumentide kompleksi tähega q :

$$J = \int |(\Delta\hat{A} + i\beta\Delta\hat{B})\psi|^2 dq \geq 0, \quad (11.4)$$

kus β on reaalne parameeter.

Arvestades operaatorite $\Delta\hat{A}$ ja $\Delta\hat{B}$ hermiitilisust ning seost (11.3), võime J avaldada

$$J = \int \psi^* (\Delta \hat{A})^2 \psi dq + \beta^2 \int \psi^* (\Delta \hat{B})^2 \psi dq + \beta \int \psi^* \hat{C} \psi dq$$

või keskväertuse definitsiooni kohaselt ning J mittenegatiivsuse tõttu

$$\overline{(\Delta A)^2} + \beta^2 \overline{(\Delta B)^2} + \beta \bar{C} \geq 0. \quad (11.5)$$

Ruutvormide teooria kohaselt peab võrratus (11.5) paika β mistahes reaalarvuliste väärtuste korral, kui

$$4 \overline{(\Delta A)^2} \overline{(\Delta B)^2} \geq (\bar{C})^2. \quad (11.6)$$

$\overline{(\Delta A)^2}$ ja $\overline{(\Delta B)^2}$ võime tõlgendada kui suuruste A ja B hälvete ruutkeskmisi.

Kui operaatorid \hat{A} ja \hat{B} kommuteeruvad, s. t. vastavad samaaegselt mõõdetavatele suurustele, siis $\hat{C} \equiv 0$ ja $\bar{C} \equiv 0$ mistahes olekus. Siis on võrratus (11.6) triviaalne ja näitab lihtsalt, et kahe mittenegatiivse suuruse korrutis on mittenegatiivne. Mingit korrelatsiooni $\overline{(\Delta A)^2}$ ja $\overline{(\Delta B)^2}$ vahel ei eksisteeri.

Kui \hat{C} on mõnesugune mittekonstantne operaator, siis võivad eksisteerida olekud, kus $\bar{C} \neq 0$, s. t. üldiselt on suuruste A ja B ruutkeskmiste hälvete vahel olemas korrelatsioon, mis sõltub füüsikalise objekti olekust. Võib esineda ka olekuid, kus selline korrelatsioon puudub ($\bar{C} = 0$).

Kui $\hat{C} = \text{konst} \neq 0$, siis ka $\bar{C} = \text{konst} \neq 0$, kusjuures selle konstandi väärtus ei sõltu olekust. Sel juhul näitab seos (11.6), et suuruste A ja B ruutkeskmiste vahel kehtib teatud korrelatsioon kõikides võimalikes olekutes. $\overline{(\Delta A)^2}$ iseloomustab vahemikku, kuhu võivad langeda suuruse A ük-

silmõõtmiste tulemused olekus ψ . Seda vahemikku nim. A määramatuse vahemikuks. Analoogiliselt iseloomustab $(\Delta B)^2$ füüsikalise suuruse B määramatuse vahemikku. Olekus, mis on A omaolekuks, saame kõikidel üksikmõõtmistel sama väärtuse, mis langeb kokku arvuga \bar{A} . Seega A omaolekus $(\Delta A)^2 = 0$ ja me ütleme, et füüsikaline suurus A on täpselt määratud.

Kui $\bar{C} = \text{const} \neq 0$, siis võrratus (12.6) saab sel juhul kehtida vaid siis, kui A omaolekus $(\Delta B)^2 \rightarrow \infty$, mis väljendab tõsiasja, et suuruse B üksikväärtused võivad langeda lõpmata pikka vahemikku, s. t. suurus B on selles olekus täielikult määramata. Üldjuhul: mida väiksem on suuruse A määramatuse vahemik, seda suurem on suuruse B vastav vahemik ja vice versa.

Vaatleme koordinaate ja impulsse. Et samasuunalise koordinaadi ja impulsi vahel kehtib seos

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

siis valemi (11.6) põhjal

$$\sqrt{(\Delta p_x)^2 (\Delta x)^2} \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (11.7)$$

Valem (11.7) näitab, et kui mõõtmisel koordinaadi väärtused langevad vahemikku $\Delta x = |x - \bar{x}|$, siis võime impulsi väärtused leida vahemikus $\Delta p = |p_x - \bar{p}_x|$, kusjuures Δx ja Δp_x vahel on võrratusega (12.7) iseloomustatud korrelatsioon. Erijuhul, kui mingis olekus on impulss kindla väärtusega, siis kõik impulsi väärtused ühtivad tema keskväertusega ning $\overline{\Delta p} = 0$. Seose (11.7) põhjal $\overline{\Delta x}$ peab olema lõpmatu suur, et võrratus oleks täidetud.

(11.7)-ga analoogilised relatsioonid võime kirjutada impulssmomendi polaarteljesuunalise komponendi \hat{M}_z ja pöördenurga φ jaoks, kuna (10.13) põhjal (\hat{M}_z ja φ moodustavad kanoonilise paari):

$$[\hat{M}_z, \varphi] = -i\hbar, \quad (11.8)$$

ning energia ja aja jaoks, kuna

$$[\hat{H}, t] = -i\hbar, \quad (11.9)$$

kus \hat{H} on energiale vastav operaator ((11.9) järgneb valemist (13.3)).

Kui tähistame koordinaatide ja impulsside määramatuse vahemikud vastavalt $\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$, saame (11.7) põhjal suurusjärgulise hinnangu

$$\begin{aligned} \Delta p_x \Delta x &\approx \hbar, \\ \Delta p_y \Delta y &\approx \hbar, \\ \Delta p_z \Delta z &\approx \hbar. \end{aligned} \quad (11.10)$$

Täpselt samasuguse seose saame valemit (11.9) arvestades ka energia ja aja määramatuse vahemike jaoks:

$$\Delta E \Delta t \approx \hbar, \quad (11.11)$$

kus ΔE on efektiivne energiavahemik, millesse langevad mõõdetavad energiaväärtused, Δt - ajavahemik, mille vältel mõõtmisi teostatakse. Kuna Δt suurusjärg ei saa ületada süsteemi keskmist eluiga antud olekus, siis teades näit. aatomi keskmist eluiga ergutatud olekus, saame arvutada valemi (11.11) põhjal vastava energianivoo loomuliku laiuse.

12. Matemaatilise formalismi ja füüsikaliste hüpoteeside vastavus.

Resümeerime senised tulemused, seades igale matemaatilisele mõistele vastavusse füüsikalise sisu.

Matemaatika

Füüsika

1. Funktsioon ψ .

1. Mikroobjekti olek.

2. Funktsiooni $\psi(q)$ mooduli ruut $|\psi(q)|^2|_{q=q_0}$.

2. Tõenäosus (pideva q korral tõenäosuse tihedus), et antud olekus füüsikalise suuruse q mõõtmisel saame tulemuseks q_0 .

3. Olekufunktsiooni normeerimine

3. Tõenäosus leida mikroobjekti mistahes q väärtusega on üks (tõenäosuste summa võrdub ühega).

$$\int |\psi(q)|^2 dq = 1.$$

4. Olekufunktsioonil on lõpmatu norm

4. Suuruse q tõenäosuse jaotus on üldiselt rääkides nullist erinev lõpmatus määramispiirkonnas.

$$\int |\psi|^2 dq = \delta(0).$$

5. Lineaarne hermiitiline operaator \hat{L} .

5. Reaalne füüsikaline suurus L .

6. Operaatori omaväärtused e. karakteristlikud arvud λ .

6. Füüsikalise suuruse mõõdetavaid väärtused.

7. Operaatori \hat{L} omafunktsioon ψ_λ omaväärtusel λ .

7. Mikroobjekti olek, kus suuruse L mõõtmisel saame alati sama väärtuseks λ .

8. Operaatorite \hat{A} ja \hat{B} kommutatiivsus.

9. Integraal $\int \psi^* \hat{L} \psi dq$.

10. Olekufunktsioonide $\psi_\lambda(q)$ süsteemi täielikkus; s. t. mistahes $\varphi(q)$ võrdub:

(a) $\varphi(q) = \sum_\lambda a_\lambda \psi_\lambda(q)$,
kui λ väärtused moodustavad diskreetse jada.

(b) $\varphi(q) = \int a_\lambda \psi_\lambda(q) d\lambda$,
kui λ väärtused on pidevad.

11. Normeeritud funktsiooni $\varphi(q)$ arenduse kordajate moodulite ruudud $|a_\lambda|^2$, kus

(a) $\sum_\lambda |a_\lambda|^2 = 1$ diskreetse spektri korral,

(b) $\int |a_\lambda|^2 d\lambda = 1$ pideva spektri korral.

12. Olekufunktsioonide φ ja ψ ortogonaalsus
 $\int \varphi^* \psi dq = 0$.

8. Suurused A ja B on samaaegselt mõõdetavad, s. o. kindlate väärtustega samades füüsikalistes tingimustes.

9. Suuruse L keskvärtus olekus ψ .

10. Arenduses esinevad λ väärtused on ainuvõimalikud, s. t. mistahes olekus võib arvutada tõenäosuse jaotuse kõikide λ väärtuste jaoks.

11. Tõenäosus (juhul (b) tõenäosuse tihedus), et mõttes suurust L olekus φ saame väärtuseks λ . Tõenäosus mistahes λ väärtuse saamiseks on 1.

12. Olekud φ ja ψ on üksteist väljasulgevad.

13. Määramatuse relatsioonid. 13. Määramatuse printsiip.

$$\overline{(\Delta A)^2} \overline{(\Delta B)^2} \gg \frac{(\overline{C})^2}{4},$$

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

$$\Delta \hat{A} = \hat{A} - \bar{A}, \Delta \hat{B} = \hat{B} - \bar{B},$$

$\bar{C} \neq 0$ mistahes olekus.

Kui A on kindla väärtusega (A väärtuste vahemik $\rightarrow 0$), siis samades tingimustes on B täielikult määramata (B väärtuste vahemik $\rightarrow \infty$) ja ümberpöörduvalt.

II. LAINEVÖRRAND. LIIKUMISINTEGRAALID.

13. Lainevörrand.

Oletame, et superpositsiooniprintsiip kehtib mistahes ajahetkel. Siis kirjeldab olekufunktsiooni muutumist ajas mõnesugune lineaarne operaator \hat{L} , s. o.

$$d_t \psi = \hat{L} \psi dt; \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{L} \psi. \quad (13.1)$$

Üeldusel, et olekufunktsioon ψ annab maksimaalse informatsiooni mikroobjekti kohta ning et kehtib põhjuslik seos olekute vahel, peab funktsioon ψ mistahes hetkel olema määratud tema mõnesuguse algväärtusega. Seepärast võime nõuda, et operaator \hat{L} ei sisaldaks diferentseerimis- ega integree-

rimisoperatsioone aja suhtes. Aeg t võib sisalduda operaatoris \hat{L} ainult parameetrina.

Vaatame, missugune klassikalises mehhaanikast tuntud füüsikaline suurus vastab operaatorile \hat{L} . Selleks leiame seose (13.1) kvaasiklassikalise vaste.

Valides lainefunktsiooni kujul $\psi = e^{\frac{i}{\hbar} S}$ (vt. (9.7)), saame

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \psi, \quad (13.2)$$

s. t., piirjuhul vastab operaatorile \hat{L} avaldisega $\frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t}$ korrutamine. Teiselt poolt, klassikalises mehhaanikas

$-\frac{\partial S}{\partial t} = H$, kus H on Hamiltoni funktsioon. Seega võime operaatorit $-\frac{\hbar}{i} \hat{L}$ analoogia põhjal nimetada Hamiltoni operaatoriks e. hamiltoniaaniks ja tähistada sümboliga \hat{H} . Võrrandi (13.1) kirjutame

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi. \quad (13.3)$$

Võrrand (13.3) kannab lainevõrrandi e. Schrödingeri võrrandi nime ja on kvantmehhaanika nn. Schrödingeri esituse põhivõrrandiks.

Operaatori \hat{H} kuju sõltub konkreetsetest füüsikalistest tingimustest. Lihtsamatel juhtudel on ta hõlpsasti leitav, lähtudes vastavast klassikalise Hamiltoni funktsiooni avaldisest. Näitame, et operaator \hat{H} on hermiitiline. Läh-tume olekufunktsiooni normi jäävusest, milles väljendub mikroobjekti enda jäävus. Siis võime kirjutada

$$\frac{d}{dt} \int |\psi|^2 dq = \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi dq + \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dq = 0. \quad (13.4)$$

Seosest (13.3)

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi; \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \psi)^* \quad (13.3')$$

Asendades $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ ja $\frac{\partial \psi^*}{\partial t}$ vastavalt võrduses (13.4)

näeme, et

$$\int (\hat{H} \psi)^* \psi dq = \int \psi^* \hat{H} \psi dq, \quad \text{m.o.t.t.}$$

Olgu ψ väärtus mingil alghetkel $t=0$ ψ_0 , siis võime võrrandi (14.3) lahendi kirjutada

$$\psi(t) = \hat{S}(t) \psi_0, \quad (13.5)$$

kus $\hat{S}(t)$ on mõnesugune lineaarne operaator, mis rahuldab tingimust

$$\hat{S}(0) = 1. \quad (13.6)$$

Kaaskompleksne olekufunktsioon avaldub järgmiselt

$$\psi^*(t) = (\hat{S}(t) \psi_0)^*. \quad (13.7)$$

Olekufunktsiooni normi jäävuse tingimusest

$$\int \psi^*(t) \psi(t) dq = \int (\hat{S}(t) \psi_0)^* \hat{S}(t) \psi_0 dq = \\ = \int \psi_0^* \hat{S}^+(t) \hat{S}(t) \psi_0 dq = \int \psi_0^* \psi_0 dq$$

järeldame, et

$$\hat{S}^+(t) \hat{S}(t) = 1 \quad \text{ehk} \quad \hat{S}^+ = \hat{S}^{-1}, \quad (13.8)$$

kus \hat{S}^{-1} on operaatori \hat{S} pöördoperaator, s. o. $\hat{S}^{-1} \hat{S} = \hat{S} \hat{S}^{-1} = 1$.

Operaatorit, mis rahuldab tingimust (13.8), nim. unitaarseks.

14. Operaatori ajaline tuletis.

Mikroobjekti oleku muutumist ajas võime kirjeldada olekufunktsiooni ajalise sõltuvuse abil nagu eelmises paragrahvis. Teiselt poolt aga võime vaadelda ajaliselt muutuvatena mikroobjekti iseloomustavaid füüsikalisi suurusi, s. t. neile vastavaid operaatoreid.

Niisugust matemaatilist formalismi, kus ajaline sõltuvus kantakse üle operaatoreile, kuna olekufunktsiooni vaadeldakse konstantsena, nimetatakse Heisenbergi esituseks.

Vaatleme, kuidas operaator Heisenbergi esituses on seotud operaatoriga Schrödingeri esituses.

Olgu \hat{L} operaator, mis funktsiooni ψ teisendab funktsiooniks φ . Schrödingeri esituses võime kirjutada

$$\hat{L} \psi(t) = \varphi(t) \quad (14.1)$$

või (13.5) põhjal:

$$\hat{L} \hat{S}(t) \psi_0 = \hat{S}(t) \varphi_0. \quad (14.2)$$

Rakendame võrdusele (14.2) vasakult operaatorit $\hat{S}^+(t)$, siis seose (13.8) põhjal

$$\hat{S}^+(t) \hat{L} \hat{S}(t) \psi_0 = \varphi_0. \quad (14.3)$$

Kasutades tähistust

$$\hat{\mathcal{L}}(t) = \hat{S}^+(t) \hat{L} \hat{S}(t) \quad (14.4)$$

saame

$$\hat{\mathcal{L}}(t) \psi_0 = \varphi_0, \quad (14.5)$$

mis on samaväärne seosega $\psi(t)$ ja $\varphi(t)$ vahel.

Järelikult võime füüsikalist objekti kirjeldada olekufunktsiooniga $\psi(t)$ ja suurusele L vastava operaatoriga \hat{L} (Schrödingeri esitus) või olekufunktsiooniga ψ_0 ja operaatoriga $\hat{Q}(t)$ (Heisenbergi esitus). Unitaarne operaator $\hat{S}(t)$ seob kahte esitust järgmiselt:

$$\begin{aligned}\hat{Q}(t) &= \hat{S}^+(t) \hat{L} \hat{S}(t); \quad \psi_0 = \hat{S}^+ \psi(t), \\ \hat{L} &= \hat{S}(t) \hat{Q}(t) \hat{S}^+(t); \quad \psi(t) = \hat{S}(t) \psi_0.\end{aligned}\quad (14.6)$$

Vaatleme mõnesuguse suuruse L keskvärtust \bar{L} . Siis võime seoste (14.6) abil esitada \bar{L} emmal-kummal kujul:

$$\bar{L} = \int \psi^*(t) \hat{L} \psi(t) dq, \quad (14.7)$$

$$\bar{L} = \int \psi_0^* \hat{Q}(t) \psi_0 dq. \quad (14.7')$$

Lähtume valemist (14.7). Kui $\psi = \psi(t)$, siis ka üldiselt $\bar{L} = \bar{L}(t)$. Diferentseerime $\bar{L}(t)$ aja järgi:

$$\frac{d}{dt}(\bar{L}) = \int \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{L} \psi + \psi^* \hat{L} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \psi \right] dq. \quad (14.8)$$

Viimane liige esineb siis, kui \hat{L} sisaldab aega parameetri-na. Valemite (13.3') põhjal

$$\frac{d}{dt}(\bar{L}) = \frac{i}{\hbar} \int \left[(\hat{H}\psi)^* \hat{L} \psi - \psi^* \hat{L} \hat{H}\psi + \frac{\hbar}{i} \psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \psi \right] dq.$$

\hat{H} hermitilisuse tõttu

$$\int (\hat{H}\psi)^* \hat{L} \psi dq = \int \psi^* \hat{H} \hat{L} \psi dq$$

ning

$$\frac{d}{dt}(\bar{L}) = \frac{\partial \bar{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \bar{L}]. \quad (14.9)$$

Kuna Heisenbergi esituses olekufunktsioon ajast ei sõltu, järgneb seosest (14.7'), et vasaku poole ajalisele tule-

tisele võib paremas pooles vastata ainult operaatori $\hat{\mathcal{L}}$ asendumine mõnesuguse uue operaatoriga, mida tähistame $\hat{\mathcal{L}}'$.
Siis definiitsiooni kohaselt

$$\overline{\hat{\mathcal{L}}} = \frac{d}{dt} (\bar{\mathcal{L}}). \quad (14.10)$$

Avaldades valemi (14.9) põhjal $\frac{d}{dt} (\bar{\mathcal{L}})$ keskväärtuste kaudu, arvestades, et keskväärtus ei sõltu esitusest, ja pidades silmas ψ_0 suvalisust, saame

$$\hat{\mathcal{L}} = \frac{\partial \hat{\mathcal{L}}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{L}}]. \quad (14.11)$$

Valem (14.11) on Heisenbergi esituse põhivalem ja defineerib üldistatud "kiiruse" operaatori $\hat{\mathcal{L}}$. See on täiesti analoogiline klassikalise mehhaanika valemiga, mis seob üldistatud kiiruse Poissoni suluga.

Kui operaator $\hat{\mathcal{L}}, \hat{\mathcal{L}}'$ ei sõltu ajast vahetult, siis

$$\hat{\mathcal{L}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{L}}] \text{ või } \hat{\mathcal{L}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{L}}]. \quad (14.11')$$

Kui niisugune operaator kommuteerub Hamiltoni operaatoriga, on talle vastav "kiiruse" operaator identselt null.

Suurusi, mis ei sõltu vahetult ajast ja millele vastavad operaatorid kommuteeruvad Hamiltoni operaatoriga, nimetatakse klassikalise füüsika eeskujul liikumisintegraalideks.

Kui Hamiltoni operaatori kuju on teada, saab seose (14.11') abil kindlaks teha, missugused füüsikalised suurused on jäävad antud tingimustes. Näiteks kui $\hat{\mathcal{H}}$ ei sisalda aega parameetrina, vastab ta liikumisintegraalile, milleks on koguenergia.

Näitame nüüd, et kui Hamiltoni operaator on invariant-

ne mingisuguse teisenduse suhtes, siis sellele teisendusele vastav operaator (mis toimib olekufunktsioonide ruumis) kombineerub Hamiltoni operaatoriga ja kirjeldab järelkult liikumisintegraali. Seda teoreemi kasutame järgnevas paragrahvides impulsi ja impulssmomenti operaatorkuju leidmiseks koordinaatesituses.

Teisendagu Hamilton operaator \hat{H} mõnesuguse funktsiooni $\psi(q)$ funktsiooniks $\varphi(q)$, s. t.

$$\hat{H} \psi(q) = \varphi(q). \quad (14.12)$$

Teisendame olekufunktsioone. Omandagu $\psi(q)$ seejuures kuju $\psi'(q)$ ja funktsioon $\varphi(q)$ kuju $\varphi'(q)$. Siis on uued funktsioonid ψ' ja φ' omavahel seotud valemiga

$$\hat{H}' \psi'(q) = \varphi'(q), \quad (14.13)$$

kus operaator \hat{H}' ei tarvitse enam ühtida operaatoriga \hat{H} . Kui aga $\hat{H}' = \hat{H}$, siis ütleme, et operaator \hat{H} on invariantne vastava teisenduse suhtes.

Tähistame teisendust kirjeldava operaatori tähega \hat{T} . Siis \hat{T} mõiste kohaselt

$$\psi'(q) = \hat{T} \psi(q); \quad \varphi'(q) = \hat{T} \varphi(q). \quad (14.14)$$

Kui avaldised (15.14) paigutame seosesse (14.13), saame:

$$\hat{H}' \hat{T} \psi(q) = \hat{T} \varphi(q) = \hat{T} \hat{H} \psi(q)$$

või

$$\hat{H}' \hat{T} = \hat{T} \hat{H}. \quad (14.15)$$

Kui $\hat{H}' = \hat{H}$, siis

$$[\hat{H}, \hat{T}] = 0, \quad \text{m.o.t.t.} \quad (14.16)$$

15. Impulss.

Kasutades eelmise paragrahvi tulemusi, leiame impulssoperaatori kuju koordinaatesituses. Lähtume klassikalisest mehhaanikast tuntud faktist, et tungivaba osake või osake homogeenses väljas liigub konstantse impulsiga. Niisuguse osakese jaoks ei ole ühtegi eelistatud punkti ruumis. Ruumi, mille kõik punktid on samaväärsed, nimetatakse homogeenseks ruumiks. Homogeenses ruumis liikuva osakese Hamiltoni operaator \hat{H} ei või järelikult sõltuda sellest, missugune ruumpunkt on valitud koordinaatide alguseks. Teiste sõnadega: operaator \hat{H} peab olema invariantne nihketeisenduste suhtes:

$$\hat{H}' = \hat{H}, \text{ kui } \vec{r}' = \vec{r} + \delta \vec{a},$$

kus $\vec{r} = (x, y, z)$ ja $\delta \vec{a} = (\delta a_1, \delta a_2, \delta a_3)$ on nihkevektor.

Lõpmata väikeste nihete korral võime funktsiooni $\psi(\vec{r}')$ arendada Taylori ritta:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}') &\equiv \psi(\vec{r} + \delta \vec{a}) = \psi(\vec{r}) + \delta a_1 \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}) + \delta a_2 \frac{\partial}{\partial y} \psi(\vec{r}) + \\ &+ \delta a_3 \frac{\partial}{\partial z} \psi(\vec{r}) + \dots = \\ &= [1 + (\delta \vec{a} \cdot \nabla)] \psi(\vec{r}) + \dots \end{aligned} \quad (15.1)$$

Seega kirjeldab operaator $1 + (\delta \vec{a} \cdot \nabla)$ lõpmata väikest nihet. Eelmise punkti tulemuste põhjal kommuteerub see operaatoriga \hat{H} . Arvestades, et arv 1 ja nihkeparameetrid δa_1 , δa_2 , δa_3 kui suvalised konstandid kommuteeruvad mistahes operaatoriga, saame (vaadeldes järgemööda x-, y- ja z-telje suunalisi nihkeid) järgmised seosed:

$$[\hat{A}, \frac{\partial}{\partial x}] = 0, [\hat{A}, \frac{\partial}{\partial y}] = 0, [\hat{A}, \frac{\partial}{\partial z}] = 0. \quad (15.2)$$

Järelikult peavad operaatorid $\frac{\partial}{\partial x}$, $\frac{\partial}{\partial y}$, $\frac{\partial}{\partial z}$ kirjeldama füüsikalisi suursusi, mis antud tingimustel on liikumisintegraalideks. Niisugusteks suurusteks homogeenises ruumis aga on osakese impulsi kolm komponenti. Niisiis võime kirjutada, tähistades impulsi komponentide operaatoreid \hat{p}_x , \hat{p}_y , \hat{p}_z (vahel ka \hat{p}_1 , \hat{p}_2 , \hat{p}_3):

$$\hat{p}_x = \kappa \frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = \kappa \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = \kappa \frac{\partial}{\partial z} \text{ ehk } \hat{\vec{p}} = \kappa \nabla. \quad (15.3)$$

Konstandi κ , mis ilmselt peab olema mõju dimensiooniga, leiame tingimusest, et kvaasiklassikalisel piirjuhul taanduks operaator $\hat{\vec{p}}$ suuruseks, mille kohta kehtivad klassikalise mehhaanika valemid.

Kasutades kvaasiklassikalist olekufunktsiooni (vt. val. (9.7)), saame:

$$\hat{\vec{p}} \psi_{kl} = \kappa \nabla S \frac{i}{\hbar} = \kappa \frac{i}{\hbar} (\nabla S) \psi_{kl}, \quad (15.4)$$

kus S on klassikaline mõjufunktsioon. Kuid klassikalises mehhaanikas on S ja impulss \vec{p} seotud järgmise valemiga:

$$\vec{p} = \nabla S. \quad (15.5)$$

Võrreldes valemid (15.4) ja (15.5) näeme, et operaatorile $\hat{\vec{p}}$ vastab piirjuhul klassikaline impulss \vec{p} , kui konstant $\kappa = \frac{\hbar}{i}$. Seega saame impulssoperaatorile lõpliku kuju:

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \text{ või } \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla. \quad (15.6)$$

Valemitest (15.6) lähtudes on lihtne kontrollida kommutatsioonieskirju:

$$[\hat{p}_\kappa, \hat{x}_\ell] = \frac{\hbar}{i} \delta_{\kappa\ell}; [\hat{p}_\kappa, \hat{p}_\ell] = 0, \kappa, \ell = 1, 2, 3. \quad (15.7)$$

S. t. impulsi komponendid on kõik samaaegselt mõõdetavad.

Operaatorite korrutamise ja liitmise eeskirju kasutades veendume, et impulsi ruudule vastab Laplace'i operaator:

$$\hat{p}^2 \equiv \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = -\hbar^2 (\nabla \cdot \nabla) = -\hbar^2 \Delta. \quad (15.8)$$

Nii lihtne kuju (15.6) on impulsi komponentidel muidugi ainult Cartesiususe koordinaatides. Pidades silmas gradiendi moodustamist kõverjoonelistes koordinaatides, saame näiteks sfäärilistes koordinaatides:

$$\hat{p}_r = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r}, \quad \hat{p}_\vartheta = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta}; \quad \hat{p}_\varphi = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (15.9)$$

Siin tähistavad \hat{p}_r , \hat{p}_ϑ , \hat{p}_φ impulsi projektsioone vastavalt r -, ϑ - ja φ -joonele. Kuna kõverjoonelistes ortogonaalsetes koordinaatides defineeritakse vektori ∇ ruutvalemiga:

$$(\nabla \cdot \nabla) = \sum_{\kappa=1}^3 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi^\kappa} \left(\sqrt{g} g^{\kappa\kappa} \frac{\partial}{\partial \xi^\kappa} \right),$$

kus sfääriliste koordinaatide korral $\xi^1 = r$, $\xi^2 = \vartheta$, $\xi^3 = \varphi$,

$$\sqrt{g} = r^2 \sin \vartheta, \quad g^{11} = 1, \quad g^{22} = \frac{1}{r^2}, \quad g^{33} = \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta}$$

, saame \hat{p}^2 avaldiseks arusaadavalt jälle Laplace'i operaatori:

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2 (\nabla \cdot \nabla) = -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \right\}. \quad (15.10)$$

16. Impulssoperaatori omaväärtused ja
omafunktsioonid.

Et impulssoperaatori komponendid omavahel kommuteeruvad, on neil ühine täielik omafunktsioonide süsteem. Leiame selle ja veendume, et impulsi omaväärtuste spekter on pidev.

Lahendame omaväärtusprobleemi \hat{p}_x suhtes Cartesiusse koordinaatides. Valemi (15.6) põhjal

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi = p_x \psi, \quad (16.1)$$

millest

$$\psi = f(y, z) e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}, \quad (16.2)$$

kus f on meelevaldne funktsioon, p_x - omaväärtusparameeter.

Kui lahendit (16.2) vaatleme ainult funktsioonina argumentide x , näeme, et see on lõplik mistahes reaalse p_x väärtuse korral. Seega võivad impulssoperaatori omaväärtusteks olla mistahes reaalarvud, s. t. impulssoperaatori omaväärtuste spekter on pidev.

Kui kõikidest omafunktsioonidest valime välja \hat{p}_x , \hat{p}_y ja \hat{p}_z ühised omafunktsioonid, võime nad kirjutada kujul

$$\psi_p(\vec{r}) = C e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r})} \quad (16.3)$$

$\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$; C - normeerimiskonstant. Normeerimistingimus on (vt. (6.10)):

$$\int \psi_p^*(\vec{r}) \psi_{p'}(\vec{r}) (d\vec{r}) = \delta(\vec{p} - \vec{p}'). \quad (16.4)$$

Valemitest (16.3,4) saame asenduse $\vec{q} = \frac{\vec{r}'}{h}$ abil

$$\delta(\vec{p} - \vec{p}') = |C|^2 h^3 \int e^{i(\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{q}} (d\vec{q}). \quad (16.5)$$

Silmas pidades δ - funktsiooni definitsiooni:

$$\delta(\vec{p} - \vec{p}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{q}} (d\vec{q}), \quad (16.6)$$

leiame:

$$C = (2\pi h)^{-\frac{3}{2}}.$$

Seega impulsoperaatori normeeritud omafunktsioonid on

$$\psi_p(\vec{r}) = (2\pi h)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{i}{h}(\vec{p} \cdot \vec{r})}. \quad (16.7)$$

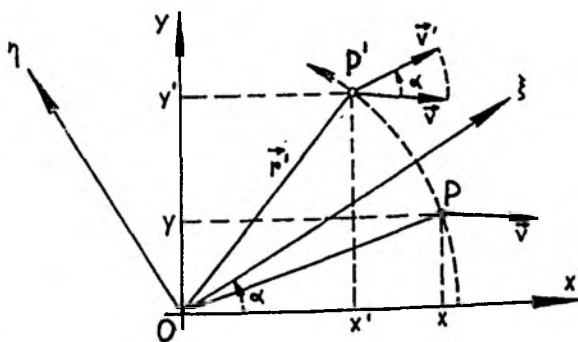
17. Impulssmoment.

Impulssmomenti operaatorkuju leidmiseks kasutame sama meetodikat nagu impulsi korralgi. Peame silmas, et osake liigub jääva impulssmomentiga, kui ta on vaba või kui talle mõjub tsentraalsümmeetriline väli. Viimasel juhul on küll kõik ruumi suunad samaväärsed, kuid mitte kõik punktid (tungi tsenter on eelistatud punkt). Ruumi, mille kõik suunad on samaväärsed, nimetatakse isotroopseks ruumiks. Järelikult võime ütelda, et osakese impulssmoment on liikumisintegraaliks, kui osake liigub isotroopses ruumis. Isotroopses ruumis ei saa osakese Hamiltoni operaator sõltuda sellest, kuidas on suunatud koordinaatide teljed, s. t. Hamiltoni operaator on sel juhul invariantne pöördeteisenduste suhtes. Täpselt samuti nagu §-s 15, võime siit järeldada, et teostades infinitesimaalseid pöörded ümber kolme sõltumatu tel-

Je ja eraldades välja konstantsed (suvalised) parameetrid, leiame kolm Hamiltoni operaatoriga kommuteeruvat operaatorit. Need kirjeldavad liikumisintegraale isotroopses ruumis ja on seega tõlgendatavad impulssmomendi vastavate projektsioonide operaatoritena. Kuna pöörete korral ümber erinevate telgede sõltub tulemus üksikute pöörete järjekorrast, siis on ilmne, et impulssmomendi komponentide operaatorid omavahel ei kommuteeru, nagu näitab ka otsene arvutus.

Leiame ruumi infinitesimaalsele pöördele vastava operaatori. Üldiselt sõltub selle kuju vaadeldava olekufunktsiooni geomeetristest omadustest (vastandina nihketelendusele, mille puhul kõik funktsioonid käituvad ühte moodi).

Vaatleme lihtsustuseks ruumi pööret xy -tasandil. Olgu vaadeldav punkt P , mis pärast ruumi pöörämist läheb asendisse P' (vt. joon. B).



Joon. B.

Punkt P' koordinaadid teljestikus $(O\xi\eta)$, mis pöörduis

koos ruumiga, on samad, mis olid punktil P teljestikus (Oxy) .

Kui iga ruumpunktiga P oleme sidunud funktsiooni $\psi(P)$, siis pöörde tagajärjel $\psi(P)$ teiseneb funktsiooniks $\psi'(P')$. Kui ψ on mitmekomponendiline funktsioon (näit. vektor), erineb $\psi'(P')$ funktsioonist $\psi(P)$ nii argumentide väärtustelt kui ka komponentide suurusliku vahekorra poolest. (Näiteks mõnesuguse konstantse vektori \vec{v} pööramisele nurga α võrra omandavad tema uued projektsioonid v'_x, v'_y järgmised väärtused:

$$v'_x = v_x \cos \alpha - v_y \sin \alpha; \quad v'_y = v_x \sin \alpha + v_y \cos \alpha.$$

Siin v_x, v_y on \vec{v} projektsioonid enne pööret.)

Tähistame (üldiselt mitmekomponendilist) funktsiooni, mis pärast pööret on seotud punktiga P' , $\psi'(P')$. Infinitesimaalse pöörde korral võime kirjutada:

$$\psi'(P') = \psi(P) + \delta\psi; \quad \delta\psi = \hat{V}\psi(P). \quad (17.1)$$

$\delta\psi$ kirjeldab funktsiooni ψ muutust, mille põhjustab nii ruumi orientatsiooni muutumine teljestiku (Oxy) suhtes kui ka ψ argumentide arvuliste väärtuste muutumine. \hat{V} on seda muutust iseloomustav operaator, mis on määratud ψ geometriliste omadustega ja sisaldab pöörde parameetreid (pöördenurki). Cartesiuse koordinaadistikus on \hat{V} ruumpunktist P sõltumatu operaator kõikide kvantmehaanikas kasutatavate lainefunktsioonide korral. §-s 38 näitame, et operaator \hat{V} määrab osakese (seal käsitletud näites elektroni) spini operaatori.

olegu $\psi'(P)$ funktsioon, mille erinevus funktsioonist $\psi(P)$ on tingitud ainult ruumi orientatsiooni muutumisest. Avaldugu $\psi'(P)$ $\psi(P)$ kaudu valemiga:

$$\psi'(P) = \psi(P) + \hat{\delta} \psi; \quad \hat{\delta} \psi = \hat{T} \psi(P). \quad (17.2)$$

Siin on \hat{T} infinitesimaalse pöörde operaator, mis kirjeldab funktsiooni ψ muutust argumendi sama arvulise väärtuse korral (\hat{T} sisaldab ka pöördeparameetreid).

Leiame operaatori \hat{T} eeldusel, et operaator \hat{V} on tuntud (olekufunktsiooni tüüp - skaalar, vektor, spinoor vm. - on antud). Selleks arendame funktsiooni $\psi'(P')$ Taylori ritta. Ruumi infinitesimaalsetel pööretel avalduvad punkti P' koordinaadid $\vec{n}' = (x'_1, x'_2, x'_3)$ punkti P koordinaatide $\vec{n} = (x_1, x_2, x_3)$ kaudu järgmiselt:

$$x'_i = x_i + \sum_{k=1}^3 \delta \omega_{ik} x_k \approx x_i + \delta \omega_{ik} x_k, \quad (17.3)$$

$(i, k = 1, 2, 3),$

kus $\delta \omega_{ik}$ on oma indeksites antisümmeetrilised infinitesimaalsed parameetrid:

$$\delta \omega_{ik} = -\delta \omega_{ki}. \quad (17.4)$$

(Näit. pöörde korral xy -tasandis nurga $\delta \alpha$ võrra ($\cos \alpha \approx 1$, $\sin \alpha \approx \delta \alpha$) võime kirjutada $\delta \omega_{12} = -\delta \omega_{21} = -\delta \alpha$, kuna ülejäänud parameetrid on nullid.)

Kasutades valemit (17.3) saame

$$\psi'(P') = \psi'(P) + \delta \omega_{ik} x_k \frac{\partial}{\partial x_i} \psi'(P) + \dots \quad (17.5)$$

Valemi (17.2) põhjal on funktsioonide $\psi'(P)$ ja $\psi(P)$ vahe esimest järku väike suurus $\hat{\delta} \psi$. Seetõttu võime valemi (17.5) parema poole liikmetes, mis on korrutatud para-

meetritega $\delta\omega_{ik}$, $\psi'(P)$ asendada funktsiooniga $\psi(P)$.
 Seega arvestades ainult esimest järku väikesi liikmeid (liikmeid, mis sisaldavad ülimalt $\delta\omega_{ik}$ esimesi astmeid), saame:

$$\psi'(P') = \psi'(P) + \delta\omega_{ik} x_k \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(P). \quad (17.6)$$

Avaldistest (17.1, 2, 6) leiame operaatori \hat{T}
 $\hat{T}\psi(P) = \psi'(P) - \psi(P) = \psi'(P') - \delta\omega_{ik} x_k \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(P) - \psi(P) = (\hat{V} - \delta\omega_{ik} x_k \frac{\partial}{\partial x_i}) \psi(P),$

s. t.

$$\hat{T} = \hat{V} - \delta\omega_{ik} x_k \frac{\partial}{\partial x_i}. \quad (17.7)$$

Valem (17.7) näitab, et üldjuhul koosneb operaator \hat{T} kahest erineva struktuuriga osast: ruumpunkti koordinaatidest sõltumatust osakese spiniga seostatavast osast \hat{V} ja operaatorist $-\delta\omega_{ik} x_k \frac{\partial}{\partial x_i}$. Viimane on sõltumatu olekufunktsiooni tüübist. Näitame, et see operaator on seotud klassikalisesest füüsikast tuntud, nn. orbitaalse impulssmomentiga. Selleks et uurida orbitaalse impulssmomenti omadusi, piirdume edaspidi skalaarsete olekufunktsioonide vahtlemisega. Skaalari mõiste kohaselt $\psi'(P') = \psi(P)$, s. t. $\hat{V} = 0$ ja $\hat{T} = -\delta\omega_{ik} x_k \frac{\partial}{\partial x_i}$.

\hat{H} invariantisusest pöördeteisenduste suhtes järgneb, et \hat{H} commuteerub operaatoriga \hat{T} , või skalaarse olekufunktsiooni korral operaatoriga $-\delta\omega_{ik} x_k \frac{\partial}{\partial x_i}$:

$$[-\delta\omega_{ik} x_k \frac{\partial}{\partial x_i}, \hat{H}] = 0. \quad (17.8)$$

Arvestades parameetrite $\delta\omega_{ik}$ suvalisust ja antisümmeetriat, $\delta\omega_{12} = -\delta\omega_{21}$; $\delta\omega_{23} = -\delta\omega_{32}$; $\delta\omega_{31} = -\delta\omega_{13}$, saa-

me 3 sõltumatut kommutatsiooniseost:

$$\begin{aligned} [x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1}, \hat{H}] &= 0, \\ [x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_2}, \hat{H}] &= 0, \\ [x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_3}, \hat{H}] &= 0, \end{aligned} \quad (17.9)$$

mis vastavad impulssmomendi \vec{M} kolme projektsiooni jäävusele. Kasutades gradiendi sümbolit ∇ , võime impulssmomendi operaatori \hat{M} esitada vektorkujus:

$$\hat{M} = \kappa [\vec{n} \times \nabla], \quad (17.10)$$

kus κ on konstantne kordaja. Selle leidmiseks võrdleme avaldist (17.10) klassikalise impulssmomendi avaldisega

$$\vec{M} = [\vec{n} \times \vec{p}]. \quad (17.11)$$

Kuna impulsile \vec{p} vastab operaator $\frac{\hbar}{i} \nabla$, siis (17.10, 11) võrdlemine annab: $\kappa = \frac{\hbar}{i}$.

Seega lõplikult:

$$\begin{aligned} \hat{M}_1 \equiv \hat{M}_x &= \frac{\hbar}{i} (y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}), \\ \hat{M}_2 \equiv \hat{M}_y &= \frac{\hbar}{i} (z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}), \\ \hat{M}_3 \equiv \hat{M}_z &= \frac{\hbar}{i} (x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}). \end{aligned} \quad (17.12)$$

Rõhutagem veel kord, et operaator \hat{M} kirjeldab osakese koguimpulssmomenti ainult skalaarse olekufunktsiooni korral, kui osakese spin on null. Nullist erineva spiniga osakeste puhul commuteerub hamiltoniaaniga \hat{H} operaator \hat{T} , mitte aga $-\delta\omega_{ik} x_k \frac{\partial}{\partial x_i}$; järelikult orbitaalne impulssmoment omaette ei ole jääv ei vaba osakese ega ka tsentraalsümmeetrilises väljas viibiva osakese puhul. (Orbitaalne moment ja

spin ei ole eraldi määratud olekutes, kus osakese energial on kindel väärtus.)

Valemite (17.12) abil saab kontrollida järgmiste kommutatsioonieskirjade kehtivust:

$$[\hat{M}_i, \hat{x}_k] = i\hbar \varepsilon_{ikl} \hat{x}_l, \quad (17.13)$$

$$[\hat{M}_i, \hat{p}_k] = i\hbar \varepsilon_{ikl} \hat{p}_l, \quad (17.14)$$

$$[\hat{M}_i, \hat{M}_k] = i\hbar \varepsilon_{ikl} \hat{M}_l. \quad (17.15)$$

Siin on ε_{ikl} oma indeksites täielikult antisümmeetrilise ühiktensori komponendid järgmiste väärtustega:

$$\varepsilon_{ikl} = \begin{cases} +1, & \text{kui } (i, k, l) = (1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2); \\ -1, & \text{kui } (i, k, l) = (2, 1, 3), (3, 2, 1), (1, 3, 2); \\ 0, & \text{kui vähemalt kaks indeksit on samad.} \end{cases}$$

Näeme, et impulsskomponendi kõik 3 komponenti ei ole samaaegselt mõõdetavad. Vahetuseskirjad (17.15) kehtivad ka spini korral.

Moodustame impulssmomendi ruudu operaatori

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2, \quad (17.16)$$

kus $\hat{M}_x^2 = \hat{M}_x \hat{M}_x$ jne.

Kasutades valemite (17.15) on lihtne veenduda, et

$$[\hat{M}^2, \hat{M}_i] = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (17.17)$$

Järelikult võime samaaegselt mõõta impulssmomendi ruutu ja tema ühte komponenti.

Üle minnes sfäärilistele koordinaatidele valemite

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi; \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi; \quad z = r \cos \vartheta$$

abil, võime impulssmomendi komponendid avaldada järgmiselt

(vt. ülesanne 4):

$$\hat{M}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (17.18)$$

$$\hat{M}_x \pm i \hat{M}_y = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \nu} + i \cot \nu \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (17.19)$$

Operaatori \hat{M}^2 leidmiseks sfäärilistes koordinaatides kasutame valemite

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_z^2 + (\hat{M}_x + i \hat{M}_y)(\hat{M}_x - i \hat{M}_y) - \hbar \hat{M}_z \quad (17.20a)$$

või

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_z^2 + (\hat{M}_x - i \hat{M}_y)(\hat{M}_x + i \hat{M}_y) + \hbar \hat{M}_z, \quad (17.20b)$$

mis vahetult järgnevad valemitest (17.16) ja (17.15).

Kasutades nüüd operaatorite korrutamise reeglit ja valemite (17.18, 19), saame

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \nu} \frac{\partial}{\partial \nu} \left(\sin \nu \frac{\partial}{\partial \nu} \right) + \frac{1}{\sin^2 \nu} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (17.21)$$

Tuues sisse Laplace'i operaatori nurgamuutujatest sõltuva osa sümboli:

$$\Delta_{(\nu, \varphi)} = \frac{1}{\sin \nu} \frac{\partial}{\partial \nu} \left(\sin \nu \frac{\partial}{\partial \nu} \right) + \frac{1}{\sin^2 \nu} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (17.22)$$

võime \hat{M}^2 avaldada lihtsalt:

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2 \Delta_{(\nu, \varphi)}. \quad (17.23)$$

Valemid (17.18) ja (17.23) on sobivad omaväärtusprobleemi lahendamisel impulssmomendi jaoks.

18. Impulssmomendi operaatori omaväärtused
ja omafunktsioonid.

Lahendame omaväärtuse ülesande impulssmomendi mõnesu-
guse komponendi ja impulssmomendi ruudu jaoks sfäärilistes
koordinaatides.

Valime polaartelje uuritava komponendi M_z suunalisena.
Tähistame \hat{M}_z omaväärtuse tähega μ .

Siis

$$\hat{M}_z \psi_\mu = \mu \psi_\mu, \quad (18.1)$$

või valemi (17.18) põhjal,

$$\frac{\partial \psi_\mu}{\partial \varphi} = \frac{i}{\hbar} \mu \psi_\mu, \quad (18.2)$$

millest

$$\psi_\mu = f(\vartheta, \varphi) e^{\frac{i}{\hbar} \mu \varphi}, \quad (18.3)$$

kus $f(\vartheta, \varphi)$ on meelevaldne.

Kui uurime ψ_μ sõltuvust muutujast φ , peame oma-
funktsiooni ühesuse põhjal nõudma, et

$$\psi_\mu(\varphi + 2\pi) = \psi_\mu(\varphi),$$

s. o.

$$e^{\frac{i}{\hbar} \mu \cdot 2\pi} = 1,$$

millest järgneb

$$\mu = \hbar m; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (18.4)$$

Järelikult avalduvad impulssmomendi komponendi väärtused
Plancki konstandi täisarvkorsetena, s. o. impulssmomendi
mistahes projektsiooni väärtuste spekter on diskreetne.

Arvutame impulssmomendi ruudu omaväärtused (vrd. ül.
152).

Arvestades, et

$$M^2 - M_z^2 = M_x^2 + M_y^2 \geq 0,$$

võime kirjutada järgmise võrratuse \hat{M}_z omaväärtuste μ ja \hat{M}^2 omaväärtuste λ vahel:

$$\lambda - \mu^2 \geq 0, \quad -\sqrt{\lambda} \leq \mu \leq \sqrt{\lambda}. \quad (18.5)$$

Valemite (17.15) põhjal

$$\hat{M}_z (\hat{M}_x \pm i \hat{M}_y) = (\hat{M}_x \pm i \hat{M}_y) (\hat{M}_z \pm \hbar). \quad (18.6)$$

Olgu ψ_μ mõnesugune \hat{M}_z omafunktsioon. Siis võime (18.4) ja (18.6) põhjal kirjutada

$$\hat{M}_z (\hat{M}_x \pm i \hat{M}_y) \psi_\mu = \hbar (m \pm 1) (\hat{M}_x \pm i \hat{M}_y) \psi_\mu. \quad (18.7)$$

Seega funktsioonid

$$\psi'_\mu = (\hat{M}_x \pm i \hat{M}_y) \psi_\mu$$

on samuti operaatori \hat{M}_z omafunktsioonideks omaväärtustel $\mu = \hbar (m \pm 1)$, s. t.

$$\begin{aligned} \psi_{m+1} &= \text{const} (\hat{M}_x + i \hat{M}_y) \psi_m, \\ \psi_{m-1} &= \text{const} (\hat{M}_x - i \hat{M}_y) \psi_m, \end{aligned} \quad (18.8)$$

kus

$$\psi_m = f(\rho, \vartheta) e^{im\varphi}. \quad (18.9)$$

Tähistame täisarvu m maksimaalse positiivse väärtuse tähega ℓ . Siis peavad kõik lainefunktsioonid, mis vastaksid suuremale indeksile, näiteks $\ell+1$ jne., võrduma nulliga, kuna vastavad olekud ei eksisteeri.

Seega

$$(\hat{M}_x + i \hat{M}_y) \psi_\ell = 0. \quad (18.10)$$

Rakendades võrdusele (18.10) vasakult operaatorit

$(\hat{M}_x - i\hat{M}_y)$ saame

$$(\hat{M}_x - i\hat{M}_y)(\hat{M}_x + i\hat{M}_y)\psi_\ell = (\hat{M}^2 - \hat{M}_z^2 - \hbar\hat{M}_z)\psi_\ell = 0. \quad (18.11)$$

Kuna \hat{M}^2 ja \hat{M}_z kommuteeruvad, on neil ühised omafunktsioonid. Seetõttu

$$\hat{M}^2\psi_\ell = \lambda\psi_\ell, \quad (18.12)$$

$$\hat{M}_z^2\psi_\ell = \hbar^2\ell^2\psi_\ell, \quad (18.13)$$

$$\hbar\hat{M}_z\psi_\ell = \hbar^2\ell\psi_\ell. \quad (18.14)$$

Paigutades tulemused (18.12 - 14) võrdusse (18.11) saame

$$\lambda = \hbar^2\ell(\ell+1). \quad (18.15)$$

Tuletuskäigust järgneb, et ℓ võib omada kõiki positiivseid täisarvulisi väärtusi, kaasa arvatud null, s. t. impulssmomendi ruudu omaväärtuste spekter on diskreetne.

Fikseeritud ℓ korral võib m olla $2\ell+1$ väärtusega, kuna (vt. ül. 152!)

$$-\ell \leq m \leq \ell. \quad (18.16)$$

Operaatori \hat{M}^2 omafunktsioonide leidmiseks märgime, et võrrandil

$$(\Delta_{(\omega, \varphi)} + \lambda)\psi(\omega, \varphi) \quad (18.17)$$

on ühene ja kõikjal lõplik lahend, kui $\lambda = \ell(\ell+1)$, $\ell = 0, 1, 2, \dots$, mis avaldub kerapinna funktsioonide kaudu, s. o.

$$\psi_{\ell, m}(\omega, \varphi) = Y_\ell^m(\omega, \varphi), \quad (18.18)$$

kus

$$y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi) = P_{\ell}^{|m|}(\cos\vartheta) e^{im\varphi}, \quad (18.19)$$

$$P_{\ell}^{|m|}(x) = (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} \frac{1}{2^{\ell} \ell!} \frac{d^{\ell}}{dx^{\ell}} (x^2-1)^{\ell}, \quad (18.20)$$

$$\int_{-1}^1 P_{\ell}^{|m|}(x) P_{\ell'}^{|m|}(x) dx = \delta_{\ell\ell'} \frac{2}{2\ell+1} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}. \quad (18.21)$$

Valemite (18.17 - 21) põhjal võime operaatori \hat{M}^2 normeeritud omafunktsioonid, mis vastavad omaväärtusele $\hbar^2 \ell(\ell+1)$, esitada Legendre'i kaaspolünoomide kaudu järgmiselt:

$$\psi_{\ell, m}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_{\ell}^{|m|}(\cos\vartheta) e^{im\varphi}. \quad (18.22)$$

Kuna igale ℓ -väärtusele vastab $2\ell+1$ m -väärtust, siis igale \hat{M}^2 omaväärtusele vastab $2\ell+1$ omafunktsiooni.

19. Impulssmomentide liitmine.

Koosnega mikroobjekt kahest osast, millevahelise vastastikuse mõju võime arvestamata jätta. Kummagi osa impulssmomentid \vec{M}_1 ja \vec{M}_2 on siis üksteisest sõltumatud.

Kahest sõltumatust osast koosneva objekti olekufunktsioon võrdub üksikuid osi kirjeldavate olekufunktsioonide korrutisega, s. o.

$$\psi(q_1, q_2) = \psi_1(q_1) \psi_2(q_2), \quad (19.1)$$

kus q_1 , q_2 on muutujad, mis iseloomustavad vastavaid alasüsteeme.

Viibigu mikroobjekt olekus, kus $M_1^2 - 1$ ja $M_2^2 - 1$ on kindlad väärtused, mida iseloomustavad kvantarvud ℓ_1 ja ℓ_2 .

See olek on ühtlasi M_{1z} ja M_{2z} omaolekuks (omaväärtustele vastavad kvantarvud m_1, m_2). Üldeu põhjal kirjeldavad niisuguseid olekuid funktsioonid

$$W_{l_1 l_2}^{m_1 m_2}(q_1, q_2) = \psi_{l_1 m_1}(q_1) \psi_{l_2 m_2}(q_2), \quad (19.2)$$

kus

$$m_1 = -l_1, -l_1+1, \dots, l_1; \quad m_2 = -l_2, -l_2+1, \dots, l_2.$$

Defineerime summaarse impulssmomendi operaatori \hat{M} valemiga

$$\hat{M} = \hat{M}_1 + \hat{M}_2, \quad (19.3)$$

s. t.

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_1^2 + \hat{M}_2^2 + 2\hat{M}_1 \hat{M}_2 \quad (19.4)$$

ja

$$\hat{M}_z = \hat{M}_{1z} + \hat{M}_{2z}. \quad (19.5)$$

Arvestades operaatori \hat{M}_1 kõikide komponentide kommuteeruvust operaatori \hat{M}_2 kõikide komponentidega (alasüsteemide 1 ja 2 vahel interaktsioon puudub), on lihtne veenduda, et ka summaarse momendi operaator \hat{M} rahuldab kommutatsioonieskirju (17.15, 17). Sellest järgneb, et \hat{M}^2 omaväärtusi iseloomustab kvantarv l ($l = 0, 1, 2, \dots$) ja \hat{M}_z omaväärtusi vastavalt kvantarv m , kus $-l \leq m \leq l$ fikseeritud l korral.

Valemite (19.4, 5) abil saab vahetult arvutada, et

$$[\hat{M}^2, \hat{M}_i^2] = 0, [\hat{M}_z, \hat{M}_i^2] = 0, [\hat{M}_z, \hat{M}_{i_z}] = 0, \quad (19.6)$$

$$\text{kuid } [\hat{M}^2, \hat{M}_{i_z}] \neq 0, \quad (i=1, 2). \quad (19.7)$$

Seostest (19.6, 7) järeldame, et kvantarvudega l_1, l_2 määratud olek on ka operaatorite \hat{M}^2 ja \hat{M}_z omaole-

kuks. Kuid funktsioonidega (19.2) iseloomustatud olekud (m_1 ja m_2 ka fikseeritud) on ainult operaatori \hat{M}_z , mitte aga \hat{M}^2 omaolekuteks.

Kvantarvu m väärtuse nendes olekutes saame vahetult arvutada:

$$\hat{M}_z \psi_{l_1 m_1}(q_1) \psi_{l_2 m_2}(q_2) = \hat{M}_{1z} \psi_{l_1 m_1}(q_1) \psi_{l_2 m_2}(q_2) + \psi_{l_1 m_1}(q_1) \hat{M}_{2z} \psi_{l_2 m_2}(q_2) = \hbar(m_1 + m_2) \psi_{l_1 m_1}(q_1) \psi_{l_2 m_2}(q_2),$$

millest

$$m = m_1 + m_2. \quad (19.8)$$

Leiame \hat{M}^2 võimalikud omaolekud (l võimalikud väärtused), mis vastavad fikseeritud kvantarvudele l_1 ja l_2 ja mis on ühtlasi \hat{M}^2 ja \hat{M}_z ühisteks omaolekuteks.

Kuna mistahes (19.2) tüüpi funktsioonide lineaarkombinatsioon, kus on summeeritud üle m_1 ja m_2 , on \hat{M}_1^2 ja \hat{M}_2^2 omafunktsioon omaväärtustel l_1 ja l_2 , siis peame moodustama niisugused lineaarkombinatsioonid, mis vastavad kindlale m ja l väärtusele. Niisuguseid sõltumatuid kombinatsioone saame $(2l_1+1)(2l_2+1)$ (sõltumatute omafunktsioonide arv fikseeritud l_1, l_2 korral) ja neil on kuju:

$$\phi_{l_1 l_2}^{lm}(q_1, q_2) = \sum_{\substack{m_1 = -l_1 \\ m_2 = -l_2 \\ m_1 + m_2 = m}}^{m_1 = l_1} \delta_{m_1 + m_2, m} C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{lm} \psi_{l_1 m_1}(q_1) \psi_{l_2 m_2}(q_2). \quad (19.9)$$

Normeeritud $\phi_{l_1 l_2}^{lm}, \psi_{l_1 m_1}, \psi_{l_2 m_2}$ korral nimetatakse arenduse (19.9) kordajaid $C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{lm}$ Clebsch-Gordani koefitsientideks ja neid on võimalik arvutada täiesti üldisel kujul, s. t. kasutades ainult impulssmomendi operaatori omadusi (ka seoseid (18.8)),

spetsialiseerimata olekufunktsioone (Г.Я.Любарский, Теория групп и ее применение в физике, М. 1957, lk. 203 - 208).

Leiame võimalikud l väärtused. Selleks rühmitame arenduses (19.9) esinevad funktsioonid nii, et iga rühm vastab kindlale m väärtusele (lihtsustuseks jätame indeksid l_1, l_2 kirjutamata). Olgu konkreetseuse mõttes $l_1 \leq l_2$. Kui piirdume m positiivsete väärtustega, saame tabeli:

m väärtused	sõltumatud funktsioonid	m -le vastav sõltumatute funktsioonide (üldiselt vastavate $\psi_{m_1}\psi_{m_2}$ kombinatsioonide) arv $N(m)$:
$m = m_1 + m_2$:	$\psi_{m_1} \psi_{m_2}, (-l_1 \leq m_1 \leq l_1, -l_2 \leq m_2 \leq l_2)$:	
$l_1 + l_2$	$\psi_{l_1} \psi_{l_2}$	1
$l_1 + l_2 - 1$	$\psi_{l_1-1} \psi_{l_2}, \psi_{l_1} \psi_{l_2-1}$	2
$l_1 + l_2 - 2$	$\psi_{l_1-2} \psi_{l_2}, \psi_{l_1-1} \psi_{l_2-1}, \psi_{l_1} \psi_{l_2-2}$	3
$l_2 - l_1$	$\psi_{-l_1} \psi_{l_2}, \psi_{-l_1+1} \psi_{l_2-1}, \dots, \psi_{l_1} \psi_{l_2-2l_1}$	$2l_1 + 1$
$l_2 - l_1 - 1$	$\psi_{-l_1} \psi_{l_2-1}, \psi_{-l_1+1} \psi_{l_2-2}, \dots, \psi_{l_1} \psi_{l_2-2l_1-1}$	$2l_1 + 1$
0	$\psi_{-l_1} \psi_{l_2-k}, \psi_{-l_1+1} \psi_{l_2-k-1}, \dots, \psi_{l_1} \psi_{l_2-2l_1-k}$ ($k = l_2 - l_1$)	$2l_1 + 1$

Näeme, et $N(m)$ sõltub m väärtustest järgmiselt:

$$N(m) = \begin{cases} l_1 + l_2 + 1 - m, & \text{kui } l_2 - l_1 \leq m \leq l_2 + l_1, \\ 2l_1 + 1, & \text{kui } 0 \leq m \leq l_2 - l_1. \end{cases} \quad (19.10)$$

Peame meeles, et $l \geq |m|$, või antud juhul (piirdusime väärtustega $m = |m|$) lihtsalt $l \geq m$. Teiselt poolt: kui l on fikseeritud, siis igale l, m paarile võib vastata üksainus sõltumatu omafunktsioon. Järelikult, kui $N(m) > 1$, siis see väljendab tõsiasja, et antud m -le vastab mitu l

väärtust, kusjuures võimalikkude, võrratust $l \geq m$ rahuldavate väärtuste hulk on $N(m)$. Piltlikult öeldes: ühe ja sama projektsiooni (määratud kvantarvuga m) võivad anda mitmesuguste pikkustega (määratud kvantarvuga l) vektorid, olenevalt orientatsioonist. Niisuguste vektorite arv ongi $N(m)$.

Analoogiliselt annab $N(m+1)$ vektorite arvu, mille puhul $l \geq m+1$. Järelikult $N(m) - N(m+1)$ annab vektorite arvu, mille puhul $l = m$.

Valemi (20.10) kohaselt

$$N(m) - N(m+1) = \begin{cases} 1, & \text{kui } l_2 - l_1 \leq m \leq l_2 + l_1, \\ 0, & \text{muude väärtuste puhul.} \end{cases} \quad (19.11)$$

Valem (19.11) näitab, et fikseeritud l_1 ja l_2 korral võib l omada kõiki täisarvulisi väärtusi vahemikus $l_2 - l_1 \leq l \leq l_2 + l_1$, ja ainult neid (võrdsed m väärtustega, kus $N(m) - N(m+1) \neq 0$).

Siin oli eeldatud, et $l_1 \leq l_2$. Kui sellest kitsendusest loobume, saame üldiselt:

$$l = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, |l_1 - l_2|. \quad (19.12)$$

Valemit (19.12) saab näitlikustada vektormudeli abil. Kui impulssmomentidele seame vastavusse vektorid pikkustega l_1 ja l_2 , siis vektorite liitmisel võib resultandi pikkus olla vahemikus $|l_1 - l_2|$ kuni $l_1 + l_2$. Kooskõlas impulssmomentide projektsiooni kvantiseeritusega ei või impulssmomentivektoritel olla suvalisi orientatsioone, mistõttu ka resultandi pikkus on kvantiseeritud.

20. Paarsus.

Suletud süsteemi või tsentraalsümmeetrilises väljas viibiva süsteemi hamiltoniaan on invariantne koordinaattelgede peegelduse e. inversiooni suhtes.

Vastaku inversioonile operaator \hat{P} , s. t.

$$\hat{P}\psi(\vec{\pi}) = \psi(-\vec{\pi}). \quad (20.1)$$

Kuna

$$\hat{P}^2\psi(\vec{\pi}) = \hat{P}\psi(-\vec{\pi}) = \psi(\vec{\pi}), \quad (20.2)$$

siis \hat{P}^2 omaväärtuseks on 1 ja operaatori \hat{P} omaväärtusteks vastavalt ± 1 .

Hamiltoniaani invariantisusest peegelduste suhtes järgneb

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0, \quad (20.3)$$

s. t. operaatorile \hat{P} vastab antud tingimustel mõnesugune jääv suurus. Nimetame suurust, mille jäävus järgneb hamiltoniaani invariantisusest peegeldusteisenduste suhtes, paarsuseks.

Paarsuse jäävuse korral võime mikroobjekti olekud liigitada paarisolekuiks, millele vastab \hat{P} omaväärtus $+1$, s. t. vastav olekufunktsioon ei muuda märki peegeldusteisenduste korral, ja paarituteks, kui olekufunktsioon muudab märki peegeldusteisenduste korral, s. t. talle vastab \hat{P} omaväärtus -1 .

Kuna impulssmomendi operaator commuteerub inversiooni operaatoriga, jagunevad ka impulssmomendi omaolekud paaris ja paarituteks.

Peegeldusteisendus sfäärilistes koordinaatides avaldub kujul

$$\pi \rightarrow \pi, \vartheta \rightarrow \pi - \vartheta, \varphi \rightarrow \varphi + \pi. \quad (20.4)$$

Teisenduse (20.4) korral

$$e^{im\varphi} \rightarrow (-1)^m e^{im\varphi};$$

$$P_l^{(m)}(\cos\vartheta) \rightarrow P_l^{(m)}(-\cos\vartheta) = (-1)^{l-m} P_l^{(m)}(\cos\vartheta),$$

mistõttu

$$Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) \rightarrow (-1)^l Y_{l,m}(\vartheta, \varphi). \quad (20.5)$$

Valem (20.5) näitab, et impulssmomenti omaolekute paarsus on määratud kvantarvu l väärtustega. Üksikutest nõrgalt seotud osakestest koosneva süsteemi olekufunktsiooni võime kirjutada kujul

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) \dots \psi_n(\vec{r}_n),$$

kui jätame vastastikuse mõju arvestamata. Siis avaldub kogu süsteemi paarsus üksikute paarsuste korrutisena:

$$P = P_1 \cdot P_2 \cdot \dots \cdot P_n. \quad (20.6)$$

Kui süsteem tervikuna on vaba või viibib välises tsentraalsümmeetrilises väljas, võime olekuid iseloomustada osakeste impulssmomentide kvantarvudega l . Sel korral

$$P = (-1)^{l_1 + l_2 + \dots + l_n} \quad (20.7)$$

Paarsuse jäävuse seadus, millel ei ole klassikalist vastet, võib näiteks keelata teatud üleminekud süsteemi olekute vahel, mis energeetiliselt oleksid võimalikud.

III. STATIONAARSED OLEKUD.

21. Stationaarse oleku mõiste.

Kui Schrödingeri võrrandis

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad (21.1)$$

operaator \hat{H} ei sisalda aega t , võime funktsioonis $\psi(q, t)$ muutujad eraldada:

$$\psi(q, t) = \varphi(q) f(t). \quad (21.2)$$

Kui tähistame muutujate eraldamise konstanti tähoga E , saame

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{df}{dt} = E f, \quad (21.3)$$

$$\hat{H} \varphi(q) = E \varphi(q). \quad (21.4)$$

\hat{H} hermiitilisuse tõttu peab konstant E võrrandis (21.4) olema reaalne. Kuna ajast sõltumatu \hat{H} on koguennergia operaator, on (21.4) energia omaväärtusprobleemi võrrand ja parameetri E võimalikud väärtused annavad süsteemi (osakese) energiaspektri. Olgu võrrandil (21.4) lahend $\varphi_{\kappa}(q)$ parameetri E mõnesuguse väärtuse $E = E_{\kappa}$ korral, s. t.

$$\hat{H} \varphi_{\kappa} = E_{\kappa} \varphi_{\kappa}. \quad (21.5)$$

Võrrandist (21.3) saame vastavalt

$$f_{\kappa}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\kappa} t}. \quad (21.6)$$

Järelikult on ajast sõltumatu \hat{H} korral Schrödingeri võrrandi (21.1) erilahendid avaldatavad kujul:

$$\psi_{st}^{(\kappa)}(q, t) = \varphi_{\kappa}(q) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\kappa} t}. \quad (21.7)$$

Olekuid, millele vastavad funktsioonid on esitatavad valemiga (21.6) (ajaline sõltuvus puhtperioodilise kompleksse funktsiooni kujul), nimetatakse statsionaarseteks olekuteks. Statsionaarsetes olekutes ei sõltu tõenäosuse jaotus ajast, kuna

$$|\psi_{st}^{(\kappa)}(q, t)|^2 = |\varphi(q)|^2. \quad (21.8)$$

Statsionaarsed olekud on energia omaolekud, kuna

$$\hat{H} \psi_{st}^{(\kappa)} = E_{\kappa} \psi_{st}^{(\kappa)}.$$

Schrödingeri võrrandi (22.1) mistahes lahendi (ajast sõltumatu \hat{H} korral) võime esitada statsionaarsete olekufunktsioonide superpositsioonina

$$\psi(q, t) = \sum_{\kappa} a_{\kappa} \varphi_{\kappa}(q) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\kappa} t}. \quad (21.9)$$

Konstantsed arenduse kordajad a_{κ} arvutatakse algtingimusest. Olgu algtingimuseks $\psi(q, t=0) = \psi_0(q)$ (ist amsud!). Siis

$$\psi_0(q) = \sum_{\kappa} a_{\kappa} \varphi_{\kappa}(q). \quad (21.10)$$

Kui korrutame avaldise (21.10) mõlemad pooli funktsiooniga

φ_i^* ja integreerime, arvestades ON-tingimusi

$$\int \varphi_i^* \varphi_{\kappa} dq = \delta_{i\kappa},$$

saame

$$a_{\kappa} = \int \varphi_{\kappa}^*(q) \psi_0(q) dq. \quad (21.11)$$

22. Mitterrelativistlik Schrödingeri võrrand.

Mitterrelativistliku Schrödingeri võrrandi mikropartikli jaoks saame, kui võrrandis (13.3) seame operaatori \hat{H} vastavusse mitterrelativistlikule Hamiltoni funktsioonile

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}, t), \quad (22.1)$$

kus p^2 on osakese impulsi ruut, m - osakese mass, $U(\vec{r}, t)$ - potentsiaalne energia.

Üleminek funktsioonilt H operaatorile \hat{H} koordinaatsituses toimub impulsi ruudu asendamisega vastavalt valemile (15.8). Siis kujuneb mitterrelativistlik Schrödingeri võrrand

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}, t) \right] \psi. \quad (22.2)$$

Mitmeast osakesest koosneva süsteemi korral

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^n \left(-\frac{\hbar^2 \Delta_k}{2m_k} \right) + U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n, t). \quad (22.3)$$

Juhul, kui U ei sõltu ajast, taandub võrrandi (22.2) lahendamine kooskõlas eelmise punkti tulemustega energia omaväärtusprobleemi võrrandi

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + E - U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = 0 \quad (22.4)$$

lahendamisele.

Schrödingeri võrrandi (22.4) lahendid peavad rahuldama järgmisi tingimusi:

1) ψ peab olema kõikjal ühene ning pidev koos pidevate I järku osatuletistega. Osatuletistel võib olla lõplike hüpe piirkonna äärel, kus $U \rightarrow \infty$.

2) Kui U on lõplik, peab ka ψ olema kõikjal lõplik. Kui $U \rightarrow \infty$ mingil pinnal S , siis osake selle pinnaga S piiratud ruumi tungida ei saa. ψ pidevuse tõttu peab ta pinnal S muutuma nulliks. Kui $U \rightarrow \infty$ mõnes üksikus punktis, võib funktsioonil ψ olla seal iseärane punkt, kusjuures peab olema rahuldatud tõesõosuse lõplikkuse tingimus, s. t.

$$\int_{\delta V} |\psi|^2 dV = \begin{cases} \text{lõplik, kui } \delta N \text{ on lõplik,} \\ \rightarrow 0, \text{ kui } \delta N \rightarrow 0, \end{cases} \quad (22.5)$$

kus δV on ruumala, mis sisaldab iseärase punkti. Kui iseärase punkti ümbritseme kerapinnaga raadiusega r , võime tingimusele (22.5) anda sobivama kuju

$$|\psi|^2 r^3 \rightarrow 0, \text{ kui } r \rightarrow 0. \quad (22.6)$$

Olgu ψ_1 ja ψ_2 energia omafunktsioonid, mis vastavad omaväärtustele E_1 ja E_2 , resp. Kui $E_1 \neq E_2$, peab olema rahuldatud ψ_1 ja ψ_2 ortogonaalsusetingimus:

$$\int \psi_1^* \psi_2 dV = 0 \quad \text{või lõpliku ruumala korral vähemalt lõplik.}$$

Valemist (22.4) saame

$$(E_2 - E_1) \int \psi_1^* \psi_2 dV = \int \text{div} [\psi_1^* \nabla \psi_2 - \nabla \psi_1^* \psi_2] dV. \quad (22.7)$$

Siin oleme kasutanud valemit

$$\psi_1^* \Delta \psi_2 - \Delta \psi_1^* \cdot \psi_2 = \text{div} (\psi_1^* \nabla \psi_2 - \nabla \psi_1^* \psi_2). \quad (22.8)$$

Gaussi lause põhjal võime (22.7) parema poole teisendada pindintegraaliks, mis lõpliku integreerimisruumala korral peab jääma lõplikuks, s. t.

$$\oint (\psi_1^* \nabla \psi_2 - \nabla \psi_1^* \cdot \psi_2) d\vec{S} = \text{lõplik}. \quad (22.9)$$

Kui iseärase punkti ümbritseme kerapinnaga, siis

$$\nabla\psi \cdot d\vec{S} = \frac{\partial\psi}{\partial r} r^2 \sin\theta d\theta d\varphi$$

ning saame piirjuhul tingimuse

$$\left(\psi_1^* \frac{\partial\psi_2}{\partial r} - \frac{\partial\psi_1^*}{\partial r} \psi_2\right) r^2 \rightarrow 0, \quad r \rightarrow 0. \quad (22.10)$$

Seega peab iseärase punkti ümbruses olekufunktsioon ψ rahuldama regulaarsusetingimuseid (22.6 ja 10).

Vaatleme osakese energiaspektrit. Kuna energia keskväär-
tus on kineetilise ja potentsiaalse energia keskväärtuste sum-
ma,

$$\bar{E} = \bar{E}_{kin} + \bar{U}, \quad (22.11)$$

$$\bar{U} \geq U_{min}, \quad \bar{E}_{kin} \geq 0,$$

siis $\bar{E} \geq U_{min}$ igas olekus. Järelikult rahuldavad ka energia
omaväärtused võrratust

$$E_n \geq U_{min}. \quad (22.12)$$

Kui $U_{\infty} = 0$, siis võivad energia negatiivsed väärtu-
sed moodustada ainult diskreetse spektri. Tõepoolest, pide-
va spektri korral $|\psi|^2$ ei saa lõpmatuses nulliks, osake
viibib lõpmata kauges piirkonnas lõpliku tõenäosusega. Kuna
aga $\bar{E}_{kin} \geq 0$, $U_{\infty} = 0$, peab olema ka $E \geq 0$, mis on
vastuolus esialgse oletusega. Järelikult peab osakese liiku-
mine olema finiidne, s. t. toimuma lõplikus piirkonnas.

* Pideva spektri korral on ψ norm lõpmatu, nagu näi-
tasime §-s 6. See on aga võimalik vaid siis, kui $|\psi(\vec{r})|^2 \neq 0$,
kui $r \rightarrow \infty$.

Kui $U > 0$, siis on energia omaväärtused positiivsed. Kui lisaks veel $U_{\infty} = 0$, siis $E > 0$ spekter on ainult pidev ning osakese liikumine on infiniitne.

Omaväärtusprobleemi võrrandit

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (22.13)$$

saab tuletada variatsiooniprintsiibist

$$\delta \int \psi^* \hat{H} \psi dV = 0$$

lisatingimusega

$$\int |\psi|^2 dV = 1.$$

Tuues sisse Lagrange'i kordaja E , saame lisatingimusega variatsiooniuülesande

$$\delta \int \psi^* [\hat{H} - E] \psi dV = 0,$$

millele vastabki võrrand (22.13). Variatsioonintegraali miinimumile vastab minimaalne Lagrange'i kordaja E väärtus E_0 . Variatsiooniarvutuse teoreemi kohaselt ei ole absoluutsele miinimumile vastaval funktsioonil ψ_0 sõlmpunkte. Siit järgneb, et energia põhiniivoole vastab alati ainult üks olekufunktsioon, s. t. põhiniivoo on alati kõdumata. Tõestada saame vastuväiteliselt. Kui oletaksime näiteks, et põhiniivoole vastab 2 sõltumatut olekufunktsiooni ψ_0' ja ψ_0'' , saame nende lineaarkombinatsioonist alati uue olekufunktsiooni

$$\psi_0 = C_1 \psi_0' + C_2 \psi_0'' ,$$

kus C_1 ja C_2 on meelevaldsed konstandid. C_1 ja C_2 võiksime aga alati nii valida, et funktsioonil ψ_0 oleks nullpunkte. Sellega olemegi sattunud vastuolule.

23. Vooluvektor. Pidevuse võrrand.

Integraal $\int |\psi|^2 dV$ üle lõpliku ruumi V annab tõe-
näosuse osakese leidmiseks selles ruumis. Arvutame selle
tõenäosuse muutumise ajas.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV = \int_V \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* \right) dV.$$

Võrrandi (23.3) põhjal

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV = - \frac{i\hbar}{2m} \int_V (\Delta \psi^* \psi - \psi^* \Delta \psi) dV$$

või kasutades valemit (22.8), saame

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV = - \int_V \operatorname{div} \vec{j} dV, \quad (23.1)$$

kus

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi). \quad (23.2)$$

Võrrandi (23.1), mis kehtib meelevaldse ruumala kor-
ral, võime üles kirjutada pidevuse võrrandi kujul

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0, \quad (23.3)$$

kus $\rho = |\psi|^2$ on tõenäosuse tihedus ja \vec{j} võime tõlgen-
dada tõenäosuse voo vektorina.

Kui seose (23.1) parema poole teisendame pindintegraa-
liks, saame

$$\frac{d}{dt} \int_V |\psi|^2 dV = - \oint_S \vec{j} \cdot d\vec{S}. \quad (23.4)$$

Seos (23.4) kirjeldab tõenäosuse jäävuse seadust, kusjuures
võrduse parem pool annab tõenäosuse selleks, et osake aja-
ühikus läbib pinna S .

Kui $|\psi|^2$ korrutame osakese laenguga e , saame laengu

tiheduse

$$\rho_e = e |\psi|^2 \quad (23.5)$$

ning vastavalt

$$\vec{j}_e = e \vec{j} \quad (23.6)$$

annab voolu tiheduse.

Korrutades $|\psi|^2$ osakese massiga, saame massi tiheduse

$$\rho_m = m |\psi|^2 \quad (23.7)$$

ning vastavalt massi voo tiheduse

$$\vec{j}_m = m \vec{j} \quad (23.8)$$

Siis väljendavad seosed (23.3, 4) vastavalt laengu ja massi jäävust.

Saab näidata, et operaatorite keskväärtused alluvad samadele seostele nagu vastavad klassikalise mehhaanika suurused (Ehrenfesti teoreem).

Kuna klassikalise mehhaanika kõik suurused on põhimõtteliselt avaldatavad koordinaatide ja impulsside kaudu, võib piirduda liikumisvõrrandite tuletamisega koordinaadi \vec{r} ja impulsi \vec{p} keskväärtuste jaoks.

Tõestuseks tuleb kaks korda rakendada valemit (14.11'), võttes Hamiltoni operaatori valemist (22.2).

$$\overline{\dot{\vec{r}}} = \frac{d}{dt} \overline{(\vec{r})} = \frac{i}{\hbar} \overline{\left[\frac{1}{2m} \hat{p}^2 + U(\vec{r}), \vec{r} \right]} = \frac{1}{m} \overline{\vec{p}}.$$

Täpselt samuti arvutame

$$\overline{\ddot{\vec{r}}} = \frac{d^2}{dt^2} \overline{(\vec{r})} = \frac{1}{m} \overline{[\hat{H}, \hat{p}]}.$$

Tulemuseks saame (vt. ülesanne (74)!)

$$\frac{d^2}{dt^2} (\vec{r}) = - \frac{1}{m} \nabla u . \quad (23.9)$$

Seosed (24.19) on klassikalise mehhaanika liikumisvõrrandid.

24. Vaba osake.

Lihtsaim kuju on Schrödingeri võrrandil vaba nitterelativistliku osakese jaoks:

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = E \psi . \quad (24.1)$$

Kooskõlas § 21 tulemustega võime võrrandi (24.1) lahendit otsida kujus

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) f(t) . \quad (24.2)$$

Vastava ülesande lahendamine (vt. ülesanne 21!) näitab, et võrrandil (24.1) on erilahendeid tasalainete kujul

$$\psi(\vec{r}, t) = C e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} , \quad (24.3)$$

kus laine levikuvektor \vec{k} on seotud osakese impulsi omaväärtusega nn. de Broglie' seosega

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} . \quad (24.4)$$

De Broglie' lainepikkuse $\lambda = \frac{2\pi}{|\vec{k}|}$ ja osakese impulsi absoluutväärtuse vahel saame seose

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

Osakese koguennergia avaldub vastava laine sageduse kaudu valemiga

$$E = \hbar \omega \quad \text{või} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} , \quad (24.5)$$

kui E arvutame võrdusest $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi$ või $\hat{H}\psi = E\psi$ vastavalt.

Laine (24.3) faasikiiruseks on $v_f = \frac{\omega}{k}$, või kuna vastavalt valemile (24.5)

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}, \quad (24.6)$$

$$v_f = \frac{\hbar k}{2m}. \quad (24.7)$$

Kui kiiruse operaatorit $\vec{v} = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \vec{r} \right] = \frac{\hbar}{im} \nabla$ rakendame olekufunktsioonile, saame osakese kiiruse

$$\vec{v} = \frac{1}{m} \hbar \vec{k}. \quad (24.8)$$

Valem (24.6) näitab, et elektromagnetilise tasalaine ja vaba osakese de Broglie laine vahel on oluline erinevus.

Elektromagnetilise tasalaine sagedus sõltub lineaarselt lainearvust κ ($\omega = c\kappa$). Sellistõttu ei sõltu lainepaketi rühma-

kiirus v_g , mis on arvutatav valemist $v_g = \left. \frac{\partial \omega}{\partial \kappa} \right|_{\kappa = \kappa_0}$, lainearvust κ ja ühtib kõikide komponentide faasikiirustega (dispersioon puudub). Vaba osakest kirjeldava laine korral

aga avaldub nn. rühmakiirus v_g järgmiselt: $v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}$. Võrreldes seda tulemust valemiga (24.8) näeme, et v_g ühtib osakese liikumiskiirusega.

Funktsiooniga (24.3) kirjeldatud olekus osutub tõenäosuse tihedus osakese leidmiseks mistahes ruumpiirkonnas konstantseks. Kuna teiselt poolt on funktsioon (24.3) impulssoperaatori omafunktsiooniks, on impulsi väärtus täpselt määratud (valem (24.4)).

Võrrandi (24.1) lahendit antud algtingimustel võib otsida lahendite (24.3) superpositsiooni kujul. Niisuguse la-

hendi abil on lihtne veenduda, et kui mingil alghetkel on osake hästi lokaliseeritud (tõenäosus osakese leidmiseks nullist erinev ainult kitsas vahemikus), siis aja jooksul see nn. lainepakett hajub (s. t. piirkond, kus vastav tõenäosus erineb nullist, suureneb). (Vt. ülesanded 22, 23!) Viimane tulemus näitab kujukalt, et avaldist $|\psi|^2$ ei saa interpreteerida osakese enda tihedusefunktsioonina, nagu ekslikult arvati kvantmehhaanika rajamise alguspäevil.

Vaba osakese lainevõrrandi saab lahendada ka sfäerilistes koordinaatides. Kui võrrandi (24.1) lahendit otsime kujus $\psi = \varphi(\vec{r}) f(t)$, $\varphi(\vec{r}) = f(r) P_\ell^{|\mathbf{m}|}(\cos\vartheta) e^{im\varphi}$, siis saame $f(r)$ jaoks võrrandi

$$f'' + \frac{2}{r} f' + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) f = 0, \quad (24.7)$$

millest asendus

$$f(r) = r^{-\frac{1}{2}} u(r); \quad \frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 > 0 \quad (24.8)$$

annab

$$u'' + \frac{1}{r} u' + \left[k^2 - \frac{(\ell + \frac{1}{2})^2}{r^2} \right] u = 0 \quad (24.9)$$

mille lahenditeks on Besseli funktsioonid $y_{\ell + \frac{1}{2}}(kr)$.

Eri lahendid

$$\varphi_{\ell m}(\vec{r}) = r^{-\frac{1}{2}} y_{\ell + \frac{1}{2}}(kr) P_\ell^{|\mathbf{m}|}(\cos\vartheta) e^{im\varphi}$$

kirjeldavad osakesi kindla energiaga ja kindla impulssmomentiga koordinaatide alguspunkti suhtes.

25. Ühedimensionaalne liikumine.

Kui osakese potentsiaalne energia sõltub ainult ühest koordinaadist, näit.

$$U(\vec{r}) = U(x), \quad (25.1)$$

siis võime olekufunktsiooni otsida kujus

$$\psi(\vec{r}) = \psi(x) \varphi(y, z), \quad (25.2)$$

kus $\varphi(y, z)$ rahuldab vaba osakese võrrandit, $\psi(x)$ aga ühedimensionaalse liikumise võrrandit:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]\psi = 0. \quad (25.3)$$

Võrrandil (25.3) on suur rakenduslik tähtsus. Vaatleme lähemalt tema lahendite omadusi.

Teoreem: Ühedimensionaalse liikumise korral on diskreetse energiaspektri kõik tasemed ühekordsed, s. t. igale energia väärtusele vastab üks olekufunktsioon.

Tõestame vastuväiteliselt. Olgu ψ_1 ja ψ_2 kaks sõltumatut funktsiooni, mis vastavad samale energiaväärtusele E . Siis võrrandi (25.3) põhjal

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} / \psi_1 = \frac{2m}{\hbar^2} (U - E) = \frac{d^2\psi_2}{dx^2} / \psi_2,$$

millest (kasutades tähistust $\frac{d^2\psi}{dx^2} = \psi''$):

$$\psi_1'' \cdot \psi_2 - \psi_2'' \cdot \psi_1 = 0. \quad \leftarrow ? \quad \frac{d}{dx} \left(\frac{\psi_1' \psi_2 - \psi_2' \psi_1}{x^2} \right) \quad (25.4)$$

Integreerides seost (25.4) saame

$$\psi_1' \psi_2 - \psi_2' \psi_1 = \text{konst.} \quad (25.5)$$

Arvestades, et diskreetse spektri korral rahuldavad oleku-

funktsioonid lõpmatuses tingimust

$$\psi_1|_{x \rightarrow \infty} = \psi_2|_{x \rightarrow \infty} = 0, \text{ millest konst.} = 0.$$

$$\text{Seega } \psi_1' \psi_2 - \psi_2' \psi_1 = 0$$

$$\text{või } \frac{d}{dx} (\ln \psi_1) = \frac{d}{dx} (\ln \psi_2),$$

millest $\psi_1 = \text{konst} \cdot \psi_2$, mis on vastuolus väitega funktsioonide sõltumatuses. Tõestus kehtib ka pideva spektri juhul, kui liikumine on ainult ühepoolset infiniitne.

Kui liikumine on kahepoolset infiniitne, siis on kõik energiatasemed kahekordselt kõõdunud.

Tõepoolest kahepoolset infiniitne liikumine tekib, kui energia väärtused $E > U_{\pm\infty}$. Sel korral on võrrandi (25.3) lahendil asümptootiline kuju

$$\psi_{x \rightarrow \pm\infty} = a_1 e^{i\kappa x} + a_2 e^{-i\kappa x}, \quad (25.4)$$

kus a_1 ja a_2 on meelevälsed konstandid ning

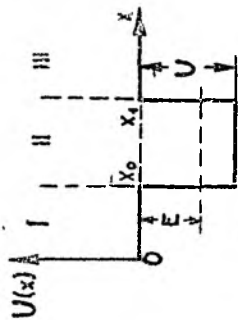
$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_{\pm\infty})}.$$

Järelikult vastab igale E väärtusele 2 erilahendit, mis lõpmatuses on regulaarsed.

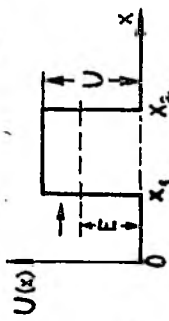
Kui $U(x) = U(-x)$, siis on Hamiltoni operaator invariantne peegeldusteisenduse suhtes ning osakese statsionaarseid olekuid iseloomustab kindel paarsus, s. o. energia omafunktsioonid liigituvad paaris- ja paarituteks funktsioonideks.

✗ Paljudel juhtudel võib potentsiaali käiku aproksimeerida nn. potentsiaalaukude või potentsiaalbarjääridega, millel on nelinurkne kuju, nagu esitatud juuresolevatel joonistel C.

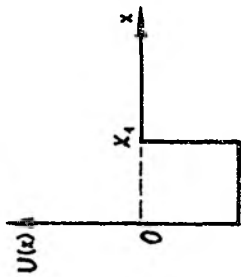
Osakese liikumispiirkond lahutatakse siis osadeks, kus



α



β



γ

Joon. C.

potentsiaalsel energial on konstantne väärtus, näiteks
 joon. C (a) I: $-\infty < x < x_0$, II: $x_0 \leq x \leq x_1$, III: $x_1 \leq x < +\infty$,
 ja lahendatakse Schrödingeri võrrand iga piirkonna jaoks
 eraldi, püstitades hiljem pidevusetingimused kujul:

$$\psi_I|_{x=x_0} = \psi_{II}|_{x=x_0}; \quad \psi_{II}|_{x=x_1} = \psi_{III}|_{x=x_1};$$

$$\psi_I'|_{x=x_0} = \psi_{II}'|_{x=x_0}; \quad \psi_{II}'|_{x=x_1} = \psi_{III}'|_{x=x_1}.$$

Ühtlasi tuleb alati kontrollida, kas lõplikkuse tingi-
 mused päramus punktis $x \rightarrow \pm \infty$ on rahuldatud. Lõpmata kõrge-
 te potentsiaalseinte korral (näit. joon. C (c) $U \rightarrow \infty$,
 kui $x = 0$) pidevusetingimusel on kuju $\psi|_{x=0} = 0$.

Kui lisatingimusi on samapalju kui lahendites sisaldu-
 vaid konstante, saame konstantide määramiseks homogeense
 võrrandi, mille lahenduvuse tingimus annab ühtlasi lubatud
 energiaväärtused. Kui lisatingimusi on vähem kui konstante,
 siis võib osakese energial olla pidevaid väärtusi (mingeid
 kitsendusi, mis määraksid lubatud energiaväärtused, ei tule)

Lõpliku kõrgusega potentsiaalseinte korral võib osake
 teatud tõesaosusega viibida klassikalises mõttes keelatud
 piirkonnas. Näit. joon. C (a) vastava potentsiaali korral
 võib negatiivse energiaga osake viibida ka piirkonnas I ja
 III. Samuti võib osake, mis langeb potentsiaalbarjäärile
 kõrgusega U (joon. C (b)) seda läbida, kui osakese energia
 $E < U$ (tunnelelekt). Tunnelelektiga seletatakse näiteks
 α -lagunemist, tuumade resonantshajumist jne. Osakese pee-
 geldumise või läbimise tõesaosuse arvutamiseks tuleb leida
 barjäärile langenud, barjäärilt peegeldunud ja barjääri lä-
 binud lainele vastavad tõesaosusevoo tihedused.

Sageli on otstarbekas taandada ühedimensionaalse võrrandi kujule ka tsentraalsümmeetrilises või silindersümmeetrilises väljas liikuvate osakeste Schrödingeri võrrandid (vt. ülesannete kogu lisa A p. 2). Ühedimensionaalset liikumist nii pidevate kui ka tükati pidevate potentsiaalide korral illustreerivad ülesanded 24 - 40.

Rakenduslikult oluline on ühedimensionaalse harmoonilise ostsillaatori kvantmehhaaniline käsitus (vt. näit. ül. 30, 12, 13, 14 ja lisa B p.1), sest harmoonilisele võnkumisele saab taandada ka keerukamate võnkumiste juhte, nagu näiteks aatomite võnkumised molekulides. Tahkekehateooria ja väljateooria mitmed probleemid on taandatavad harmoonilise ostsillaatori ülesandele.

Vastava Schrödingeri võrrandi leidmiseks tuleb lähtuda harmoonilise ostsillaatori energia avaldisest klassikalises mehhaanikas

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2, \quad (25.5)$$

kus üleminekul kvantmehhaanikasse asendub p operaatoriga $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ ja võrdus (25.5) võrrandiga

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right] \psi = E \psi. \quad (25.6)$$

Võrrandi (25.6) lahendamine toob esile järgmised harmoonilise ostsillaatori omadused.

1) Ostsillaatori kogu energiaaspekter on diskreetne ja tasemed (kooskõlas tõestatud teoreemiga) mittekõrdunud.

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

2) Ostsillaatori minimaalne energia $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$ on tin-

gitud määramatuse oseseid koordinaadi ja impulsi vahel, mis-
tõttu esinevad nn. nullvõnkumised. Klassikaline tasakaalu-
olek, kus koordinaadil ja impulsil oleksid korruga kindlad
väärtused $x=0$, $p=0$, ei eksisteeri.

3) Harmoonilise ostsillaatori statsionaarsed olekud o-
iseloomustatud kindla paarsusega $(-1)^n$.

26. Osake tsentraalsümmeetrilises väljas.

Tsentraalsümmeetrilise välja korral on Schrödingeri võr-
randit otstarbekas lahendada sfäärilistes koordinaatides r ,
 ϑ , φ .

Hamiltoni operaator avaldub siis järgmiselt (vt. § 16
lõppu!):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\Delta_{(r)} + \frac{\Delta_{(\vartheta, \varphi)}}{r^2} \right) + U(r), \quad (26.1)$$

kus

$$\Delta_{(r)} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}, \quad (26.2)$$

$$\Delta_{(\vartheta, \varphi)} = \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin^2 \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (26.3)$$

Silmas pidades impulssmomenti ruudu operaatorit \hat{M}^2 sfääri-
listes koordinaatides (17.21), võime kirjutada

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{(r)} + \frac{\hat{M}^2}{2m r^2} + U(r). \quad (26.4)$$

Võrrandi

$$(\hat{H} - E) \psi = 0 \quad (26.5)$$

lahendite võime järjekulde otsida muutujate eraldamise meetodil,

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \phi(\vartheta, \varphi). \quad (26.6)$$

Funktsioonile $\phi(\vartheta, \varphi)$ saame siis võrrandi

$$(\hat{M}^2 + \lambda) \phi(\vartheta, \varphi) = 0 \quad (26.7)$$

ja radiaalosalale $R(r)$ vastavalt

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - u(r)] + \frac{\lambda}{\hbar^2 r^2} \right\} R = 0. \quad (26.8)$$

Võrrandil (26.7) on kõikjal lõplik lahend, kui muutujate eraldamise konstant

$$\lambda = -\hbar^2 \ell(\ell+1), \quad (\text{vt. § 18})$$

kusjuures lahenditeks on operaatori \hat{M}^2 omafunktsioonid (18.18).

Seega taandub probleem radiaalosa võrrandi

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - u(r)] - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right\} R = 0 \quad (26.9)$$

lahendamisele.

Asendusega

$$R = \frac{\chi}{r} \quad (26.10)$$

saame võrrandile (26.9) kuju

$$\chi'' + \left[\frac{2m}{\hbar^2} E - u(r) \right] \chi = 0, \quad (26.11)$$

kus

$$\chi'' = \frac{d^2 \chi}{dr^2},$$

Võrrand (26.11) on ühedimensionaalse liikumise Schrödingeri võrrandi piirkonnas $0 \leq r < \infty$.

Vaatleme lahendit juhul, kui $U_\infty = 0$. Siis on positiivsele energiale vastav spekter pidev, negatiivsele vastav - diskreetne. § 25 tulemuste põhjal vastab mõlemal juhul ühele energiaväärtusele üks radiaalfunktsioon. Kuna koordinaattelgede peegeldus ei mõjuta Schrödingeri võrrandit, on kõik tsentraalsümmeetrilises väljas viibiva osakese statsionaarsed olekud kindla paarsusega.

Analüüsime üksikasjalikumalt funktsiooni $R(r)$ käitumist piirkonna äärtel $r \rightarrow 0$ ja $r \rightarrow \infty$.

a) Olgu piirkonnas $r \rightarrow 0$

$$U(r) = -\frac{C}{r^\alpha}, \quad 1 \leq \alpha < 2. \quad (26.12)$$

Lahendit otsime kujul

$$R(r) = r^S (a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + \dots). \quad (26.13)$$

Paigutame avaldise (26.13) võrrandisse (26.9) ning säilitame r kõige madalama astme r^{S-2} . Võrrutades selle kordaja nulliga saame karakteristliku astmenäitaja S jaoks võrrandi

$$S(S+1) = \ell(\ell+1), \quad (26.14)$$

millest

$$S = \begin{cases} +\ell \\ -(\ell+1) \end{cases}. \quad (26.15)$$

Kui nõuame lahendi regulaarsust algpunktis, näeme, et sobib ainult (26.15) esimene lahend. Seega regulaarsuse tingimus alguspunktis lülitab (26.9) üldlahendist teise sõltumatu erilahendi välja.

Lahendi algpunkti ümbruses võime järelikult kirjutada kujus

$$R(r) = r^2 (a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + \dots) \quad (26.16)$$

b) Piirkonnas $r \rightarrow \infty$ olgu potentsiaal

$$U(r) = -\frac{C'}{r} \left(1 + \frac{C_1}{r} + \frac{C_2}{r^2} + \dots \right). \quad (26.17)$$

Lahendit otsime kujus

$$R(r) = r^\alpha e^{\beta r} (b_0 + b_1/r + b_2/r^2 + \dots). \quad (26.18)$$

Paigutades (26.18) võrrandisse (26.9) ning võrrutades nulliga suurimate liikmete ees olevad kordajad, saame 2 võrrandit karakteristlikkude astmenäitajate α ja β määramiseks:

$$\beta^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0 \quad (26.19)$$

$r^\alpha e^{\beta r}$ kordaja võrrutamisel nulliga, ja

$$\alpha\beta + \beta + \frac{mC'}{\hbar^2} = 0 \quad (26.20)$$

$r^{\alpha-1} e^{\beta r}$ kordaja võrrutamisel nulliga.

Kui tähistame

$$\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = B, \quad (26.21)$$

võime lahendi (26.18) kirjutada

$$R(r) = \frac{1}{r} \left\{ A_1 e^{B(r + \frac{C'}{2E} \ln r)} + A_2 e^{-B(r + \frac{C'}{2E} \ln r)} \right\} \phi(r), \quad (26.22)$$

kus $\phi(r)$ on funktsioon, mis on regulaarne lõpmata kauge punkti ümbruses:

$$\phi(r) = b_0 + \frac{b_1}{r} + \frac{b_2}{r^2} + \dots, \quad (26.23)$$

A_1 ja A_2 - konstandid. Kuna regulaarsusetingimus alguspunktis eraldas üldlahendist välja ühe erilahendi, ei või konstandid A_1 ja A_2 olla üksteisest sõltumatud. Lahendi

(26.22) võime kirjutada erilahendina,

$$R(r) = \frac{A_2}{r} \left\{ \frac{A_1}{A_2} e^{\beta(r + \frac{C'}{2E} \ln r)} + e^{-\beta(r + \frac{C'}{2E} \ln r)} \right\} f(r), \quad (26.24)$$

kusjuures $\frac{A_1}{A_2}$ võib sõltuda ainult võrrandi parameetritest E, l, C' .

Olenevalt sellest, kas E on positiivne või negatiivne, saame 2 erinevat juhtu.

Kui $E > 0$, siis β on puhtimaginaarne, mistõttu lahend (26.24) on regulaarne mistahes $\frac{A_1}{A_2}$ väärtuse korral. Järelikult ei anna lahendi regulaarsus positiivse energia korral mingisuguseid lisatingimusi E väärtuste jaoks ning E spekter on pidev kooskõlas üldise teooriaga.

Kui $E < 0$, siis β on reaalne ning lahend (26.24) on regulaarne lõpmatuses ainult siis, kui $(\beta > 0)$

$$\frac{A_1}{A_2} = 0 \quad (26.25)$$

Võrrandi (26.25) juured annavadki kõik võimalikud energia väärtused diskreetse spektris.

27. Kahe keha probleemi taandamine ühe keha probleemiks.

Kahe keha korral võime Hamiltoni operaatori kirjutada

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 + U(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (27.1)$$

kus

$$\Delta_1 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2}; \quad \Delta_2 = \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2}.$$

Näitame, et kui potentsiaalne energia sõltub ainult kehade koordinaatide vahet

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2), \quad (27.2)$$

siis on kahe keha probleem taandatav ühe keha probleemiks.

Toome sisse masskeskme koordinaadid

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (27.3)$$

ja relatiivsed koordinaadid

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2. \quad (27.4)$$

Uutes muutujates saame Hamiltoni operaatori

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + U(\vec{r}) - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta(\vec{R}), \quad (27.5)$$

kus

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}; \quad \Delta(\vec{R}) = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2},$$

$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ on süsteemi taandatud mass, $M = m_1 + m_2$ - süsteemi kogu mass.

Statsionaarsete olekute võrrandile

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (27.6)$$

võime lahendit otsida kujus

$$\psi = \psi_1(\vec{r}) \psi_2(\vec{R}), \quad (27.7)$$

kusjuures funktsioonid ψ_1 ja ψ_2 rahuldavad vastavalt võrrandeid

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + U(\vec{r}) \right\} \psi_1(\vec{r}) = E_1 \psi_1(\vec{r}), \quad (27.8)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta(\vec{R}) \psi_2(\vec{R}) = E_2 \psi_2(\vec{R}), \quad (27.9)$$

kus $E_1 + E_2 = E$.

Võrrand (27.8) kirjeldab osakeste suhtelist liikumist,

kusjuures E_2 on suhtelise liikumise energia. Võrrand (27.9) kirjeldab süsteemi masskeskme tungivaba liikumist, kusjuures E_2 on masskeskme translatoorse liikumise energia.

28. Vesinikusarnase aatomi diskreetsete energia- nivoode määramine.

Vesinikusarnases aatomis mõjub elektronile kujoniline potentsiaal. Kuna aatomi masskeskme liikumine seal ei huvita, võime eelmise punkti tulemuste põhjal statsionaarse seisundi võrrandi esitada

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{Ze^2}{r} \right\} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}), \quad (28.1)$$

kus Z on aatomi järjekorranumber, e - elementaarlaeng, μ - elektroni ja tuuma taandatud mass.

§ 26 tulemust arvestades saame $\psi(\vec{r})$ esitada kujus

$$\psi(\vec{r}) = R(r) Y(\vartheta, \varphi), \quad (28.2)$$

kus $Y(\vartheta, \varphi)$ on antud valemiga (18.18) ning $R(r)$ rahuldab võrrandit

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0. \quad (28.3)$$

Kasutades tähistusi

$$\alpha^2 = \frac{8\mu |E|}{\hbar^2}, \quad (28.4)$$

$$\beta = \frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2 \alpha}, \quad (28.5)$$

$$\rho = \alpha r, \quad (28.6)$$

võime võrrandi (28.3) kirjutada

$$\left\{ \frac{d^2}{dq^2} + \frac{2}{q} \frac{d}{dq} + \frac{\beta}{q} - \frac{1}{4} - \frac{\ell(\ell+1)}{q^2} \right\} R = 0. \quad (28.7)$$

Võrreldes valemite (28.7) valemiga (26.9) näeme, et antud juhul β , mis on defineeritud valemiga (26.21), omab väärtuse $\beta = \frac{1}{2}$.

Pidades silmas funktsiooni R käitumist nullpunkti ja lõpmatuspunkti ümbruses (valemid (26.16) ja (26.24)) ning regulaarsusetingimust (26.25), võime (28.7) lahendi kirjutada

$$R(q) = q^\ell e^{-\frac{q}{2}} w(q), \quad (28.8)$$

kus $w(q)$ on kõikjal regulaarne funktsioon, mis lõpmatuses kasvab aeglasemalt kui $e^{\frac{q}{2}}$. (28.7) ja (28.8) põhjal saame $w(q)$ jaoks võrrandi

$$q w'' + (2\ell + 2 - q) w' + (\beta - \ell - 1) w = 0, \quad (28.9)$$

mille lahendit otsime kujul

$$w(q) = \sum_k a_k q^k, \quad (28.10)$$

kusjuures ääretingimuste põhjal $a_0 \neq 0$ ning

$$w(q) < e^{\frac{q}{2}}, \text{ kui } q \rightarrow \infty. \quad (28.11)$$

Kui asendame rea (28.10) võrrandisse (28.9), saame järgmised rekurrentsed seosed koefitsientide a_k vahel:

$$a_{k+1} = \frac{k - \beta + \ell + 1}{(k+1)(k+2\ell+2)} a_k. \quad (28.12)$$

Kuna

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{a_{k+1}}{a_k} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{1+k} = 0,$$

siis rida (28.10) on koonduv igal lõplikul q väärtusel.

Alates teatud k väärtusest $k > N$,

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} > \frac{1}{1+k} \frac{1}{2} (1 - \varepsilon), \quad (28.13)$$

kuna

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{k - \beta + l + 1}{k + 2k + 2} = 1.$$

Teiselt poolt: eksponentsiaalfunktsiooni $e^{\frac{1}{2}(1+\varepsilon)\rho} = \sum_k b_k z^k$ astmerea koefitsiendid rahuldavad mistahes K korral tingimust

$$\frac{b_{k+1}}{b_k} = \frac{1}{1+k} \frac{1}{2} (1 + \varepsilon). \quad (28.14)$$

Järelikult kahanevad teatud K väärtustest alates koefitsiendid a_k aeglasemalt koefitsientidest b_k , mistõttu küllalt suurte muutuja ρ väärtuste korral $w(\rho) > e^{\frac{1}{2}\rho(1+\varepsilon)}$, vastuolus ääretingimusega (28.11).

Niisias saame regulaarsuse nõuet lõpmatuses rahuldada ainult siis, kui rea (28.10) katkestame teatud K väärtusel $K = n_n$. S. t. funktsiooni $W(\rho)$ peame otsima polünoomi kujul, kus n_n on polünoomi maksimaalne aste.

Kuna $a_{n_n+1} = a_{n_n+2} = \dots = 0$, siis valemi (28.12) põhjal

$$n_n = \beta - l - 1. \quad (28.15)$$

Tuues sisse tähistuse

$$n_n + l + 1 = n; \quad n \geq l + 1, \quad (28.16)$$

saame

$$\beta = n; \quad (28.17)$$

või valemite (28.4) ja (28.5) põhjal, arvestades, et $E < 0$,

$$E_n = - \frac{\mu z^2 z^4}{2k^2} \frac{1}{h^2}. \quad (28.18)$$

Valem (28.18) sarnaneb täpselt Bohri teoorias saadud vesiniku-

sarnase aatomi energianivoode avaldisega.

Täisarvu $n \geq 1$ nimetatakse peakvantarvuks, polünoomi $w(\varrho)$ astet määravad täisarvu n_r - radiaalseks kvantarvuks.

Valemist (28.18) järgneb, et kvantiseeritud energiatasemed lähenevad n kasvades väärtusele null.

29. Hamiltoni operaatori omafunktsioonid vesinikusarnase aatomi korral.

Võrreldes võrrandit (28.9) kõdunud hüpergeomeetrilise funktsiooni võrrandiga:

$$\varrho y'' + (\gamma - \varrho) y' - \alpha y = 0, \quad (29.1)$$

mille üldlahendiks on funktsioon

$$y = C_1 F(\alpha, \gamma; \varrho) + C_2 \varrho^{1-\gamma} F(\alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma; \varrho) \quad (29.2)$$

(vt. ülesannete kogu lisa B p. 2!), näeme, et võrrand (28.9) ühtib võrrandiga (29.1), kui

$$\gamma = 2l + 2, \quad \alpha = -\beta + l + 1. \quad (29.3)$$

Kuna valemi (29.3) põhjal $1 - \gamma \leq -1$, on regulaarsuse-nõue alguspunktis $\varrho = 0$ rahuldatud vaid siis, kui $C_2 = 0$.

Seega

$$w(\varrho) = C F(-\beta + l + 1, 2l + 2; \varrho). \quad (29.4)$$

Kõdunud hüpergeomeetriline funktsioon kasvab üldiselt eksponentsiaalselt, kui $\varrho \rightarrow \infty$, ja taandub lõpliku astme polünoomiks, kui $\alpha = -n_r$, kus n_r on positiivne täisarv (vt. ülesannete kogu lisa B p. 2!).

Seega $w(\varrho)$ regulaarsusetingimusest saamegi, et valemis (29.4) peab kehtima seos

$$-\beta + l + 1 = -n_n.$$

See ongi tingimus (28.15), millest on arvatavad lubatud energia väärtused (28.18).

Sageli avaldatakse funktsioon $w(\varrho)$ Laguerre'i polünoomide kaudu, mis on defineeritud järgmiselt (vt. ülesannete kogu lisa B punkt 3!):

$$L_{n_n}^{(p)}(\varrho) = \varrho^{-p} e^{-\varrho} \frac{d^{n_n}}{d\varrho^{n_n}} (e^{-\varrho} \varrho^{n_n+p}) \quad (29.5)$$

ning on seotud kõdnud hüpergeomeetrilise funktsiooniga valemil

$$L_{n_n}^{(p)}(\varrho) = (p+1)(p+2)\dots(p+n_n) F(-n_n, p+1; \varrho) \quad (29.6)$$

kaudu.

Laguerre'i polünoomid $L_n^{(p)}(\varrho)$ on ortogonaalsed kaaluga $e^{-\varrho} \varrho^p$, s. o.

$$\int_0^{\infty} e^{-\varrho} \varrho^p L_n^{(p)}(\varrho) L_{n'}^{(p)}(\varrho) d\varrho = \begin{cases} 0, & n \neq n', \\ n!(n+p)!, & n = n'; \end{cases} \quad (29.7)$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\varrho} \varrho^{p+1} [L_n^{(p)}(\varrho)]^2 d\varrho = n!(n+p)!(2n+p+1). \quad (29.8)$$

Näitame, et polünoomil $L_n^{(p)}$ on täpselt n_n positiivset nullkohta, s. o. kõik Laguerre'i polünoomi nullkohad on reaalsed ja positiivsed.

Selleks vaatleme integraali

$$J = \int_0^{\infty} \varrho^p e^{-\varrho} L_n^{(p)}(\varrho) f(\varrho) d\varrho. \quad (29.9)$$

Definitsiooni (29.5) kohaselt võime kirjutada

$$J = \int_0^{\infty} \frac{d^{n_2}}{dx^{n_2}} (e^{-\rho} \rho^{n_2+p}) f(\rho) d\rho = (-1)^{n_2} \int_0^{\infty} e^{-\rho} \rho^{n_2+1} f^{(n_2)}(\rho) d\rho, \quad (29.10)$$

mis saadakse ositi integreerides.

Kui $f(\rho) = \rho^s$, siis on valemi (29.10) põhjal integraal (29.9) nullist erinev vaid siis, kui $S \geq n_n$.

Kui tähistame $L_{n_n}^{(p)}$ juured $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_q$, ning oletame, et $q < n_n$, siis moodustades funktsiooni

$$f(\rho) = (\rho - \alpha_1)(\rho - \alpha_2) \dots (\rho - \alpha_q)$$

näeksime, et korrutis $f(\rho) L_{n_n}^{(p)}$ on kogu määramispiirkonnas samamärgiline ja integraal (29.9) oleks nullist erinev, mis viib vastuolule tulemusega (29.10).

Valemi (29.7) põhjal võime defineerida normeeritud Laguerre'i polünoomid

$$L_n^{(p)}(\rho) = [n!(n+p)!]^{-\frac{1}{2}} L_n^{(p)}(\rho). \quad (29.11)$$

Normeeritud Laguerre'i polünoomide kaudu võime radiaalosa funktsiooni $R(\rho)$ avaldada järgmiselt:

$$R_{n,\ell}(\rho) = N_{n,\ell} \rho^\ell e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho), \quad (29.12)$$

kus $N_{n,\ell}$ on normeerimiskonstant. Normeerimiskonstandi leidmisel arvestame, et valemite (28.4), (28.6) ja (28.18) põhjal

$$\rho = \frac{2Z}{n} \frac{r}{a}, \quad (29.13)$$

kus $a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ on Bohr'i esimene raadius.

Tähistame

$$\frac{Zn}{a} = n_1, \quad (29.14)$$

siis

$$R_{n,\ell}(a) = N_{n,\ell} \left(\frac{2a_1}{n}\right)^\ell e^{-\frac{a_1}{n}} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2a_1}{n}\right). \quad (29.15)$$

Arvutame nüüd normeerimisintegraali.

Valemite (29.8), (29.11) - (29.15) põhjal

$$\int_0^\infty [R_{n,\ell}(a)]^2 a^2 da = N_{n,\ell}^2 \left(\frac{na}{2Z}\right)^3 \frac{1}{n_n!(n_n+2\ell+1)!} \times$$

$$\times \int_0^\infty \rho^{2\ell+2} e^{-\rho} [L_{n_n}^{2\ell+1}(\rho)]^2 d\rho = N_{n,\ell}^2 \left(\frac{na}{2Z}\right)^3 2n.$$

Siit

$$N_{n,\ell} = N_n = \frac{2}{n^2} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}.$$

Seega lõplikult

$$R_{n,\ell}(a) = \frac{2}{n^2} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \left(\frac{2a_1}{n}\right)^\ell e^{-\frac{a_1}{n}} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2a_1}{n}\right). \quad (29.16)$$

Leiame $R_{n,\ell}(a_1)$ asümptootilise kuju, kui $n \rightarrow \infty$.

Pidades silmas seost Laguerre'i polünoomide ja kõõnund hüpergeomeetrilise funktsiooni vahel, võime $R_{n,\ell}$ avaldada hüpergeomeetrilise funktsiooni kaudu: ($a = Z = 1$)

$$R_{n,\ell}(a_1) = \frac{2}{n^{\ell+2}} \sqrt{(n-\ell)(n-\ell+1)\dots(n+\ell)} \frac{(2a_1)^\ell}{(2\ell+1)!} e^{-\frac{a_1}{n}} \times$$

$$\times F(-n+\ell+1; 2\ell+2; \frac{2a_1}{n});$$

$$F(-n+\ell+1; 2\ell+2; \frac{2a_1}{n}) = 1 - \frac{n-\ell-1}{(2\ell+2)!} \frac{2a_1}{n} +$$

$$+ \frac{(n-\ell-1)(n-\ell-2)}{(2\ell+2)(2\ell+3)2!} \left(\frac{2a_1}{n}\right)^2 - \dots,$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} F(-n+\ell+1; 2\ell+2; \frac{2a_1}{n}) = 1 - \frac{2a_1}{(2\ell+2)!} +$$

$$+ \frac{(2a_1)^2}{(2\ell+2)(2\ell+3)2!} - \dots = (2\ell+1)! (2a_1)^{-\ell-\frac{1}{2}} J_{2\ell+1}(\sqrt{8a_1}).$$

Besseli funktsioon $J_p(r_1)$ on defineeritud valemiga

$$J_p(r_1) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{1}{k! \Gamma(k+p+1)} \left(\frac{r_1}{2}\right)^{2k+p};$$

$$n^{-l-2} \sqrt{(n-l)\dots(n+l)} e^{-\frac{r_1}{n}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} n^{-\frac{3}{2}},$$

mistõttu

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{\frac{3}{2}} R_{n,l}(r_1) = \sqrt{\frac{2}{r_1}} J_{2l+1}(\sqrt{8r_1}). \quad (29.18)$$

Kuna fikseeritud n korral $l=0, 1, \dots, n-1$; $m=-l, \dots, +l$, siis ühele omaväärtusele E_n vastab $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$ omafunktsiooni, s.t. vesinikusarnase aatomi energiatasemed on n^2 -kordselt kõdunud. n^2 -kordne kõdumine esineb ainult kulonilise potentsiaali korral, s. o. vesinikusarnases aatomis. Üldiselt energia väärtused, samuti nagu radiaalosa olekufunktsioonidki, sõltuvad tsentraalsümmeetrilises väljas kahest kvantarvust n_r ja l . Kõdumine esineb üldjuhul ainult impulssmomendi projektsiooni iseloomustava kvantarvu m suhtes, s. t. iga energiatase on $(2l+1)$ -kordselt kõdunud. Iga impulssmomendi absoluutväärtusele, mis on iseloomustatud kvantarvuga l , vastab kindel energia.

Vesinikusarnase aatomi energia ei sõltu kvantarvudest n_r ja l eraldi, vaid ainult nende kindlast kombinatsioonist, mistõttu energiatasemete kordsus suureneb.

$E > 0$ korral võime kasutada analoogilist meetodit omafunktsioonide leidmiseks, kui valemities (28.4) - (28.6) asendame

$$\alpha \rightarrow i\alpha; \quad \beta \rightarrow -i\beta; \quad \rho \rightarrow i\rho.$$

Siis kooskõlas valemitega (28.8) ja (28.4) saame lahendiks

$$R_{E,l}(\rho) = N_E \rho^l e^{-i\rho} F(i\beta+l+1; 2l+2; i\rho).$$

Kui tähistame $\frac{\mu Z^2 e^4}{\hbar^2} = E_0$; ning $\tilde{\epsilon} = \frac{E}{E_0}$ siis võib $R_{\epsilon l}$ -le anda kuju

$$R_{\epsilon l}(r_1) = a(\epsilon) e^{-i r_1 \sqrt{2\epsilon}} (r_1 \sqrt{2\epsilon})^l F\left(l+1 + \frac{i}{\sqrt{2\epsilon}}; 2l+2; i r_1 \sqrt{2\epsilon}\right),$$

$$\text{kus } a(\epsilon) = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{1 - e^{-\pi\sqrt{2/\epsilon}}}} \frac{\sqrt{(1 + \frac{1}{2\epsilon}) \dots (l^2 + \frac{1}{2\epsilon})}}{(2l+1)!}.$$

Seejuures

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} R_{\epsilon l}(r_1) = \frac{2}{\sqrt{n_1}} J_{2l+1}(\sqrt{8} r_1) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{2} n^{\frac{1}{2}} R_{n,l}(r_1).$$

Pidevale ja diskreetsele energiaspektrile vastavad omafunktsioonid koos moodustavad täieliku süsteemi.

30. Elektroni orbitaalne magnetmoment.

Vaatleme magnetmomenti, mis on tingitud atomaarsete voolude olemasolust.

Kui oletame, et aatomis elektronile mõjuv väli on tsentraalne, saame statsionaarse oleku lainefunktsiooni kujul

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) P_l^{lm}(\cos \vartheta) e^{im\varphi}. \quad (30.1)$$

Vooluvektori definitsiooni põhjal

$$\vec{j} = \frac{ie\hbar}{2\mu} \left\{ \psi_{nlm}^* \nabla \psi_{nlm} - \nabla \psi_{nlm}^* \psi_{nlm} \right\}, \quad (30.2)$$

kus μ - on elektroni mass, e - laeng.

Sfäärilistes koordinaatides

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta}, \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (30.3)$$

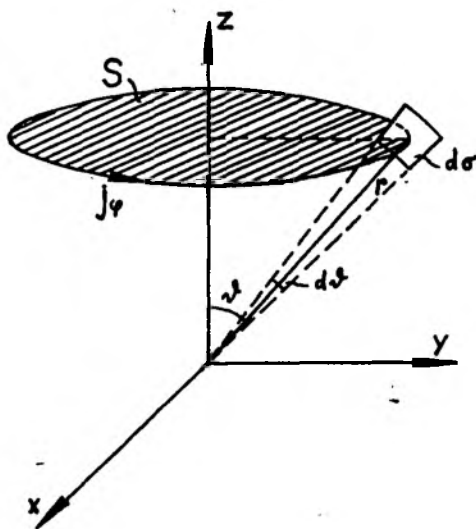
Arvestades $R_{nl}(r)$ ja $P_l^{lm}(\cos \vartheta)$ reaalsust näeme, et

$$j_r = j_\vartheta = 0; \quad j_\varphi = -\frac{e\hbar m}{\mu r \sin \vartheta} |\psi_{nlm}|^2. \quad (30.4)$$

Kuna voolutihedusel on nullist erinev ainult φ -joone puutuja suunaline komponent, võime polaarteljesuunalise magnetmomendi M_z arvutamiseks kasutada valemit

$$dM_z = \frac{dJ \cdot S}{c}, \quad (30.5)$$

kus $dJ = j_\varphi d\sigma$, $d\sigma$ - pinnaelement meridionaalses tasa-



Joon. D.

pinnas (vt. joon. D), s. o. tasapinnas, mis on risti j_φ -ga, S - pindala, mida haarab vool J .

$$S = \pi r^2 \sin^2 \alpha,$$

$$d\sigma = dr \cdot r \cdot d\alpha;$$

$$dM_z = \frac{1}{c} j_\varphi d\sigma \cdot S = \frac{2\pi m}{\mu_0 \sin \alpha} \frac{\pi r^3 \sin^2 \alpha dr d\alpha}{c} |\psi_{nem}|^2, \quad (30.6)$$

mille võime kirjutada

$$dM_z = -\frac{e\hbar m}{2\mu c} \int_0^{2\pi} |\psi_{nlm}|^2 r^2 \sin\vartheta d\vartheta d\varphi dr$$

või

$$M_z = \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi r^2 \sin\vartheta |\psi_{nlm}|^2 \left(-\frac{e\hbar m}{2\mu c}\right). \quad (30.7)$$

Arvestades, et ψ_{nlm} on normeeritud,

$$M_z = -\frac{e\hbar}{2\mu c} m \cdot \frac{e\hbar}{2\mu c} = \mu_B = 9 \cdot 10^{-21} \text{ CGSM}$$

nimetatakse Bohri mag-

netoniks.

Seega

$$M_z = -\mu_B \cdot m. \quad (30.8)$$

Kuna polaartelg on meelevaldselt valitud, annavad orbitaalse magnetmomendi ja orbitaalse impulssmomendi kõikide vastavate komponentide väärtused güromagnetilise suhte

I, s. o.:

$$\left(-\frac{e}{2\mu c}\right)^{-1} \frac{M_z}{M_z} = 1. \quad (30.9)$$

See on klassikalisest füüsikast tuntud tulemus, mis on ootuspärane, arvestades orbitaalse momendi n.-ö. klassikalist päritolu.

IV. ESITUSTE TEOORIA ALUSED.

31. Olekufunktsioonide esitused. Olekuvektor.

Esimeses peatükis märkisime, et kvantmehaanikas seatakse füüsikalise objekti igale olekule vastavusse funktsioon, mille argumentideks võivad olla mistahes samaaegselt mõõdetavate suuruste väärtused. Argumentide valik tähendab esituse valikut. Täpsustame neid mõisteid.

Esitustele võime anda lihtsa geomeetrilise tõlgenduse olekuvektori mõiste abil.

Vaatleme vektorit harilikus ruumis. Kui valime konkreetse koordinaadistiku, s. t. fikseerime koordinaattelgi määravad baasivektorid, võime antud vektorit üheselt kirjeldada projektsioonide abil vastavatele baasivektoritele. Baasivektorite süsteem on valitav lõpmata mitmeti, kusjuures igas baasis esitab vektorit isesugune komponentide kompleks. Järelikult on vektori komponendid funktsionaalses sõltuvuses baasist. Üleminekule ühest koordinaadistikust teise vastab kindel seos vektori uute ja vanade komponentide vahel. Lineaarteisenduste korral ei ole vektori pikkus üleminekuvalemites oluline.

Seame ka mikroobjekti olekutele vastavusse mõnesugused vektorid. Konkreetse ülesande lahendamisel peame valima baasivektorite süsteemi. Olekufunktsiooni kõikide väärtuste kompleks antud esituses ongi olekuvektori komponentide kompleks fikseeritud baasis.

q -esituse korral on baasivektoriteks koordinaatide omavektorid, p -esituse korral vastavalt impulsi omavektorid jne. Kuna mikroobjektil on lõpmata palju olekuid, on olekuvektorite ruum lõpmatudimensionaalne. Kui baasivektorite hulk on loenduv, on olekufunktsiooni argument diskreetne, vastasel korral pidev. Komplexsete komponentidega olekuvektorite hulk moodustab üldistatud Hilberti ruumi.

Hilberti ruumiks nimetatakse lõpmatudimensionaalset kompleksset vektorruumi, kus on defineeritud vektorite skalaarkorrutis. Olgu vektor α komponentidega a_1, a_2, a_3, \dots ja vektor β komponentidega b_1, b_2, b_3, \dots . Siis nende skalaarkorrutiseks nimetatakse arvu (α, β) , mis moodustatakse järgmiselt:

$$(\alpha, \beta) = \sum_{\kappa} a_{\kappa}^* b_{\kappa} \quad (31.1)$$

Pidevate indeksite korral on summa asemel integraal. Definitsioonist järeneb, et $(\alpha, \beta) = (\beta, \alpha)^*$. Kui $(\alpha, \beta) = 0$, siis on vektorid α ja β ortogonaalsed. Avaldis

$$(\alpha, \alpha) = \sum_{\kappa} a_{\kappa}^* a_{\kappa} \geq 0 \quad (31.2)$$

määrab vektori pikkuse ruudu. Harilikku Hilberti ruumi vektorid on lõpliku pikkusega. Olekuvektorid moodustavad üldistatud Hilberti ruumi, kuna nende pikkus võib olla lõpmatu.

Vaatleme näitena energia esitust osakese jaoks, mille energiaväärtused on kõdumatud ja moodustavad diskreetse spektri. Baasivektoriteks on siis energiaoperaatori omavektorid, kusjuures igale energiaväärtusele $E_1, E_2, \dots, E_{\kappa}, \dots$ vastab üks baasivektor $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{\kappa}, \dots$

Olgu osäke olekus, mida iseloomustab vektor ξ . Olekufunktsioon $\psi(E_1)$ annab ξ projektsiooni baasvektorile ϕ_1 , $\psi(E_2)$ - baasvektorile ϕ_2 jne.

Piltlikult öeldes: mida rohkem vektor ξ on "kaldu" vektori ϕ_k poole, seda suurem on tema projektsiooni absoluutväärtuse ruut $|\psi(E_k)|^2$, seda suurem on ka väärtusega E_k määratud oleku "panus" vaadeldavasse olekusse, s. t. seda suurem selle oleku tõenäosus.

Valemite (31.1) (31.2) kohaselt annab olekufunktsiooni norm olekuvektori pikkuse, mis võib olla kas lõplik või lõpmatu. Erinevatele olekutele vastavad erineva orientatsiooni-ga olekuvektorid. Olekuvektorite normeerimine annab võimaluse võrrelda erinevate vektorite samasuunalisi komponente.

Esituste samaväärsus peegeldab baasi valiku põhimõtet: meelevaldsust, kuigi igal konkreetsel juhul tuleb valida ülesande iseloomule kõige sobivam baas. Seepärast võime konkreetsete ülesannete lahendamisel kasutada ainult olekufunktsiooni mõistet ja loobuda abstraktse olekuvektori mõistest, nagu enamik autoreid teeb.

Lineaaralgebrast on teada, et üleminekul ühest baasist teise (ühest koordinaadistikust teise) teisenevad vektori ξ komponendid x_k lineaarhomogeenselt:

$$x_i' = \sum_k A_{ik} x_k, \quad (31.3)$$

kus x_i' on vektori ξ komponendid vanas, x_i - vastavalt uues baasis, A_{ik} - baaside valikust sõltuvad kordajad.

Kui pikkusühiku jätame samaks, siis vektori pikkuse ruut ei muutu ja avaldub ortogonaalsetes baasides kujul:

$$\sum_{\kappa} \alpha_{\kappa}^* x_{\kappa} = \sum_{\kappa} x_{\kappa}^* \alpha_{\kappa} \quad (31.4)$$

(vektoril \vec{x} võivad olla ka kompleksarvulised komponendid).

Arvestades seoseid (31.3), saame (31.4) kehtivuse tingimuseks

$$\sum_i A_{ik}^* A_{ik'} = \delta_{kk'} \quad (31.5)$$

Kordajad A_{ik} moodustavad harilikus 3-ruumis 3-ndat järku maatriksi A . Maatriksit C elementidega $C_{ik} = A_{ki}^*$ nimetatakse A kaasmaatriksiks ja tähistatakse $C = A^+$. Tingimuse (32.3) võime kirjutada maatriksite A^+ ja A korutisena

$$\sum_i A_{ik}^* A_{ik'} = \sum_i A_{ki}^+ A_{ik'} = (A^+ A)_{kk'}$$

Tingimuse (31.5) paremal poolal on ühikmaatriksi I elementidega $\delta_{kk'}$. Seega võime tingimuse (31.5) maatrikskujus esitada järgmiselt:

$$A^+ A = I \quad (31.5')$$

Maatriksit U , mis rahuldab tingimust

$$U U^+ = U^+ U = I, \text{ s.t. } U^+ = U^{-1}, \quad (31.6)$$

nimetatakse unitaarseks maatriksiks (vrd. unitaarse operaatori definitsiooniga val. (13.8)).

Valemite (31.3, 5') kohaselt on vektori \vec{x} komponendid erinevates baasides seotud unitaarse maatriksiga A .

Kui \vec{x} komponendid korraldame üheveeruliseks püstmaatriksiks, võime (31.3) esitada maatriksvõrdusena:

$$\begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \quad \text{või } x' = Ax.$$

Samuti saame (32.2) mõlemad pooled maatrikskorrutise kujul, (tulekuseks on üherealine ja -veeruline maatriks, s. o. skaalar), kui ξ^* all mõistame üherealist horisontaalmaatriksit. Siis

$$\sum_i x_i^* x_i = (x_1^*, x_2^*, x_3^*) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = (\xi, \xi);$$

Näitame nüüd, et ka olekuvektori komponendid teisenevad üleminekul ühest esitusest teise mõnesuguse unitaarse teisenduse kohaselt.

Lähtume q -esitusest, kus olekuvektori komponentide kogum on antud lainefunktsiooniga $\psi(q)$.

Arendame ta mingi operaatori \hat{L} omafunktsioonide $\varphi(\lambda, q)$ järgi, kus λ tähistab operaatori \hat{L} omaväärtust. Konkreetse mõttes vaatleme diskreetse omaväärtuse spektriga operaatorit. Siis

$$\psi(q) = \sum_{\kappa} \gamma'(\lambda_{\kappa}) \varphi(\lambda_{\kappa}, q), \quad (31.7)$$

kus $\gamma'(\lambda_{\kappa})$ on arenduse kordajad. Omafunktsioonide φ ortonormaalsuse tõttu võime kirjutada

$$\gamma'(\lambda_{\kappa}) = \int \varphi^*(\lambda_{\kappa}, q) \psi(q) dq. \quad (31.8)$$

Valemeid (31.7) ja (31.8) võrreldes näeme, et antud olekut

* Funktsioone $\varphi(\lambda_{\kappa}, q)$, mille järgi toimub arendus, nimetatakse baasifunktsioonideks.

võime kirjeldada kas funktsiooni $\psi(q)$ või $\gamma'(\lambda_k)$ abil. Seejärest nimetatakse $\psi(q)$ olekufunktsiooniks q -esituses, $\gamma'(\lambda_k)$ -olekufunktsiooniks L -esituses. $|\psi(q)|^2$ annab tõenäosuse tiheduse koordinaadi leidmiseks, $|\gamma'(\lambda_k)|^2$ annab tõenäosuse L väärtuse λ_k leidmiseks. Valemit (31.7) võime vaadelda kui üleminekuvalemit q -esitusest L -esitusele ($\psi(q)$ on avaldatud $\gamma'(\lambda)$ kaudu), valemit (31.8) - üleminekuvalemina L -esitusest q -esitusele.

Vaatleme operaatorit \hat{M} , mille omafunktsioonid olgu $\chi(\mu, q)$, kus μ on \hat{M} omaväärtused. Ülemineku q -esitusest M -esitusele võime teostada valemi

$$\psi(q) = \sum_p \gamma(\mu_p) \chi(\mu_p, q) \quad (31.9)$$

abil, kusjuures arenduse kordajad $\gamma(\mu_p)$ avalduvad kujul:

$$\gamma(\mu_p) = \int \chi^*(\mu_p, q) \psi(q) dq. \quad (31.10)$$

Valemite (31.8) ja (31.9) abil leiame üleminekuvalemi L -esitusest M -esitusele:

$$\gamma'(\lambda_k) = \sum_p u(\lambda_k, \mu_p) \gamma(\mu_p), \quad (31.11)$$

kus

$$u(\lambda_k, \mu_p) = \int \varphi^*(\lambda_k, q) \chi(\mu_p, q) dq \quad (31.12)$$

on teisendusfunktsioon.

Analoogiliselt (valemeist (31.10) ja 7):

$$\gamma(\mu_p) = \sum_k \tau(\mu_p, \lambda_k) \gamma'(\lambda_k), \quad (31.13)$$

kus

$$\tau(\mu_p, \lambda_k) = \int \chi^*(\mu_p, q) \varphi(\lambda_k, q) dq. \quad (31.14)$$

Seega

$$\tau(\mu_p, \lambda_k) = U^*(\lambda_k, \mu_p). \quad (31.15)$$

Valemitest (31.11) ja (31.13) saame:

$$\gamma'(\lambda_k) = \sum_{\mu} \left(\sum_p U(\lambda_k, \mu_p) \tau(\mu_p, \lambda_{k'}) \right) \gamma'(\lambda_{k'}),$$

millest

$$\sum_p U(\lambda_k, \mu_p) U^*(\lambda_{k'}, \mu_p) = \delta_{kk'}. \quad (31.16)$$

Analoogiliselt saab näidata, et

$$\sum_k \tau(\mu_p, \lambda_k) \tau^*(\mu_{p'}, \lambda_k) = \delta_{pp'}. \quad (31.17)$$

Valemeid (31.11) ja (31.13), samuti (31.16) ja (31.17)

saab tõlgendada maatriksseostena.

Vaatleme näiteks valemis (31.11) osinevat lainefunktsiooni $\gamma'(\lambda_k)$ üheveerulise maatriksina γ' , mille rida on määratud täisarvuga k , ning tähistame $\gamma'(\lambda_k) \equiv \gamma'_k$. Analoogiliselt märgime $\gamma(\mu_p) \equiv \gamma_p$. Kui indeksele k ja p omistame kõik võimalikud väärtused, võime teisendusfunktsiooni $U(\lambda_k, \mu_p)$ tõlgendada maatriksina, mille elemente tähistame järgmiselt:

$$U(\lambda_k, \mu_p) \equiv U_{kp}. \quad (31.18)$$

Neid tähistusi kasutades kirjutame seosed (31.11, 13, 16, 15) vastavalt:

$$\gamma'_k = \sum_p U_{kp} \gamma_p, \quad (31.11')$$

või ilma komponentide indeksiteta $\gamma' = U \gamma$;

$$\gamma_p = \sum_k U_{pk}^+ \gamma'_k \quad \text{või} \quad \gamma = U^+ \gamma'. \quad (31.13')$$

(Siin oleme arvestanud, et (31.15, 18) põhjal $\tau(\mu_p, \lambda_k) = U_{kp}^* = U_{pk}^+$.)

$$\sum_p U_{kp} U_{p'k}^+ = \sum_p U_{kp} U_{pk}^+ = \delta_{kk'} \quad \text{või} \quad U U^+ = I; \quad (31.16')$$

$$\sum_k U_{pk}^+ (U_{p'k}^+)^* = \sum_k U_{pk}^+ U_{kp'} = \delta_{pp'} \quad \text{või} \quad U^+ U = I. \quad (31.17')$$

(Siin oleme arvestanud, et $(U_{p'k}^+)^* = (U_{kp'})^* = U_{kp'}$)

Arvutame olekufunktsiooni γ' normi ruudu N^2 (val.

(3.1), (31.2)). Kuna valemist (31.11') järgneb, et $\gamma_k'^* = \sum_{p'} U_{kp'}^* \gamma_{p'}^* = \sum_{p'} U_{p'k}^+ \gamma_{p'}^*$, saame (silmas pidades ka (31.17')):

$$N^2 = \sum_k \gamma_k'^* \gamma_k' = \sum_{pp'} U_{p'k}^+ U_{kp} \gamma_{p'}^* \gamma_p =$$

$$\sum_{pp'} \delta_{pp'} \gamma_{p'}^* \gamma_p = \sum_p \gamma_p^* \gamma_p. \quad (31.19)$$

Viimane valem on täiesti analoogiline valemiga (31.4). (31.11' ja 13') on analoogilised valemiga (31.3) ning (31.16' ja 17') vastavalt valemiga (31.5) või (31.5').

Tulemuse saame kokku võtta järgmiselt.

Mikroobjekti igale olekule vastab vektor üldistatud Hilberti ruumis. Selle vektori komponentide kompleks fikseeritud baasis kujutab olekufunktsiooni antud esituses. Üleminekut ühest esitusest teise kirjeldab unitaarne maatriks U , mis jätab invariantseks olekuvektori pikkuse (olekufunktsiooni normi). U sõltub ainult esitustest, mille vahel üleminek toimub. Kui need on fikseeritud, teisenevad kõik olekufunktsioonid ühte moodi, s. o. ühe ja selle sama maatriksi U abil.

Kui suuruste L ja M spekter on pidev, peame summa asendama integraaliga üle kõikide omaväärtuste λ , või μ .

32. Operaatorite esitused.

Eelmises punktis näitasime, et igale olekule võime vastavusse seada vektori üldiselt lõpmatudimensionaalses vektorruumis. Kuna iga vektori komponendid avalduvad põhimõtteliselt sama ruumi mistahes vektori komponentide linesarkombinatsioonidena, on kõik eeskirjad, mis seavad ühele vektorile vastavusse teise, esitatavad mõnesuguste maatriksite kujul. Teisiti öeldes: igat operaatorit vektorruumis esitab maatriks, mille elemendid sõltuvad baasi valikust.

Vaatleme, millised maatriksid kirjeldavad füüsikalisi suursusi ja kuidas nad teisenevad üleminekul ühest esitusest teise, s. o. üleminekul ühest baasist teise. Aluseks võtame jälle q -esituse. Oletame, et q -esituses on füüsikaliste suurustele vastavusse seatud operaatorite kuju teada.

Olgu

$$\varphi(q) = \hat{L} \psi(q). \quad (32.1)$$

Läheme üle mõnesugusele M -esitusele, s. t. arendame funktsioonid $\varphi(q)$ ja $\psi(q)$ operaatori M omafunktsioonide $\chi(\mu, q)$ järgi. Olgu arenduse kordajad vastavalt $\gamma(\mu)$ ja $\beta(\mu)$, mis on olekufunktsioonid M -esituses. Valem, mis seob funktsiooni φ funktsiooniga β , näitabki, mida mõista operaatorina \hat{L} M -esituses. Leiame mainitud seose.

Olgu

$$\varphi(q) = \sum_{\kappa} \gamma(\mu_{\kappa}) \chi(\mu_{\kappa}, q), \quad (32.2)$$

$$\psi(q) = \sum_{\kappa} \beta(\mu_{\kappa}) \chi(\mu_{\kappa}, q). \quad (32.3)$$

Avaldame $\gamma(\mu_k)$ $\beta(\mu)$ kaudu, arvestades seost (32.1) ja funktsioonide \mathcal{X} ortonormeeritust. Seosest (32.2):

$$\gamma(\mu_k) = \int \mathcal{X}^*(\mu_k, q) \varphi(q) dq. \quad (32.4)$$

Seoste (33.1, 3, 4) kohaselt

$$\begin{aligned} \gamma(\mu_k) &= \int \mathcal{X}^*(\mu_k, q) \hat{L} \psi(q) dq = \int \mathcal{X}^*(\mu_k, q) \sum_n \hat{L} \beta(\mu_n) \cdot \\ &\cdot \mathcal{X}(\mu_n, q) dq = \sum_n \int \mathcal{X}^*(\mu_k, q) \hat{L} \mathcal{X}(\mu_n, q) dq \beta(\mu_n). \end{aligned} \quad (32.5)$$

Tähistame

$$\int \mathcal{X}^*(\mu_k, q) \hat{L} \mathcal{X}(\mu_n, q) dq = L_{kn}. \quad (32.6)$$

Siis omandab (32.5) maatriksilementidevahelise seose kuju:

$$\gamma(\mu_k) = \sum_n L_{kn} \beta(\mu_n). \quad (32.7)$$

Järelikult maatriksi L elementidega L_{kn} , mis on määratud valemiga (32.6), ongi operaator \hat{L} M -esituses, sest ta seob γ ja β .

Kui operaator \hat{L} on hermiitiline, siis rahuldavad vastava maatriksi elemendid tingimust

$$L_{ik}^* = L_{ki} \text{ või } L_{ik}^+ = L_{ki}. \quad (32.8)$$

Niisuguseid tingimusi rahuldavat maatriksit nimetatakse hermiitiliseks. Pidades silmas γ ja β avaldise püstmaatriksitena, võime valemi (32.7) esitada maatrikskorrutise kujul (kasutamata indekseid)

$$\gamma = L \beta \quad (32.7')$$

Vaatleme, kuidas teiseneb maatriks L üleminekul M -esitusest mõnesugusele N -esitusele. Olgu vastavate suuruste tä-

histus: N -esituses γ', β', L' . Siis vastab seosele
(32.7') N -esituses seos

$$\gamma' = L' \beta'. \quad (32.7'')$$

Eelmise punkti põhjal (üleminekuvalemid (31.11') või (31.13')):

$$\gamma' = U \gamma; \quad \beta' = U \beta. \quad (32.9)$$

Avaldistest (32.7'', 9) saame:

$$U \gamma = L' U \beta$$

või vasakult U^+ -ga korrutades ja arvestades U unitaar-
sust,

$$\gamma = U^+ L' U \beta. \quad (32.10)$$

Võrreldes avaldise (32.7') ja (32.10) näeme, et

$$L = U^+ L' U \quad \text{või} \quad L' = U L U^+.$$

Järelikult vastavad üleminekule ühest esitusest teise
teisendused:

$$\begin{aligned} \gamma &\rightarrow \gamma' = U \gamma, \\ L &\rightarrow L' = U L U^+, \end{aligned} \quad (32.12)$$

kus γ on mistahes olekufunktsioon ja L mistahes operaator. U on unitaarne maatriks (operaator), mis sõltub ainult esitustest, mida ta seob, mitte aga vaadeldavatest olekutest ega ka rakendatavatest operaatoritest (vrd. valem (31.12)).

Seos (32.11) garanteerib maatriksi L' hermitilisuse, kui L on hermitiline. Täpsemalt, kui $L^+ = L$, siis

$$\begin{aligned} (L')^+ &= (U L U^+)^+ = (U^+)^+ L^+ U^+ = U L^+ U^+ = \\ &= U L U^+ = L'. \end{aligned}$$

33. Omaväärtuste ja keskväärtuste arvutamine
maatriksesituses.

Näitame, et iga operaator tema enda esituses on diagonaalmaatriks, mille diagonaalelementideks on operaatori omaväärtused.

Lähtume operaatori \hat{L} konkreetse maatrikslemendi avaldisest (32.6), kus funktsioonid φ asendame \hat{L} omafunktsioonidega $\varphi(\lambda, q)$. Siis

$$L_{kn} = \int \varphi^*(\lambda_k, q) \hat{L} \varphi(\lambda_n, q) dq. \quad (33.1)$$

Omaväärtuse definitsiooni kohaselt

$$\hat{L} \varphi(\lambda_k, q) = \lambda_k \varphi(\lambda_k, q), \quad (33.2)$$

millest

$$L_{kn} = \int \varphi^*(\lambda_k, q) \lambda_n \varphi(\lambda_n, q) dq = \lambda_n \delta_{kn}. \quad (33.3)$$

Olgu γ suvaline olekufunktsioon L -esituses, mille väärtuse kohal λ_k märgime sümboliga $\gamma(\lambda_k) \equiv \gamma_k$. Operaatori \hat{L} rakendamine funktsioonile γ annab siis (val. (32.7) ja (33.3)):

$$\sum_n L_{kn} \gamma_n = \sum_n \lambda_n \delta_{kn} \gamma_n = \lambda_k \gamma_k \equiv \lambda_k \gamma(\lambda_k). \quad (33.4)$$

Valem (33.4) kehtib mistahes k korral. Järelikult tähendab operaatori rakendamine tema enda esituses olekufunktsiooni korrutamist vastava omaväärtusega. Seda tõsiasi oleme koordinaatesituse korral eespool korduvalt kasutanud. Koordinaatesitus on omaesituseks ka mistahes operaatorile, mis on koordinaatide funktsioon (nagu näit. potentsiaalne energia $M(\vec{r})$ Hamiltoni operaatori avaldises). Niisuguse ope-

raatori rakendamine koordinaatesituses tähendab kooskõlas valemiga (33.4) lihtsalt olekufunktsiooni $\psi(\vec{r})$ korrutamist funktsiooniga $u(\vec{r})$.

Vaatleme omaväärtusprobleemi, kui operaatorid on esitatud maatriksitena. Oletame, et operaatori \hat{L} kuju mingisuguses esituses on teada. Olgu see näiteks maatriks L' . Selleks et leida \hat{L} omaväärtusi, peame ta viima diagonaal-kuju. Teiste sõnadega: peame leidma unitaarse maatriksi u , mis seob antud esitust L -esitusega. Tähistagu operaatorit \hat{L} tema enda esituses diagonaalmaatriks L_D , s. t.

$$(L_D)_{ik} = \lambda_k \delta_{ik}. \quad (33.5)$$

Kooskõlas valemiga (32.12) leiame u tingimusest:

$$L' = u L_D u^+ \text{ või } L_D = u^+ L' u = u^{-1} L' u. \quad (33.6)$$

Korrutame viimast seost vasakult maatriksiga u , siis saame:

$$u L_D = L' u,$$

või komponentides

$$\sum_k L'_{ik} u_{kl} = \sum_k u_{ik} (L_D)_{kl} = \sum_k u_{ik} \lambda_l \delta_{kl} = \lambda_l u_{il}. \quad (33.7)$$

Kui i -le järjest väärtusi omistada, saame lineaarse homogeense võrrandsüsteemi maatriks u l -nda veeru elementide jaoks:

$$\left. \begin{aligned} (L'_{11} - \lambda_l) u_{1l} + L'_{12} u_{2l} + \dots &= 0 \\ L'_{21} u_{1l} + (L'_{22} - \lambda_l) u_{2l} + \dots &= 0 \\ \dots &\dots \end{aligned} \right\} \quad (33.8)$$

Võrrandsüsteemil (33.8) on mittetriviaalseid lahendeid, kui

kordajate determinant on null, s. o.

$$\begin{vmatrix} (L'_{11} - \lambda_\ell) & L'_{12} & L'_{13} & \dots \\ L'_{21} & (L'_{22} - \lambda_\ell) & L'_{23} & \dots \\ L'_{31} & L'_{32} & (L'_{33} - \lambda_\ell) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = 0. \quad (33.9)$$

Võrrand (33.9) on karakteristlik võrrand maatriksi L' suhtes. Tema lahendeid nimetatakse maatriksi L' karakteristlikkudeks arvudeks e. omaväärtusteks.

Maatriksite teoorias tõestatakse, et hermiitilise maatriksi kõik karakteristlikud arvud on reaalsed. Seega on kõik lahendid λ_ℓ jaoks operaatori \hat{L} omaväärtused. Üheveerulised maatriksid $\begin{Bmatrix} u_{1\ell} \\ u_{2\ell} \\ \vdots \end{Bmatrix}$, mis leitakse võrrandsüsteemist (33.8), on maatriksi L' omavektoriteks.

Kui tähistame $u_{i\ell} = c_i$, võrrandi (33.9) mingi lahendi $\lambda_\ell^{(1)} = \lambda_1$, võime seose (33.7) põhjal omaväärtusprobleemi formuleerida kujus

$$\sum_k L'_{ik} c'_k = \lambda_1 c'_i, \text{ s.t. } L'c' = \lambda_1 c', \quad (33.10)$$

mis näitabki, et c' on omafunktsioon.

Näitame, et operaatori omaväärtused on unitaarsed invariandid.

Rakendame võrrandile (33.10) unitaarset maatriksit \bar{u} , saame

$$\bar{u} L' c' = \bar{u} L' \bar{u} + \bar{u} c' = \lambda_1 \bar{u} c', \quad (33.11)$$

Tähistades

$$\bar{u} L' \bar{u} + = L; \quad \bar{u} c' = c, \quad (33.12)$$

saame

$$Lc = \lambda_1 c. \quad (33.13)$$

Võrrand (33.13) on samuti omaväärtusprobleemi võrrand sama omaväärtuse λ_1 korral. Järelikult: operaatori omaväärtused ei sõltu sellest, missuguses esituses me nad leiame.

Operaatori keskväertus maatriksesituses on leitav valemitest

$$\bar{L} = c^+ L c, \quad (33.14)$$

kusjuures c^+ on esitatav üherealise ja lõpmatuveerulise maatriksina, s. t. c^+ on c suhtes adjungeeritud. Olekufunktsioonide normeeritus avaldub kujul

$$c + c = 1. \quad (33.15)$$

(33.15) näitab, et c on üheveeruline unitaarne maatriks.

Kui

$$c = u c', \quad L = u L' u^+, \quad (33.16)$$

siis

$$c^+ = (u c')^+ = c'^+ u^+ \quad (33.17)$$

ning

$$c^+ c = c'^+ c'; \quad c^+ L c = c'^+ L' c'. \quad (33.18)$$

Seega on keskväertus ja olekufunktsioonide norm unitaarsed invariandid.

Operaatorite teisenemiseeskirjadest (32.11) järgneb:

- 1) Kui kahe operaatori kommutaator on harilik arv, siis tal on sama väärtus kõikides esitustes.
- 2) Kommuteeruvad operaatorid on üheaegselt diagonaalkujju

viidavad, s. t. leidub niisugune unitaarne maatriks, mis teisendab diagonaalkujju kõik omavahel kommuteeruvad hermiitilised operaatorid.

Need tulemused on enesestmõistetavad, kui silmas pidada, et esituse valik tähendab baasi fikseerimist. Baasi kui matemaatilise abivahendi omadused ei või kajastuda mingisugustes füüsikalistes tulemustes.

34. p - ja q -esitus maatrikskujus.

Üldistame maatriksformalismi juhule, kui baasivektoriteks on pideva spektriga operaatori omavektorid. Maatriksite rea- ja veeruindeksid moodustavad siin kontinuumi.

Näiteks vaatleme koordinaati x p -esituses. Impulsi omafunktsioonidel on kuju (vrd. valem (16.7)):

$$\varphi(p, x) = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}. \quad (34.1)$$

Valemi (32.6) põhjal

$$\begin{aligned} \alpha_{pp'} &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-i\frac{p}{\hbar}x} x e^{i\frac{p'}{\hbar}x} dx = \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p'} \left\{ \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{i\frac{(p'-p)}{\hbar}x} dx \right\} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p'} \delta(p'-p). \end{aligned} \quad (34.2)$$

Valem (34.2) annab \hat{x} maatrikskujus, kus nullist erinevad on ainult diagonaalelemendid.

Avaldis (34.2) parema poole saame esitada tavalise diferentseerimisoperaatorina, kui valemit (32.7) arvestades kirjutame

$$\int \alpha_{pp'} C(p') dp' = C'(p), \quad (34.3)$$

kusjuures

$$\int x_{pp'} C(p') dp' = \frac{\hbar}{i} \int \frac{\partial}{\partial p'} \delta(p'-p) C(p') dp' = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial C(p)}{\partial p}.$$

Seega impulssesituses

$$\hat{x} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}, \quad (34.4)$$

\hat{x} x -esituses võime kirjutada

$$x_{xx'} = x' \delta(x-x'), \quad (34.5)$$

sest kui

$$\int x_{xx'} \psi(x') dx' = \varphi(x)$$

$$\text{siis } \varphi(x) = \int x' \delta(x-x') \psi(x') dx' = x \psi(x), \quad (34.6)$$

mis on tavaline tulemus.

Analoogiliselt

$$p_{xx'} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x-x'). \quad (34.7)$$

Mistahes operaatorit $\hat{L} = L\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, x\right)$ võime esitada

maatrikskujus, kasutades maatriksite liitmise ja korrutamise üldistatud eeskirju

$$A_{xx'} + B_{xx'} = C_{xx'} ;$$

$$\int A_{xx''} B_{x''x'} dx'' = C_{xx'} \quad (34.8)$$

ning valemeid (34.5) ja (34.7).

Näiteks

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \mathcal{U}(x) \quad \text{on } x \text{-esituses}$$

$$H_{xx'} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \delta(x-x') + \mathcal{U}(x') \delta(x-x').$$

Analoogiliselt näiteks

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

avaldub p -esituses kujul:

$$H_{pp'} = \frac{p'^2}{2m} \delta(p-p') - \frac{\hbar^2 m \omega^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \delta(p-p').$$

Praktilist huvi pakub energia ehk E -esitus. Kui on teada operaatori kuju koordinaatesituses ning energia omafunktsioonid $\psi_n(q)$, siis operaatori \hat{L} kuju E -esituses on

$$L_{mn} = \int \psi_m^*(q) \hat{L} \psi_n(q) dq. \quad (34.9)$$

Rakenduslikes probleemides pole niivõrd oluline maatriksi L_{mn} leidmine tervikult, vaid konkreetsete maatrikselmenti-de arvutamine.

35. Schrödingeri võrrand maatrikskujus.

Mistahes funktsioon $\psi(x, t)$ avaldub baasifunktsioonide* $\varphi(x)$ kaudu järgmiselt:

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n(t) \varphi_n(x) \quad (35.1)$$

Schrödingeri võrrand

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad (35.2)$$

on esitatav kujus

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{dc_m}{dt} = \sum_n H_{mn} c_n, \quad (35.3)$$

kus

$$H_{mn} = \int \varphi_m^*(x) \hat{H} \varphi_n(x) dx. \quad (35.4)$$

* Et q -esitus on aluseks võetud, siis nimetame baasifunktsioonideks baasivektorite projektsioone koordinaadi omavektoreile.

Kui φ_n on operaatori \hat{H} omafunktsioonid, siis

$$H_{mn} = E_n \delta_{mn} \quad (35.5)$$

ja saame

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{dc_m}{dt} = E_m c_m, \quad (35.6)$$

millest

$$c_m(t) = c_m(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t}. \quad (35.7)$$

Arvutame operaatori ajalise tuletise energiaesituses.

Valemi (14.10) põhjal

$$\frac{d}{dt} (\bar{L}) = \overline{\left(\frac{dL}{dt} \right)}, \quad (35.8)$$

kusjuures

$$\bar{L} = \sum_{n,m} c_n^*(t) L_{nm} c_m(t) \quad (35.9)$$

valemi (33.14) põhjal.

Arvestades veel seost (35.6) saame:

$$\frac{d}{dt} \bar{L} = \sum_{n,m} \frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) c_n^* L_{nm} c_m = \sum_{nm} e_n^* (i\omega_{nm} L_{nm}) c_m \quad (35.10)$$

või (35.8) põhjal

$$\left(\frac{dL}{dt} \right)_{n,m} = i\omega_{nm} L_{nm}, \quad (35.11)$$

kus

$$\omega_{nm} = \frac{1}{\hbar} (E_n - E_m).$$

Kui maatrikseid vaadelda ajast sõltuvatena, s. o. defineerida valemiga

$$L_{mn}(t) = \int \varphi_m^*(x) e^{\frac{iE_n t}{\hbar}} L e^{-\frac{iE_m t}{\hbar}} \varphi(x) dx, \quad (35.12)$$

siis kehtib ilmselt

$$\frac{dL_{mn}(t)}{dt} = i\omega_{mn} L_{mn}(t) \quad (35.13)$$

ning

$$\frac{dL_{mn}(t)}{dt} = \left(\frac{dL}{dt}\right)_{mn} \quad (35.14)$$

Võrreldes valemeid (35.7) ja (35.12) vastavalt valemitega (13.5) ja (14.4), näeme, et unitaarne operaator $\hat{S}(t)$, mis seob Heisenbergi ja Schrödingeri esitusi, on energiaesituses diagonaalne:

$$S(t)_{mn} = e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} \delta_{mn} \quad (35.15)$$

Kui Hamiltoni operaator ei sõltu vahetult ajast, võime üldiselt kirjutada

$$\hat{S}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \quad (35.16)$$

Kui avaldame siit \hat{H} , saame

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} \hat{S}^+ \quad (35.17)$$

Valem (35.17) on üldisem valemist (35.16), kuna ta järgneb otseselt Schrödingeri võrrandist.

Esituste teooria annab piltliku tõlgenduse Heisenbergi ja Schrödingeri esituste erinevusele. Schrödingeri esituses ei muutu baasivektorid aja kulgedes, mistõttu oleku ajaline muutus kajastub olekuvektori komponentides (olekufunktsioon sõltub ajast). Heisenbergi esituses kasutatakse ajas muutuvaid baasivektoreid (operaatorite maatriksid sõltuvad ajast), mistõttu nendega koos muutuivate olekuvektorite projektsioonid (olekufunktsioonid) jäävad konstantseiks.

36. Tihedusmaatriks.

Kõikidel seni vaadeldud juhtudel oletasime, et füüsikalise objekti A olekuid kirjeldab täielikult olekufunktsioon $\psi(q, t)$, mis on arvutatav Schrödingeri võrrandist fikseeritud algtingimustel. Alghetke $t = t_0$ võime valida nii, et $\psi(q, t_0)$ oleks mõnesuguse A -d iseloomustava füüsikaliste suuruste täieliku kompleksi K omafunktsioon, s. t. $\psi(q, t_0) = \psi_K(q)$. Objekti olekuid, millele vastab kindel olekufunktsioon, nimetatakse puhasteks olekuteks.

Üldjuhul ei tarvitse aga eelmainitud oletus kehtida.

Vaatleme näiteks objekti A , mis moodustab suurema süsteemi osa. Olgu q_1 A koordinaatide kompleks, q_2 - ülejäänud süsteemi koordinaadid. Oletame, et süsteemi tervikuna kirjeldab olekufunktsioon $\Psi(q_1, q_2)$. Kui A on interaktsioonis ülejäänud süsteemiga, ei ole $\Psi(q_1, q_2)$ esitatav korrutisena, milles üks tegur sõltuks ainult koordinaatidest q_1 , s. t. A olekuid ei saa sel korral kirjeldada kindla, ainult tema koordinaatidest sõltuva olekufunktsiooniga. Ka ei tarvitse $\Psi(q_1, q_2)$ ühelgi ajahetkel vastata olekule, kus allsüsteemi A suuruste mõnesugusel kompleksil K oleks kindel väärtus. Sel korral ütleme, et objekti A olek on segaolek. Kuid kvantmehhaanika põhiidee kohaselt peavad ka segaolekus olema määratud arvud w_{k_1} , w_{k_2} , ... , mis näitavad, misuguse tõenäosusega saame kompleksi K mõttes tema väärtusteks k_1 , k_2 , Nii-suguseid segaolekuid on võimalik kirjeldada tihedusmaatriksi abil.

Vaatleme esialgu puhtaid olekuid (α), mis on kirjeldatavad olekufunktsioonidega $\psi_\alpha(q_1)$. Arendame $\psi_\alpha(q_1)$ kompleksi K omafunktsioonide $\psi_\kappa(q_1)$ järgi:

$$\psi_\alpha(q_1) = \sum_{\kappa} C_{\kappa}^{\alpha} \psi_{\kappa}(q_1). \quad (36.1)$$

Defineerime puhtale olekule (α) vastava tihedusmaatriksi järgiselt:

$$\rho_{\alpha}(q, q') = \psi_{\alpha}(q) \psi_{\alpha}^{*}(q'), \quad (36.2)$$

või

$$\rho_{\alpha}(q, q') = \sum_{\kappa, \kappa'} \rho_{\alpha}(\kappa, \kappa') \psi_{\kappa}(q) \psi_{\kappa'}^{*}(q'), \quad (36.3)$$

kus

$$\rho_{\alpha}(\kappa, \kappa') = C_{\kappa}^{\alpha} C_{\kappa'}^{\alpha *} \quad (36.4)$$

on tihedusmaatriksi K -esituses. (Valem 36.3) annab seose tihedusmaatriksi q -esituse ja K -esituse vahel.)

Vaatleme edaspidi tihedusmaatriksit K -esituses.

Funktsioonide C_{κ}^{α} normeerimistingimusest,

$$\sum_{\kappa} |C_{\kappa}^{\alpha}|^2 = 1,$$

järgneb:

$$\sum_{\kappa} \rho_{\alpha} \equiv \sum_{\kappa} \rho_{\alpha}(\kappa, \kappa) = 1; \quad (36.5)$$

s. t. tihedusmaatriksi diagonaalelementide summa võrdub ühega. See on nn. normeerimistingimus tihedusmaatriksile ρ_{α} .

ρ_{α} diagonaalelementidel on ilmselt tõenäosuse tähendus:

$$1 \geq \rho_{\alpha}(\kappa, \kappa) = |C_{\kappa}^{\alpha}|^2 \geq 0. \quad (36.6)$$

S. t. $\rho_{\alpha}(\kappa, \kappa)$ annab tõenäosuse, et mõttes suurust K olekus (α) saame tulemuseks κ .

Tihedusmaatriks $\rho_{\alpha}(\kappa, \kappa')$ on hermitiline:

$$\rho_{\alpha}(k, k') = \rho_{\alpha}^{*}(k', k). \quad (36.7)$$

Moodustame tihedusmaatriksi ρ_{α} ruudu:

$$\begin{aligned} \rho_{\alpha}^2(k, k') &= \sum_n \rho_{\alpha}(k, n) \rho_{\alpha}(n, k') = \\ &= \sum_n C_k^{\alpha} C_n^{\alpha *} C_n^{\alpha} C_{k'}^{\alpha *} = C_k^{\alpha} C_{k'}^{\alpha *}, \end{aligned}$$

s. t.

$$\rho_{\alpha}^2(k, k') = \rho_{\alpha}(k, k'). \quad (36.8)$$

Maatriksit, mille ruut võrdub ta endaga, nimetatakse idempotentseks. Valem (36.8) näitab, et puhtale olekule vastav tihedusmaatriks on idempotentne.

Mistahes füüsikalist suurust F võime K -situses kirjeldada maatriksi $F_{k, k'}$, abil. Siis järgneb keskväertuse definitsioonist (33.14):

$$\begin{aligned} \langle F \rangle_{\alpha} &\equiv (\bar{F})_{\alpha} = \sum_{k, k'} C_k^{\alpha *} F_{k k'} C_{k'}^{\alpha} = \\ &= \sum_{k, k'} F_{k k'} C_{k'}^{\alpha} C_k^{\alpha *} = \sum_{k, k'} C_k^{\alpha} C_{k'}^{\alpha *} F_{k k'}, \end{aligned}$$

või kasutades ρ_{α} definitsiooni (36.4):

$$\langle F \rangle_{\alpha} = \text{Tr} (F \rho_{\alpha}) = \text{Tr} (\rho_{\alpha} F). \quad (36.9)$$

Üldistame nüüd tihedusmaatriksi definitsiooni segaolekule, mis sisaldab puhast olekut (α) tõenäosusega W_{α} . Olgu niisuguse segaoleku tihedusmaatriks defineeritud valemi-
ga:

$$\rho(k, k') = \sum_{\alpha} W_{\alpha} \rho_{\alpha}(k, k') \quad (36.10)$$

kusjuures tõenäosuste mõtte kohaselt

$$w_{\alpha} \geq 0; \quad \sum_{\alpha} w_{\alpha}^{\dagger} = 1. \quad (36.11)$$

Kasutades definitsiooni (36.10), ρ_{α} omadusi ja valemite (36.11) näeme otsekohe, et ka maatriks $\rho(\kappa, \kappa')$ rahuldab tingimusi (36.5, 6, 7), s. t.

$$\text{Tr } \rho \equiv \sum_{\kappa} \rho(\kappa, \kappa) = 1; \quad (36.5')$$

$$\rho(\kappa, \kappa') = \rho^{*}(\kappa', \kappa); \quad (36.7')$$

$$\rho(\kappa, \kappa) \geq 0. \quad (36.6')$$

$\rho(\kappa, \kappa)$ annab tõenäosuse, et mõttes suurust K segaolekus, saame ta väärtuseks κ .

Samuti võime arvutada füüsikalise suuruse F keskvaartuse valemist

$$\langle F \rangle = \text{Tr}(\rho F) = \text{Tr}(F \rho). \quad (36.9')$$

Kuid segaoleku tihedusmaatriks ei rahulda enam idempotentsuse nõuet (36.8). Järelikult võime tihedusmaatriksi omadust (36.8) vaadelda tunnuseks, et tihedusmaatriks vastab puhtale olekule.

Valemist (36.10) võime tihedusmaatriksite abil arvutada tõenäosuse (statistilise kaalu) w_{α} , millega segaolekus, mida kirjeldab tihedusmaatriks ρ , esineb puhas olek, mida kirjeldab tihedusmaatriks ρ_{α} . Selleks korrutame valemi (36.10) mõlemad pooli elementidega $\rho_{\alpha}(n, \kappa)$ ja summeerime üle κ . Saame:

$$\begin{aligned} \sum_{\kappa} \rho_{\alpha}(n, \kappa) \rho(\kappa, \kappa') &= \sum_{\alpha} w_{\alpha} \sum_{\kappa} \rho_{\alpha}(n, \kappa) \rho(\kappa, \kappa') = \\ &= \sum_{\alpha} w_{\alpha} c_n^{\alpha'} \left(\sum_{\kappa} c_{\kappa}^{\alpha'} c_{\kappa}^{\alpha} \right) c_{\kappa'}^{\alpha} = \sum_{\alpha} w_{\alpha} c_n^{\alpha'} \delta_{\alpha\alpha'} c_{\kappa'}^{\alpha} = \\ &= w_{\alpha'} \rho_{\alpha'}(n, \kappa'). \end{aligned}$$

Võib näha, et diagonaallementide summa ja arvestades tingimust (36.5), saame

$$\underline{W_{\alpha} = T_{\alpha} (\rho_{\alpha}, \rho)}. \quad (36.12)$$

Lõpuks tuletame liikumisvõrrandi tihedusmaatriksile. Pidades silmas Schrödingeri võrrandit funktsioonidele C_k^{α} k -esituses (valem (35.3) ning arvestades operaatori \hat{H} maatriksi hermiitilisust, saame:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho(k, k')}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha} W_{\alpha} \sum_n (H_{kn} C_n^{\alpha} C_{k'}^{\alpha*} - C_{kn}^{\alpha} C_n^{\alpha*} H_{nk'}) = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha} W_{\alpha} (H_{kn} \rho_{\alpha}(n, k') - \rho_{\alpha}(k, n) H_{nk'}). \end{aligned}$$

Arvestades ka paremal poolal definitsioonivalemit (36.10) ja minnes üle maatriks-sümboolikale (jättes ära elemendi indeksid), võime kirjutada

$$- \frac{\hbar}{i} \frac{d\rho}{dt} = [H, \rho]. \quad (36.13)$$

Esitatust võime teha järelduse, et tihedusmaatriks sobib olekute kirjeldamiseks sama hästi kui olekufunktsiooniga, kuid on viimasest üldisem, haarates ka segaolekuid.

Valemi (36.10) võime definitsiooni (36.4) arvestades esitada ka kujul

$$\rho(k, k') = \overline{(C_k C_{k'}^*)}, \quad (36.10')$$

kus kriips tähendab keskmistamist üle kõigi olekute (α).

Lähtudes tihedusmaatriksi definitsioonist (36.10') on nüüd hõlpus tuletada tihedusmaatriksit objekti A jaoks, mis on olekufunktsiooniga $\psi(q_1, q_2)$ kirjeldatava süsteemi osaks.

Ilmselt:

$$\rho(q_1, q_1') = \int H(q_1, q_2) H^*(q_1', q_2) dq_2. \quad (36.10'')$$

Tihedusmaatriks leiab laialdast rakendamist polarisatsiooniprobleemide uurimisel, kuna seal on tavaliselt tegemist mittetäielikult polariseeritud osakeste kimpudega, s. t. osakestega segaolekutes.

37. Impulssmoment maatriksesituses. Elektroni spin.

Vaatleme impulssmomenti komponente esituses, kus \hat{M}^2 ja \hat{M}_z on diagonaalsed. Selle esituse baasivektorid on määratud kahe kvantarvuga l ja m (vrd. § 18). Kuna operaatori \hat{M}^2 omaväärtused ei sõltu kvantarvust m (on võrdsed $\hbar^2 l(l+1)$), kus $l = 0, 1, 2, \dots$), võime ta esitada:

$$\hat{M}^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1.2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2.3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3.4 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (37.1)$$

Fikseerime kvantarvu l , siis

$$\hat{M}^2 = \hbar^2 l(l+1) I, \quad (37.1')$$

kus I tähistab ühikmaatriksit. Fikseeritud l korral sõltuvad \hat{M}_z omaväärtused ainult kvantarvust m . ($m = l, l-1, \dots, -l$) ning \hat{M}_z on $2l+1$ järku maatriks:

$$\hat{M}_z = \hbar \begin{pmatrix} l & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & l-1 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & -l \end{pmatrix}. \quad (37.2)$$

Kui (37.2) maatriksilemendi tähistame $(M_z)_{mm'} = \hbar m' \delta_{mm'}$, kulgevad maatriksi rea- ja veeruindeksid väärtusest l kuni $-l$, mitte alates arvust 1 kuni $2l + 1$. Maatriksid M^2 ja M_z on mõlemad sama järku, kui valemis (37.1) käsitleme maatriksit T $2l+1$ järku ühikmaatriksina.

Leiame operaatorite \hat{M}_x ja \hat{M}_y maatriksid. Vaatleme nende sõltuvust kvantarvust m .

Eespool näitasime (valemid 18.8)), et

$$\begin{aligned} (\hat{M}_x + i \hat{M}_y) \psi_m &= C_m^{(1)} \psi_{m+1}, \\ (\hat{M}_x - i \hat{M}_y) \psi_m &= C_m^{(2)} \psi_{m-1}, \end{aligned} \quad (37.3)$$

kus ψ_m , ψ_{m-1} ja ψ_{m+1} on \hat{M}_z omafunktsioonid, mis vastavad omaväärtustele $\hbar m$, $\hbar(m-1)$ ja $\hbar(m+1)$. $C_m^{(1)}$, $C_m^{(2)}$ on konstandid.

Arvestades funktsioonide ψ_m ortonormaalsust, saame seostest (37.3)

$$(M_x + i M_y)_{m'm} = C_m^{(1)} \delta_{m', m+1}; \quad (37.4)$$

$$(M_x - i M_y)_{m'm} = C_m^{(2)} \delta_{m', m-1}. \quad (37.5)$$

Konstandid $C_m^{(1)}$ ja $C_m^{(2)}$ on kvantarvudest l , m järgmises sõltuvuses (nende arvutamiseks vt. ül. 152 ja 153):

$$C_m^{(1)} = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)}; \quad C_m^{(2)} = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)}.$$

Operaatoritele \hat{M}_x ja \hat{M}_y saame järgmised maatrikskujud:

$$M_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2l} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{2l} & 0 & \sqrt{2(2l-1)} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2(2l-1)} & 0 & \sqrt{3(2l-2)} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (37.6)$$

$$M_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{2\ell} & 0 & 0 & \dots \\ i\sqrt{2\ell} & 0 & -i\sqrt{2(\ell-1)} & 0 & \dots \\ 0 & i\sqrt{2(\ell-1)} & 0 & -i\sqrt{3(2\ell-2)} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (37.7)$$

Kui osakesole omistada omaimpulsmoment e. spin, siis peame teda kvantmehaanikas kirjeldama operaatoritega $\hat{S} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ mis rahuldavad analoogilisi kommutatsioonieskirju nagu $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$, vt. §17. Pidades silmas eksperimentaalset fakti, et elektroni spinil võib olla ainult kaks projektsiooni, saame elektroni spini jaoks seosed:

$$2S+1=2, S=\frac{1}{2}, m_s = \pm\frac{1}{2}, (-S \leq m_s \leq +S), \quad (37.8)$$

kus S vastab kvantarvule ℓ , m_s - kvantarvule m .

Kuna maatriksid (37.6,7) on tuletatud ainult kommutatsioonieskirjadest ja silmas pidades esitust (\hat{M}_z diagonaalne, val. (37.2)), võime öeldu põhjal otsekohe kirjutada spinoperaatori maatrikskujude, asendades avaldistes (37.2, 6, 7) $\ell \rightarrow S = \frac{1}{2}$. Esituses, kus \hat{S}_z on diagonaalne, saame

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (37.9)$$

Maatrikseid

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (37.10)$$

nimetatakse Pauli spinmaatriksiteks.

Kuna

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I \quad (37.11)$$

sis on Pauli spinmaatriksite omaväärtusteks ± 1 . Tulemus (37.11) oi sõltu esitusest.

Vahetu arvutus näitab, et

$$\sigma_i \sigma_k = -\sigma_k \sigma_i = i \sigma_l; \quad (i, k, l) = (1, 2, 3) \text{ tsükli.} \quad (37.12)$$

või

$$\sigma_i \sigma_k + \sigma_k \sigma_i = 2 \delta_{ik}; \quad i, k = 1, 2, 3. \quad (37.13)$$

Maatriksid σ_i on antikommuteeruvad.

Arvestades impulssmomentide liitmise lauset* (vt. § 19!) võime järeldada, et elektroni kirjeldab kogumoment, mille operaatoril \hat{J} on järgmised omadused:

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_k] = 0; \quad [\hat{J}_i, \hat{J}_k] = i \hbar \varepsilon_{ikl} \hat{J}_l, \quad (37.14)$$

kusjuures

$$\hat{J} = \hat{M} + \hat{S} \quad (37.15)$$

ning \hat{J}^2 omaväärtustel on kuju

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad (37.16)$$

kus

$$j = l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}, \quad (l = 1, 2, \dots). \quad (37.17)$$

\hat{J}_z omaväärtustel on kuju

$$J_z = \hbar m_j, \quad (37.18)$$

kus

$$m_j = -j, -j+1, \dots, +j.$$

* § 19 tulemuste ülekandmine on õigustatud sellepärast, et kumbki liidetav \hat{J} avaldises (37.15) mõjub erinevatele suurustele, mistõttu \hat{M} ja \hat{S} võib vaadelda kui omavahel sõltumatute alasüsteemide impulssmomente.

Saab näidata (vrd. (19.6)), et

$$[\hat{J}^2, \hat{M}^2] = 0, [\hat{J}^2, \hat{S}^2] = 0. \quad (37.19)$$

Järelikult on \hat{J}^2 , \hat{J}_z , \hat{M}^2 , \hat{S}^2 samaaegselt mõõdetavad suurused.

Eelmistega samaaegselt mõõdetavad suurused on veel

$$(\vec{M}\vec{S}) \quad \text{ning} \quad (\vec{J}\vec{S}),$$

milles on lihtne veenduda, kui kasutada operaatorite \hat{M} , \hat{S} ja \hat{J} kommutatsioonilisi omadusi ning \hat{J} finitiivlooni.

Kuna \hat{S} kommuteerub iga operaatoriga, mis sisaldab osakese koordinaate või nende tuletiste operaatoreid, siis tsentraalsümmeetrilises väljas võime mitterelativistliku elektroni olekuid iseloomustada kvantarvudega n, l, j, m_j või kvantarvudega n, l, m_l, m_s .

Atomis elektronile mõjuv väli on tsentraalsümmeetriline ainult esimeses lähenduses. Seda sümmeetriat lõhuvad peamiselt elektronide magnetmomentide interaktsioonid. Sellepärast on matemaatilise lihtsuse seisukohalt oluline, kumma kvantarvude nelikuga iseloomustatud esitust kasutame. Kui elektroni spini ja orbitaalse momendi interaktsioon on tugevam vastasmõjust teiste elektronide momentidega, on sobiv kasutada (n, l, j, m_j) -esitust, vastasel korral aga (n, l, m_l, m_s) -esitust.

38. Spini arvestavad olekufunktsioonid.

Kuna elektroni spinoperaatori kõiki komponente võime esitada kaherealiste ja -veeruliste maatriksitena, siis on sobiv spinmuutujast sõltuvaid olekufunktsioone esitada kahe-realiste püstmaatriksitena, s. o.

$$\psi(\vec{r}, \sigma) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \end{pmatrix}, \quad (38.1)$$

kus σ -ga on tähistatud spinile vastav vabadusaste. Kuna spini komponentidel võib olla ainult kaks omaväärtust, võib muutujal σ olla samuti ainult kaks väärtust σ_1 ja σ_2 .

$$\text{Integraal } \int |\psi(\vec{r}, \sigma_i)|^2 dV = \int |\psi_i(\vec{r})|^2 dV$$

annab tõenäosuse, et osake viibib olekus, kus ta spini komponent on iseloomustatud arvuga σ_i .

$$\text{Summa } \sum_{i=1}^2 |\psi(\vec{r}, \sigma_i)|^2 dV = \sum_{i=1}^2 |\psi_i(\vec{r})|^2 dV \quad \text{annab tõe-}$$

näosuse leida osakest ruumielemendis dV mistahes spini orientatsiooniga.

Siit järgneb normeerimistingimus spini arvestavate olekufunktsioonide jaoks

$$\sum_{i=1}^2 \int |\psi_i(\vec{r})|^2 dV = 1. \quad (38.2)$$

Seejuures

$$\sum_{i=1}^2 |\psi_i(\vec{r})|^2 = |\psi_1(\vec{r})|^2 + |\psi_2(\vec{r})|^2. \quad (38.3)$$

Valem (38.3) näitab, et ψ kaasfunktsiooni peame vaatlema kaheveerulise horisontaalmaatriksina ψ^+ :

$$\psi^+ = \left(\psi_1^*(\vec{r}) \quad \psi_2^*(\vec{r}) \right). \quad (38.4)$$

Vaatleme, kuidas käitub funktsioon (38.1) ruumi pöörete korral, s. t. leiame talle iseloomuliku teisendusoperaatori \hat{V} mis on defineeritud §-s 17.

Lähtume pöördeoperaatori \hat{T} avaldisest (17.7):

$$\hat{T} = \hat{V} - \delta\omega_{ik} x_k \frac{\partial}{\partial x_i}. \quad (17.7)$$

Pidades silmas valemeid (17.10) ning kasutades tähistusi $\delta\omega_{12} = -\delta\omega_{21} = \delta\varphi_3$; $\delta\omega_{23} = -\delta\omega_{32} = \delta\varphi_1$; $\delta\omega_{31} = -\delta\omega_{13} = \delta\varphi_2$, võime (17.7) kirjutada

$$\hat{T} = \hat{V} + \frac{i}{\hbar} \sum_k \hat{M}_k \delta\varphi_k \equiv \hat{V} + \frac{i}{\hbar} M_k \delta\varphi_k. \quad (38.5)$$

Siin tähendab $\delta\varphi_k$ infinitesimaalse pöörde nurka ümber k -nda telje, \hat{M}_k - selle telje suunalise orbitaalse impulssmomendi projektsiooni operaatorit.

Kirjutame valemi (38.5) esimese liidetava analoogilisel kujul, eraldades konstandi $\frac{i}{\hbar}$ ja nurgad $\delta\varphi_k$,

$$\hat{V} = \frac{i}{\hbar} \sum_k \hat{S}_k \delta\varphi_k \equiv \frac{i}{\hbar} S_k \delta\varphi_k. \quad (38.6)$$

Vastavalt §-s 17 esitatud kaalutlustele ei sõltu operaatoris \hat{S} ruumpunkti koordinaatidest ega mõju ka järelilikult olekufunktsiooni $\psi(\vec{r}, \sigma)$ ruumikoordinaatidele.

Operaatorile \hat{T} , mis isotroopses ruumis kommuteerub Hamiltoni operaatoriga, saame kuju:

$$\hat{T} = \frac{i}{\hbar} (\hat{S}_k + \hat{M}_k) \delta\varphi_k. \quad (38.7)$$

Järelilikult peavad isotroopses ruumis jäävatele suurustele, s. o. kogu impulssmomendi komponentidele vastama operaatorid $\hat{S}_k + \hat{M}_k$ ($k = 1, 2, 3$).

Arvestades elektroni kogumomendi avaldist (37.15), näeme, et elektroni korral on operaatorid \hat{S}_k avaldatavad järgmiselt:

$$\hat{S}_\kappa = \frac{\hbar}{2} \sigma_\kappa, \quad (\kappa = 1, 2, 3), \quad (38.8)$$

kus σ_κ on Pauli spinmaatriksid.

Operaatori \hat{V} definitsioonist (17.1) lähtudes ning kasutades (38.6, 8) saame olekufunktsiooni $\psi(\vec{n}, \sigma)$ komponentide $\psi_j(\vec{n})$ jaoks järgmise teisenduseeskirja:

$$\psi_j'(\vec{n}') = \sum_{\ell=1}^2 \left[\delta_{j\ell} + \frac{i}{2} \sum_{\kappa=1}^3 \delta\varphi_\kappa (\sigma_\kappa)_{j\ell} \right] \psi_\ell(\vec{n}); \quad (38.9)$$

$$(j = 1, 2).$$

Kahekomponendilisi suurusi, mis 3 ruumi infinitesimaalsetel pööretel teisevad eskirja (38.9) kohaselt nimetatakse I järku spinooriteks. (Spinoori teisenemiseeskirjade kohta vt. ülesannete kogu lisa B p. 6. Spiniga seotud probleemistiku kohta vt. ka ül. 144-172). Seega on elektroni spini arvestavad olekufunktsioonid geomeetriliste omaduste poolest spinoorid. Erinevalt tensortüüpi suurustest (ka skaalarist), on spinoor igas ruumipunktis määratud ainult märgi täpsuseni. Selles on lihtne veenduda, kui vaatleme näiteks pööret ümber z-telje 2π võrra, s. o. tuleme endisesse punkti tagasi. Osutub, et pärast sellist operatsiooni on spinoori märk vastupidine. Siit teeme järelduse, et antud punktis võime spinoorit defineerida ainult märgi täpsuseni (siit ka põhjus, miks klassikalisi suurusi ei saa kirjeldada spinoorite abil, kuna klassikalises füüsikas funktsiooni väärtused vastavad vahetult mõõdetavatele suurustele.

Valemist (38.9) järgneb, kui $\delta\varphi_1 = \delta\varphi_2 = 0; \delta\varphi_3 = \delta\varphi$,

$$\psi_j'(\vec{n}') = \sum_{\ell=1}^2 \left[\delta_{j\ell} + \frac{i}{2} \delta\varphi (\sigma_3)_{j\ell} \right] \psi_\ell(\vec{n})$$

või lõpliku pöördnurga φ korral

$$\psi_j'(\vec{n}') = e^{\frac{i}{2}\varphi(\sigma_3)_j} \psi_e(\vec{n}) =$$

$$= \left[\cos \frac{\varphi}{2} \delta_{j,e} + i(\sigma_3)_j \sin \frac{\varphi}{2} \right] \psi_e(\vec{n}). \quad (38.10)$$

Valemi (38.10) tuletamisel on arvestatud võrrandit

$$\frac{\delta\psi}{\delta\varphi} = \frac{i}{2} \sigma_3 \psi$$

koos "algtingimusega" $\psi(\vec{n}') = \psi(\vec{n})$, kui $\delta\varphi = 0$, ja

$$e^{\frac{i}{2}\varphi\sigma_3} = \text{reaksarendust:}$$

$$e^{\frac{i}{2}\varphi\sigma_3} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \left(\frac{i}{2}\varphi\right)^{2n} \sigma_3^{2n} +$$

$$+ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{i}{2}\varphi\right)^{2n+1} \sigma_3^{2n+1} =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\left(\frac{\varphi}{2}\right)^{2n}}{(2n)!} + i\sigma_3 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\left(\frac{\varphi}{2}\right)^{2n+1}}{(2n+1)!},$$

kuna $\sigma_3^{2n} = I$, $\sigma_3^{2n+1} = \sigma_3$. Esimene summa defineerib $\cos \frac{\varphi}{2}$, teine - $\sin \frac{\varphi}{2}$. Kui $\varphi = 2\pi$ ($\vec{n}' = \vec{n}$), järgneb valemist (38.10), et $\psi_j'(\vec{n}') = -\psi_j(\vec{n})$, m. o. t. t. ($j=1,2$)

39. Pauli võrrandid.

Elektroni spinist tingitud efektid avalduvad eelkõige magnetväljas (vt. ül. 182-196).

Klassikalisest füüsikast on teada, et elektronmagnetväljas vektorpotentsiaaliga \vec{A} on kanoonilisel impulsil

$$p_k = \frac{\partial L_0}{\partial \dot{x}_k}, \quad k = 1, 2, 3,$$

üldistatud kuju (L_0 on lagranžiaan ilma väljata):

$$p_k = \frac{\partial L_0}{\partial \dot{x}_k} + \frac{e}{c} A_k = P_k + \frac{e}{c} A_k, \quad (39.1)$$

kus P_k on nn. kineetiline impulss, e - osakese laeng.

Seega peame kineetilise energia avaldises kineetilised impulsid avaldama kanooniliste kaudu järgmiselt:

$$P_k = p_k - \frac{e}{c} A_k; \quad (39.2)$$

Hamiltoni funktsioon omandab kuju

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_k - \frac{e}{c} A_k \right)^2 + e\varphi, \quad (39.3)$$

kus φ on elektromagnetvälja skalaarne potentsiaal.

Kvantmehhaanikas

$$p_k \rightarrow \hat{p}_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k}$$

ja Hamiltoni operaator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi. \quad (39.4)$$

Oletame, et osakest iseloomustab spin, millega on seotud oma magnetiline moment. Arvestades katsest teadaolevat magnetilise ja mehhaanilise momendi võrdelisust, võime magnetmomendi $\vec{\mu}$ esitada

$$\vec{\mu} = \beta \vec{S} \quad (39.5)$$

kus β on osakest iseloomustav võrdetegur. Potentsiaalselo energiale peame nüüd lisama magnetvälja ja magnetmomendi vastastikuse mõju energia $-\beta \vec{\mathcal{H}} \vec{S}$.

Seega nullist erineva spiniga osakese korral

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \beta (\vec{\mathcal{H}} \vec{S}) + e\varphi. \quad (39.6)$$

Kuna \vec{A} ja \hat{p} ei kommuteeru:

$$[\vec{p}, \vec{A}] = \frac{\hbar}{i} (\nabla \vec{A}) \quad \text{üldjuhul,}$$

saame

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc} (\vec{A} \vec{p} + \vec{p} \vec{A}) + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 - \beta (\vec{\mathcal{H}} \vec{S}) + e\varphi. \quad (39.7)$$

Vastav Schrödingeri võrrand *

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{ie\hbar}{mc} (\vec{A} \nabla) + \frac{e^2}{2mc^2} (\vec{A})^2 - \frac{e\hbar}{2mc} (\vec{\mathcal{H}} \vec{\sigma}) + e\varphi \right] \psi = E\psi \quad (39.8)$$

kannab Pauli võrrandi nime. Pauli võrrandis on arvestatud, et

$\beta = \frac{e\hbar}{mc}$ elektroni korral e - elektroni laeng. Võrrand (39.8) on õige tingimusel, et $(\nabla \vec{A}) = 0$, mis on paikapidav kiirguse puhul (nn. allikvaba kiirgus) ja ka homogeensetes magnetväljades, näiteks

$$\vec{A} = \frac{1}{2} [\vec{\mathcal{H}}_0 \times \vec{r}]. \quad (39.9)$$

Pauli võrrandis on ψ kahekomponendiline suurus. Pauli võrrand arvestab elektroni spini mitterelativistlikult. Me võime (39.8) kirjutada kahest komponendist koosneva süsteemina, kui asendada maatriksid σ_k nende ilmutatud kujuga.

Otsene kontroll näitab, et võrrand (39.8) on invariantne gradientteisenduse

$$\begin{aligned} \vec{A}' &= \vec{A} + \nabla f, \\ \varphi' &= \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t} \end{aligned} \quad (39.10)$$

suhtes, kui samaaegselt lainefunktsioon teiseneb eeskirja

* Märgime, et Pauli võrrand on tuletatav Dirac'i võrrandist mitterelativistliku piirjuhuna (vt. ülesannete kogu liisa A p. 7).

$$\psi' = e \frac{i e}{\hbar c} \phi \psi \quad (39.11)$$

kohaselt. Siin on ϕ meelevaldne funktsioon koordinaatidest ja ajast. Näeme, et statsionaarsete olekute faasid on määratud meelevaldse funktsiooni täpsuseni.

Kui Hamiltoni operaatoris (39.6) avaldame $\vec{j}_e = \text{rot } \vec{A}$ ning varieerime hamiltoniaani keskvärtust $\bar{H} = \int \psi^* \hat{H} \psi dV$ vektorpotentsiaali \vec{A} järgi, saame elektrivoolutiheduse \vec{j}_e jaoks avaldise

$$\begin{aligned} \vec{j}_e &= \frac{ie\hbar}{2m} (\nabla \psi^* \psi - \psi \nabla \psi) - \\ &- \frac{e^2}{mc} \vec{A} \psi + \psi - \beta \text{rot} (\psi + \hat{S} \psi), \end{aligned} \quad (39.12)$$

mis samuti sõltub osakese spinist.

Valemi (39.12) tuletamine \bar{H} avaldise varieerimise teel \vec{A} järgi baseerub klassikalisest elektrodünaamikast tuntud valemil

$$\delta H = - \frac{1}{c} \int \vec{j}_e \delta \vec{A} dV, \quad (39.13)$$

kus δH on Hamiltoni funktsiooni muutus, $\delta \vec{A}$ - vektorpotentsiaali variatsioon ja \vec{j}_e - voolutihedus. Kvantmehhanikas peab kehtima sama seos operaatorite keskvärtuste jaoks. Seega peame avaldist (39.12) tõlgendama kui voolutiheduse operaatori keskvärtust.

V. HÄIRITUSARVUTUSE PÕHIJÕONED.

40. Schrödingeri häiritusarvutus kõdumata juhul.

Energia omaväärtuseprobleemi lahendamine (vastavate stationaarsete olekute leidmine) on täpselt võimalik ainult väga lihtsatel erijuhtudel (vesinikusarnane aatom, harmooniline ostsillaator jt.). Sageli tuleb lahendit otsida ligikaudu, lähedes mingist lihtsustatud ülesandest, mis on täpselt lahenduv. Eeldusel, et tõeline lahend erineb vaid vähe lihtsustatust, jõutakse tõelise lahendini järkjärguliste paranduste leidmise teel lihtsustatud lahendile. Niisugune lähendusmeetod stationaarsete olekute leidmiseks kannab Schrödingeri häiritusarvutuse nime.

Häiritusarvutuses eraldatakse hamiltoniaanist teatud osa H_0 , mida nimetatakse häirimata süsteemi hamiltoniaaniks. Eelduse kohaselt on omaväärtuseülesanne operaatori \hat{H}_0 jaoks täpselt lahenduv.

Tegelik Hamiltoni operaator on siis esitatav:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon \hat{H}', \quad (40.1)$$

kus \hat{H}' kannab häiritushamiltoniaani nime, kuna ε on väike arvuline konstant, $|\varepsilon| < 1$, mida teoreetilise arutluste puhul on sobiv hamiltoniaanist \hat{H}' eraldada.

Olgu häirimata olek lihtne, s. t. igale omaväärtusele E_n^0 vastaku üksainus omafunktsioon ψ_n^0 , kusjuures ψ_n^0 rahuldab võrrandit

$$\hat{H}_0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0. \quad (40.2)$$

Tegelik omaväärtuseülesanne seisneb võrrandi

$$(\hat{H}_0 + \varepsilon \hat{H}') \psi_n = E_n \psi_n \quad (40.3)$$

lahendamises.

Häiritusmeetodi idee seisneb selles, et lahendit ψ_n ning vastavat omaväärtust E_n otsitakse reaksarendusena parameetri ε astmete järgi, s. t. kujul

$$E_n = E_n^0 + \varepsilon E_n^1 + \varepsilon^2 E_n^2 + \dots, \quad (40.4)$$

$$\psi_n = \psi_n^0 + \varepsilon \psi_n^1 + \varepsilon^2 \psi_n^2 + \dots \quad (40.5)$$

Paigutades avaldised (40.4, 5) võrrandisse (40.3) ning võrrutades ε samade astmete kordajad saame võrrandite süsteemi:

$$(\hat{H}_0 - E_n^0) \psi_n^0 = 0, \quad (40.6)$$

$$(\hat{H}_0 - E_n^0) \psi_n^1 = (-\hat{H}' + E_n^1) \psi_n^0, \quad (40.6')$$

$$(\hat{H}_0 - E_n^0) \psi_n^2 = (-\hat{H}' + E_n^1) \psi_n^1 + E_n^2 \psi_n^0, \quad (40.6'')$$

mis on järk-järguliselt lahendatav, kuna iga järgneva võrrandi parem pool sisaldab ainult eelmiste võrrandite lahendeid, s. t. tuntud funktsioone.

Parandusfunktsioone ψ_n^1 , ψ_n^2 jne. otsime reaksarendusena operaatori \hat{H}_0 omafunktsioonide järgi:

$$\psi_n^1 = \sum_m a_m^n \psi_m^0, \quad (40.7')$$

$$\psi_n^2 = \sum_m b_m^n \psi_m^0. \quad (40.7'')$$

Funktsioonid ψ_m^0 moodustavad ON -süsteemi, s. t.

$$\int \psi_m^{0*} \psi_n^0 dq = \delta_{mn} \quad (40.8)$$

ja rahuldavad võrrandeid

$$\hat{H}_0 \psi_m^0 = E_m^0 \psi_m^0. \quad (40.9)$$

Paigutame arenduse (40.7') võrrandisse (40.6'). Korrutame seejärel võrrandi mõlemaid pooli funktsiooniga ψ_k^{0*} ja integreerime üle kogu määramispiirkonna. Siis, arvestades tingimusi (40.8, 9), saame

$$\begin{aligned} \int \psi_k^{0*} (\hat{H}_0 - E_n^0) \psi_n^0 dq &= (E_k^0 - E_n^0) a_{kn}^0 = \\ &= -H'_{kn} + E_n^0 \delta_{kn}, \end{aligned} \quad (40.10)$$

kus

$$H'_{kn} = \int \psi_k^{0*} \hat{H}' \psi_n^0 dq$$

on operaatori \hat{H}' maatrikselement häirimata hamiltoniaani omaesituses.

Valemit (40.10) vaatleme kahel erijuhul.

a) Olgu $k=n$, siis

$$E_n^0 = H'_{nn}, \quad (40.11)$$

s. t. energia esimest järku parandus võrdub häiritusoperaatori keskvärtusega häirimata olekus ψ_n^0 .

b) Olgu $k \neq n$, siis

$$a_{kn}^0 = \frac{H'_{kn}}{E_n^0 - E_k^0}, \quad (40.12)$$

kusjuures a_{kn}^0 jääb määramatuks. Seega on olekufunktsiooni esimest järku parandusliikmel kuju:

$$\psi'_n = a^n_n \psi_n^0 + \sum_{\kappa} \frac{H'_{\kappa n}}{E_n^0 - E_{\kappa}^0} \psi_{\kappa}^0. \quad (40.13)$$

a^n_n võime määrata, nõudes funktsiooni ψ_n normeeritust kuni I järku liikmeteni, s. t.

$$\int |\psi_n^0 + \varepsilon \psi_n'|^2 dq = \int |\psi_n^0|^2 dq + \varepsilon \int \psi_n^{0*} \psi_n' dq + \varepsilon \int \psi_n'^* \psi_n^0 dq = 1.$$

Arvestades (40.8, 13), saame

$$a^n_n + (a^n_n)^* = 0,$$

millest nähtub, et a^n_n on puhtimaginaarne: $a^n_n = i\alpha$, kus α on reaalarv. Seega oleks esimest järku parandusega olekufunktsioon:

$$\psi_n = (1 + i\varepsilon\alpha) \psi_n^0 + \varepsilon \sum_{\kappa} \frac{H'_{\kappa n}}{E_n^0 - E_{\kappa}^0} \psi_{\kappa}^0.$$

Tegurit $1 + i\varepsilon\alpha$ võime vaadelda kui faasikordaja $e^{i\varepsilon\alpha}$ reaksarendust esimese järguni ε suhtes. Seega α fikseerimine tähendab ainult olekufunktsiooni faasi fikseerimist, mis on ebaoluline. Seega võime üldsust kitsendamata võtta

$$a^n_n = 0. \quad (40.14)$$

Teist järku parandused leiame täpselt samal meetodil, s. t. paigutame arenduse (40.7'') võrrandisse (40.6''). Võrrandi paremal poolel esineva funktsiooni ψ_n' asendame valemiga (40.13) ja energiaparanduse E_n' valemiga (40.11) kohaselt. Seejärel korrutame võrrandit (40.6') mõnesuguse funktsiooniga ψ_{κ}^{0*} ja integreerime üle kogu määramispiirkonna.

Kui $\kappa = n$, saame II järku energiaparanduse:

$$E_n'' = \sum_{\kappa} \frac{H'_{\kappa n} H'_{n\kappa}}{E_n^0 - E_{\kappa}^0} = \sum_{\kappa} \frac{|H'_{\kappa n}|^2}{E_n^0 - E_{\kappa}^0}, \quad (40.15)$$

kusjuures on arvestatud maatriksi H'_{kn} hermitilisust, s. o.
 $H'_{nk} = (H'_{kn})^*$.

Kui $k \neq n$, saame

$$h_{kn}^n = \sum_m \frac{H'_{km} H'_{mn}}{(E_n^0 - E_k^0)(E_n^0 - E_m^0)} - \frac{H'_{kn} H'_{nn}}{(E_n^0 - E_k^0)^2} \quad (40.16)$$

Kordaja h_{kn}^n leiame jälle funktsiooni ψ_n normeerimistingimusest teise järguni.

$$\text{Antud juhul saame } \int [E_n^{0*} \psi_n'' + |\psi_n'|^2 + \psi_n''^* \psi_n^0] dq = 0,$$

millest

$$h_{kn}^n + h_{kn}^{n*} + \sum_k |a_{nk}^n|^2 = 0.$$

Võrrutades samadel kaalutlustel, nagu esimeses lähenduseski, imaginaarosa nulliga, saame

$$h_{kn}^n = -\frac{1}{2} \sum_k |a_{nk}^n|^2. \quad (40.17)$$

Analoogiliselt määratakse kolmes lähend jne. lõpnatu rea (40.5) koonduvust tuleb uurida igal konkreetsel juhul. Praktiiliste ülesannete lahendamisel kasutatakse harva kõrgemat kui teist järku parandusliikmeid.

Põhimõttelisi muutusi arutluskäigus ei teki, kui häirimata süsteemi energia on ka pideva spektriga. Valemites asenduvad summad integraalidega üle pidevate energiaväärtuste.

41. Schrödingeri häiritusarvutus kõdunud juhul

Kui häirimata hamiltoniaanil on kordseid omaväärtusi, tuleb eelmises paragrahvis arendatud meetodikat üldiselt muuta. Näiteks kui $E_n^{(0)} = E_k^{(0)}$, kaotab valem (40.12) mõtte, välja arvatud juhul, kui $H'_{kn} = 0$. Kui mõnesugused maatriks-

elemendid H'_{kn} on nullid, siis ütleme, et häiritusmaatriks ei seo olekuid k ja n . Järelikult võime kasutada kõdumata juhu häiritusarvutust siis, kui häiritusmaatriks ei seo lähteolekuga ühtegi samale energiale vastavat olekut.

Veendume selles, et kõdumine on seotud hamiltoniaani \hat{H}_0 sümmeetriaomadustega. Näitame, et kui \hat{H}_0 on invariantne mõnesuguste teisenduste rühma suhtes, siis vastavad kõik need omafunktsioonid, mis omavahel on seotud sellesse rühma kuuluvate teisendustega, ühele ja samale energia väärtusele.

Lähtume \hat{H}_0 omaväärtusvõrrandist

$$\hat{H}_0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0. \quad (41.1)$$

Rakendame selle mõlemale poolele antud rühma kuuluva teisenduse operaatorit \hat{T} . Kui \hat{H}_0 on invariantne, siis vastavalt § 14 tulemustele (val. (14.16)):

$$\hat{T} \hat{H}_0 = \hat{H}_0 \hat{T}. \quad (41.2)$$

Seega

$$\hat{T} \hat{H}_0 \psi_n^0 = \hat{H}_0 \hat{T} \psi_n^0 = E_n^0 \hat{T} \psi_n^0 \quad (41.3)$$

või

$$\hat{H}_0 \psi_n^{10} = E_n^0 \psi_n^{10}, \quad (41.4)$$

kus

$$\psi_n^{10} = \hat{T} \psi_n^0. \quad (41.5)$$

Valem (41.4) näitab, et energiale E_n^0 vastab peale funktsiooni ψ_n^0 veel funktsioon ψ_n^{10} , mis üldiselt rääkides erineb funktsioonist ψ_n^0 .

Mida suurem on \hat{H}_0 sümmeetria, s. t. mida ulatuslikumasse rühma kuuluvad operaatorid temaga kommuteeruvad, seda

nidena, s. o.

$$\psi_{np}^0 = \mathcal{L}_1^p \psi_1 + \mathcal{L}_2^p \psi_2 + \dots + \mathcal{L}_n^p \psi_n, \quad (41.8)$$

$$p = 1, 2, \dots, n.$$

Analoogiliselt § 40 mõttekäikudega saame rea lähendusvalemid:

$$(\hat{H}_0 - E_n^0) \psi_{np}^0 = 0, \quad (41.9)$$

$$(\hat{H}_0 - E_n^0) \psi_{np}' = (-\hat{H}' + E_{np}') \psi_{np}^0, \quad (41.10)$$

$$(\hat{H}_0 - E_n^0) \psi_{np}'' = (-\hat{H}' + E_{np}') \psi_{np}' + E_{np}'' \psi_{np}^0, \quad (41.11)$$

.....

$$p = 1, 2, \dots, n.$$

Samuti kehtib

$$(\hat{H}_0 - E_n^0) \varphi_k = 0, \quad (41.12)$$

$$k = 1, \dots, n.$$

Esimese lähendi leidmiseks arendame ψ_{np}' järgmiselt

$$\psi_{np}' = \sum_{k=1}^n a_{nk}' \psi_{nk}^0 + \sum_q c_q \psi_q^0, \quad (41.13)$$

kus teises summas on omafunktsioonid ψ_q^0 , mis ei kuulu omaväärtuse E_n^0 juurde,

Kui arenduse (41.13) paigutame võrrandisse (41.10), korrutame seejärel võrrandit funktsiooniga φ_k^* ning integreerime üle kogu ruumi, saame vasakul pool nulli võrrandi (41.9) tõttu ning funktsioonide φ_k ja ψ_q^0 ortogonaalsuse tõttu.

Seega peavad kehtima võrdused

lentne maatriksi H'_{kp} diagonaliseerimisega, s. t.

$$\int (\psi_n^0)^* \hat{H}' \psi_n^0 dV = E'_n \delta_{np}, \quad (41.18)$$

Võrrandi (41.17) kõik juured ei tarvitse olla erinevad. Siis võib kõdumine kõrvalduda kõrgemates lähendites.

Kui aga häiritusoperaatoril \hat{H}' on ühiseid sümmeetriaomadusi operaatoriga \hat{H}_0 , lagunevad energiatasemed ainult osaliselt (sõltumata kasutatud lähendusest).

42. Häiritus üleminekute põhjustajana.

Kui Hamiltoni operaator sõltub ajast, siis pole Schrödingeri võrrand üldjuhul täpselt lahendatav. Kui oletada, et tõe- list hamiltoniaani võib aproksimeerida ajast sõltumatut operaatoriga, võime ajast sõltuvat osa vaadelda häiritusena. Vastav lähendusmeetod kannab Dirac'i häiritusarvutuse nime.

Olgu

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \quad (42.1)$$

kus \hat{H}_0 on ajast sõltumatu operaator, mille omaväärtusprobleem on täpselt lahenduv, s. t.

$$\hat{H}_0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0. \quad (42.2)$$

\hat{H}' nimetatakse häiritushamiltoniaaniks; ta võib sõltuda ajast.

Schrödingeri võrrandi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = \hat{H} \psi \quad (42.3)$$

lahendi arendano ritta statsionaarsete olekute funktsioonide

$$\psi_n^0 e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} \quad \text{järgi:}$$

$$\psi = \sum_n a_n(t) \psi_n^0 e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t}. \quad (42.4)$$

Mõttekäigud jäävad samaks ka siis, kui operaatori \hat{H} omaväärtuste spekter on pidev. Valemis (42.4) asendub sel juhul summa integraaliga üle omaväärtuste E^0 .

Kui asetame (42.4) võrrandisse (42.3) ning arvestame (42.1, 2), saame

$$\sum_n \left(-\frac{\hbar}{i}\right) \frac{da_n}{dt} \psi_n^0 e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} = \sum_n a_n \hat{H}' \psi_n^0 e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t}. \quad (42.5)$$

Korrutades võrduse (42.5) mõlemad pooli funktsiooniga

$\psi_k^{0*} e^{\frac{i}{\hbar} E_k^0 t}$ ning integreerides üle kogu määramispiirkonna, saame

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{da_k}{dt} = \sum_n e^{i\omega_{kn}t} H'_{kn} a_n. \quad (42.6)$$

Siin

$$H'_{kn} = \int \psi_k^{0*} \hat{H}' \psi_n^0 dV \quad (42.7)$$

ja

$$\omega_{kn} = \frac{1}{\hbar} (E_k^0 - E_n^0). \quad (42.8)$$

Valemi (42.6) tuletamisel on arvestatud omafunktsioonide ortonormaalsusetingimust

$$\int \psi_k^{0*} \psi_n^0 dV = \delta_{kn}.$$

Kui valemis (42.6) omistame indeksile k kõik võimalikud väärtused, saame üldiselt a_k suhtes lõpmata paljudest võrranditest koosneva süsteemi lõpmata paljude tundmatutega.

Selle süsteemi lahendamiseks kasutame lähendusmeetodit.

Oletame, et operatori \hat{H}' avaldisest võime eraldada väikese parameetri ε , s. t. asendame

$$\hat{H}' \rightarrow \varepsilon \hat{H}', \quad \varepsilon \ll 1. \quad (42.9)$$

Funktsioonid a_n arendame ritta ε astmete järgi:

$$a_n = a_n^0 + \varepsilon a_n^1 + \varepsilon^2 a_n^2 + \dots \quad (42.10)$$

Kui avaldisse (42.6) paigutame (42.9, 10) ning võrrutame ε samade astmete kordajad, saame järk-järguliselt lahendada süsteemi:

$$\frac{d a_k^0}{dt} = 0, \quad \frac{d a_k^1}{dt} = (i\hbar)^{-1} \sum_n H'_{kn} a_n^0 e^{i\omega_{kn}t}, \quad (42.11)$$

$$\frac{d a_k^{(s)}}{dt} = (i\hbar)^{-1} \sum_n H'_{kn} a_n^{(s)} e^{i\omega_{kn}t}.$$

Koefitsiendid a_k^0 ei sõltu ajast. Kui häiritus puuduks, oleks $a_k = a_k^0$. Seega võime a_k^0 väärtusi vaadelda teatud algväärtustena, mis iseloomustavad füüsikalise objekti olekut enne häirituse mõju. Et arvestada juhtu, kus häiritus mõjub lõpmata kaua, peame üldjuhul algmomenti valida lõpmata kauge, s. t. $t_0 \rightarrow -\infty$. Kui oletame, et alghetkel oli objekt kindlas statsionaarses olekus m , siis

$$a_k^0 = \delta_{km}, \quad a_k^{(s)} = a_{km}^{(s)}, \quad s \geq 1, \quad (42.12)$$

kusjuures indeksi m kirjutame koefitsiendile a_k juurde selleks, et rõhutada ta sõltuvust algolekust.

Tähistusi (42.12) kasutades võime võrrandsüsteemist

(42.11) arvutada a'_{km} , a''_{km} jne.

Vaatleme esimest lähendit

$$a'_{km}(t) = (ik)^{-1} \int_{t_0}^t H'_{km} e^{i\omega_{km}t'} dt'. \quad (42.13)$$

$a'_{km}(t)$ mooduli ruut annab tõenäosuse selleks, et süsteem, mis alghetkel viibis olekus m , viibib hetkel t olekus k . Teiste sõnadega, $|a'_{km}(t)|^2$ annab esimeses lähenduses ülemineku tõenäosuse häirituse H' toimel.

Valemi (42.13) võime ositi integreerides viia kujusse

$$a'_{km} = - \frac{H'_{km}(t') e^{i\omega_{km}t'}}{k \omega_{km}} \Big|_{t_0}^t + \int_{t_0}^t \frac{\partial H'_{km}}{\partial t'} \frac{e^{i\omega_{km}t'}}{k \omega_{km}} dt'. \quad (42.14)$$

Esimene liige saab alumisel rajal nulliks, kuna ülemisel rajal, kui $t \rightarrow \infty$, lisab parandusliikme lähtefunktsioonile ψ_k^0 (vt. val. (41.13)) ega ole seotud üleminekuga. Seega kirjeldab üleminekuid teine liige. Ülemineku tõenäosus avaldub

$$W_{km} = \frac{1}{k^2 \omega_{km}^2} \left| \int_{t_0}^t \frac{\partial H'_{km}(t')}{\partial t'} e^{i\omega_{km}t'} dt' \right|^2. \quad (42.15)$$

Kui häiritus lülitatakse sisse momentaanselt (näiteks põrge), siis $e^{i\omega_{km}t}$ on aeglaselt muutuv suurus võrreldes teguriga $\frac{\partial H'_{km}}{\partial t}$ ning võime ta tuua integraali märgi ette, võttes ajamomendiks häirituse sisselülitumise hetke. Siis taandub valem (42.15) kujule

$$W_{km} = \frac{1}{k^2 \omega_{km}^2} |H'_{km}|^2. \quad (42.16)$$

Erijuhte perioodilise, konstantse, adiabaatse ja momen-

taanse häirituse korral on vaadeldud ülesannete kogus, li-
 sas A p. 4. Vt. ka ül. 93-115.

VI. PÖRKETEORIA ALUSED.

43. Diferentsiaalne efektiivne ristlõige.

Mikropartiklite pörkeprotsessi antud märklauaga nimeta-
 takse hajumiseks. Kui muutub ainult osakeste liikumise suund,
 mitte aga muud karakteristikud (energia, liik jne.), on haju-
 mine elastne, vastasel korral mitteelastne. Hajuvate ja haju-
 tavate osakeste interaktsiooni (vastastikuse mõju) oluliseks
 iseloomustajaks on efektiivne ristlõige.

Hajumise diferentsiaalseks efektiivseks ristlõikeks (lüh.
DER) nimetatakse ajaühiku jooksul antud suunas ühte ruuminur-
gaühikusse hajunud osakeste arvu suhet sama ajaühiku jooksul
hajutamistsentrile langenud osakeste voo tihedusega, s. t.

$$\sigma(\vartheta, \varphi) d\Omega = \frac{dN}{N_0}, \quad (43.1)$$

kus $\sigma(\vartheta, \varphi)$ on hajumise DER, mis üldiselt sõltub polaar-
 nurkadega ϑ, φ määratud hajumissuunast, $d\Omega = \sin\vartheta d\vartheta d\varphi$
 on ruuminurgaelement, dN - ruuminurgaelementi $d\Omega$ haju-
 nud osakeste voog ajaühikus ja N_0 samas ajaühikus hajuta-
 mistsentriile langenud osakeste voo tihedus. Arvestades dN

ja N_0 dimensioone näeme, et DER on pindala dimensiooniga.

DER arvutatakse tavaliselt masskeskmega seotud taustsüsteemis (MS). Kui oletame, et pealelangevate osakeste voost põrkub iga osake ainult ühe hajutava osakesega (tavaline eeldus), saame kahekehaprobleemi, mis mitterelativistlikul juhul taandub MS-is tavaliselt ühekehaprobleemiks. Kui hajunud osakesed on kerged, võrreldes märklauda osakestega (näiteks elektronide hajumine aatomituumadega), ühtib MS praktiliselt laboratoorse taustsüsteemiga (IS), s. t. taustsüsteemiga, kus märklaud loetakse paigalolevaks. Vastasel korral tuleb leida üleminekuvalemid, mis seovad DER-i eri taustsüsteemides.

Olgu pealelangeva osakese mass m_1 , ta kiirus IS-is \vec{v}_1 , hajutava osakese mass m_2 (kiirus $\vec{v}_2 = 0$), ning \vec{v}_1 ühtib osakeste suhtelise kiirusega, siis liigub massikeske IS-is kiirusega \vec{V} ,

$$\vec{V} = \frac{m_1 \vec{v}_1}{m_1 + m_2} \quad (43.2)$$

MS-is on siis osakese m_1 kiiruseks \vec{v} , kus

$$\vec{v} = \vec{v}_1 - \vec{V} = \frac{m_2 \vec{v}_1}{m_1 + m_2} \quad (43.3)$$

Olgu pärast hajumist osakese m_1 kiirus IS-is \vec{v}_1' ja MS-is vastavalt \vec{v}' , siis valemi (43.3) põhjal

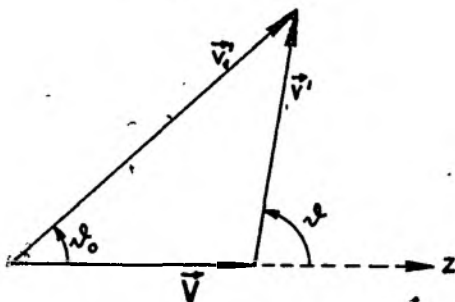
$$\vec{v}' = \vec{v}_1' - \vec{V} \quad (43.4)$$

Valemit (43.4) võime illustreerida joonisega E.

N_0 on nurk osakese esialgse suuna (mis on määratud vektoriga \vec{v} või \vec{v}_1) ja suuna vahel pärast hajumist IS-is, N' - vastav nurk MS-is. Valime \vec{V} suuna mõlema taustsüsteemi

z-telje suunaks. Siis järgneb vektorite \vec{v}' , \vec{v}_1' ja \vec{V} komplanarsusest, et $\varphi_0 = \varphi$.

(43.5)



Joon. E.

Joonis E põhjal

$$V + v' \cos \vartheta = v_1' \cos \vartheta_0,$$

$$v' \sin \vartheta = v_1' \sin \vartheta_0$$

või

$$\operatorname{tg} \vartheta_0 = \frac{\sin \vartheta}{\gamma + \cos \vartheta}, \quad (43.6)$$

kus $\gamma = \frac{V}{v'}$.

Kasutades valemuid (43.5), (43.6) ja $\cos \vartheta_0 = (1 + \operatorname{tg}^2 \vartheta_0)^{-1/2}$,

saame

$$\sin \vartheta_0 d\vartheta_0 d\varphi_0 = \frac{1 + \gamma \cos \vartheta}{(\gamma^2 + 2\gamma \cos \vartheta + 1)^{3/2}} \sin \vartheta d\vartheta d\varphi,$$

millest, silmas pidades σ definitsiooni (43.1),

$$\sigma(\vartheta_0, \varphi_0) = \frac{(1 + \gamma^2 + 2\gamma \cos \vartheta)^{3/2}}{|1 + \gamma \cos \vartheta|} \sigma(\vartheta, \varphi). \quad (43.7)$$

Valem (43.7) võimaldab avaldada MS-is arvutatud DER-i

$[\sigma(\vartheta_0, \varphi_0)]$ LS-is mõõdetud DER-i $\sigma(\vartheta, \varphi)$ kaudu.

Leiame DER-i kvantmehaanilise avaldise. Iseloomustagu pealelangeva ja hajutava osakese interaktsiooni potentsiaalne energia $U(\vec{r})$, mis sõltub ainult osakeste suhtelistest koordinaatidest ($\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$). Siis võime nendest osakestest koosnevat süsteemi kirjeldada ajast sõltumatu Schrödingeri võrrandiga, millel MS-is (edaspidi kasutame ainult seda taustsüsteemi) on kuju

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}), \quad (43.8)$$

kus μ on taandatud mass, E - suhtelise liikumise energia.

Kuna pealelangevate osakeste voo tihedust N_0 , samuti hajutatud osakeste voogu dN võime mõõta kuitahes kaugel hajutamistsentrist, piisab DER-i arvutamiseks võrrandi (43.8) asümptootiliste lahendite tundmisest. Eeldusel, et $\lim_{r \rightarrow \infty} U(\vec{r}) = 0$, saame võrrandile (43.8) asümptootilise kuju

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \psi_{as}(\vec{r}) = E_0 \psi_{as}(\vec{r}), \quad (43.9)$$

kus

$$E_0 = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2\mu}, \quad \kappa = \frac{\mu v_0}{\hbar}.$$

ψ_{as} koosneb nii pealelangevat kui ka hajunud partiklit kirjeldavast osast, s. t.

$$\psi_{as} = \psi_0(\vec{r}) + \psi'(\vec{r}). \quad (43.10)$$

Valemis (43.10) vastaku ψ_0 pealelangevale osakesele. Kui hajutamistsentrile langevate osakeste suuna valime z -telje (ka polaartelje) suunaks, võime ψ_0 esitada tasapinnalise lainena

$$\psi_0(\vec{r}) = e^{i\kappa z} \quad (32.11)$$

Hajutamise probleemis võime kasutada normaliseerimata olekufunktsioone (kusjuures oluline on ainult ruumikoordinaatidest sõltuv osa, mistõttu ajast sõltuva teguri $\exp[-i\omega t]$, $\omega = \frac{E_0}{\hbar}$ jätame kõikjal kirjutamata). Hajunud osakest kirjeldagu koordinaatides r, ϑ, φ sfääriline hajuv laine

$$\psi'(r) = f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{i\kappa r}}{r}, \quad (43.12)$$

kus amplituud $f(\vartheta, \varphi)$ sõltub põrkeprotsessi iseloomustavatest tungidest, s. t. funktsioonist $U(\vec{r})$ võrrandis (43.8).

Avaldame N_0 ja dN vastavalt funktsioonide ψ_0 ja ψ' abil. Kasutame tõenäosuse voo tiheduse üldist avaldist mitterelativistlikus kvantmehaanikas:

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2\mu} (\nabla \psi^* \psi - \psi^* \nabla \psi). \quad (43.13)$$

Avaldis (43.13) on võrdeline osakeste voo tihedusega. Jättes ära võrdeteguri (mis on sama nii N_0 kui ka dN puhul), leiame z -telje suunas liikuvate osakeste voo tiheduse N_0 :

$$N_0 = \frac{i\hbar}{2\mu} \left(\frac{\partial \psi_0^*}{\partial z} \psi_0 - \psi_0^* \frac{\partial \psi_0}{\partial z} \right)$$

või valemi (43.11) põhjal,

$$N_0 = \frac{\hbar \kappa}{\mu}. \quad (43.14)$$

Radiaalselt hajunud osakeste voo tihedus N_r avaldub

$$N_r = \frac{i\hbar}{2\mu} \left(\frac{\partial \psi'^*}{\partial r} \psi' - \psi'^* \frac{\partial \psi'}{\partial r} \right). \quad (43.15)$$

Valemitost (43.12 ja 15) saame (jättes arvestamata liikmed, mis kahanevad kiiremini kui n^{-2})

$$N_n = \frac{\hbar \kappa}{\mu} \frac{|\psi(r, \varphi)|^2}{r^2}. \quad (43.16)$$

Kuna

$$dN = n^2 N_n d\Omega, \quad (43.17)$$

kus $n^2 N_n$ annab hajunud osakeste voo ruuminurgaühikusse (kaugusel r vastab ruuminurgaühikule pindala $S = r^2$), siis valemite (43.1, 14, 16 ja 17) põhjal

$$\sigma(r, \varphi) = |\psi(r, \varphi)|^2. \quad (43.18)$$

Järelikult taandub DER-i arvutamine valemiga (43.12) defineeritud funktsiooni $\psi(r, \varphi)$ - nn. hajumise amplituudi - arvutamiseks. $\psi(r, \varphi)$ täpne arvutamine on võimalik ainult erijuhtudel, üldiselt kasutatakse lähendusmeetodeid.

44. Elastse hajumise efektiivse ristlõike arvutamine Borni lähendusmeetodiga.

Borni meetod seisneb häiritusarvutuse rakendamises hajumisprobleemile. Selle meetodi põhiidee kohaselt vaadeldakse hajutatavat potentsiaali $U(\vec{r})$ valemis (43.8) häiritusena.

Kasutades tähistusi

$$E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2\mu}, \quad U(\vec{r}) = - \frac{\hbar^2}{2\mu} u(\vec{r}), \quad (44.1)$$

anname võrrandile (43.8) kuju

$$(\Delta + \kappa^2) \psi(\vec{r}) = - u(\vec{r}) \psi(\vec{r}). \quad (44.2)$$

Ühine võrrandi (44.2) lahendit kujul

$$\psi(\vec{n}) = e^{i\vec{k}\vec{n}} + \psi'(\vec{n}), \quad (44.3)$$

kus $(\vec{k})^2 = \kappa^2$ ja ψ' tõlgendame parandusliikmena vaba osakese võrrandile, s. t. liikme $u(\vec{n})\psi'(\vec{n})$ loeme teist järku väikeseks suuruseks võrreldes liikmetega $u(\vec{n})e^{i\vec{k}\vec{n}}$ ja ψ' . Paigutame avaldise (44.3) võrrandisse (44.2) ning arvestame, et

$$(\Delta + \kappa^2)e^{i\vec{k}\vec{n}} = 0 \quad \text{ja} \quad u(\vec{n})\psi'(\vec{n}) \sim 0,$$

siis saame funktsioonile $\psi'(\vec{n})$ järgmise mittehomogeense võrrandi:

$$(\Delta + \kappa^2)\psi'(\vec{n}) = -u(\vec{n})e^{i\vec{k}\vec{n}}. \quad (44.4)$$

Mittehomogeenset võrrandit (44.4) on sobiv lahendada Greeni funktsiooni abil. Kui defineerime võrrandi (44.4) Greeni funktsiooni $G(\vec{n}, \vec{n}')$ seose

$$(\Delta + \kappa^2)G(\vec{n}, \vec{n}') = -\delta(\vec{n} - \vec{n}') \quad (44.5)$$

abil ja arvestame, et mistahes pideva funktsiooni $\psi(\vec{n})$ korral kehtib seos

$$\psi(\vec{n}) = \int \psi(\vec{n}') \delta(\vec{n} - \vec{n}') (d\vec{n}'),$$

võime (44.4) lahendi avaldada

$$\psi'(\vec{n}) = \int G(\vec{n}, \vec{n}') u(\vec{n}') e^{i\vec{k}\vec{n}}. \quad (44.6)$$

Seega taandub kogu probleem võrrandi (44.5) lahendamisele.

Vajaliku lahendi leiame järgmiselt.

Esitame $\delta(\vec{n} - \vec{n}')$ kujul:

$$\delta(\vec{n} - \vec{n}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\vec{n} - \vec{n}')\vec{p}} (d\vec{p}). \quad (44.7)$$

Võrrand (44.5) on rahuldatud, kui

$$G(\vec{n}, \vec{n}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{p}(\vec{n} - \vec{n}')}}{p^2 - \kappa^2} (d\vec{p}). \quad (44.8)$$

Integraali (44.8) arvutamiseks kasutame polaarkoordinaate p -ruumis, kusjuures polaartelje suuname mööda vektorit $(\vec{n} - \vec{n}')$.

Siis

$$\vec{p}(\vec{n} - \vec{n}') = p |\vec{n} - \vec{n}'| \cos \vartheta;$$

$$(d\vec{p}) = p^2 dp \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$$

ja

$$\int \frac{e^{i\vec{p}(\vec{n} - \vec{n}')}}{p^2 - \kappa^2} (d\vec{p}) = \int_0^\infty \frac{p^2 dp}{p^2 - \kappa^2} \int_0^\pi e^{ip|\vec{n} - \vec{n}'| \cos \vartheta} \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= \frac{4\pi}{|\vec{n} - \vec{n}'|} \int_0^\infty \frac{p e^{ip|\vec{n} - \vec{n}'|}}{p^2 - \kappa^2} dp = \frac{\pi}{|\vec{n} - \vec{n}'|} (J_1 + J_2),$$

kus

$$J_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p e^{ip|\vec{n} - \vec{n}'|}}{p^2 - \kappa^2} dp,$$

$$J_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p e^{-ip|\vec{n} - \vec{n}'|}}{p^2 - \kappa^2} dp.$$

Integraalid J_1 ja J_2 on arvutatavad resiidide abil, kui eelnevalt kindlaks teha, millised poolused $p = \pm \kappa$ võtta kontuuri sisse, milliseid mitte. Pooluste ümberkäigu reegli saame järgmistel kaalutlustel.

Kooskõlas valemiga (44.3) kirjeldab $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ pealelangetavat osakest ja järelikult $\psi'(\vec{r})_{as}$ - hajunud osakest.

Seega peame nõudma, et $\psi'_{as} = \oint \frac{e^{i\kappa r}}{r}$ oleks hajuv sfääri-

line laine. Siit nähtub, et integraali J_1 arvutamisel tuleb kontuuri sisse jätta poolus $\rho = +\kappa$, J_2 arvutamisel vastavalt $\rho = -\kappa$.

Seda silmas pidades saame lõplikult

$$G(\vec{n}, \vec{n}') = \frac{e^{i\kappa|\vec{n}-\vec{n}'|}}{4\pi|\vec{n}-\vec{n}'|} \quad (44.9)$$

ning

$$\psi(\vec{n}) = \int \frac{e^{i\kappa|\vec{n}-\vec{n}'|}}{4\pi|\vec{n}-\vec{n}'|} u(\vec{n}') e^{i\vec{k}\vec{n}'} (d\vec{n}'). \quad (44.10)$$

Leiame avaldise (44.10) asümptotilise kuju tingimusest $r \gg r'$.

Siis

$$|\vec{n}-\vec{n}'| = \left[r^2 \left(1 - 2 \frac{r' \cos \vartheta}{r} + \frac{r'^2}{r^2} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \approx r \left(1 - \frac{r'}{r} \cos \vartheta + \dots \right) = r - r' \cos \vartheta'; \quad (44.11)$$

$$\frac{1}{|\vec{n}-\vec{n}'|} \approx \frac{1}{r}.$$

Siin ϑ' on nurk \vec{n} ja \vec{n}' vahel.

Arvestades (44.11), (44.10) saame:

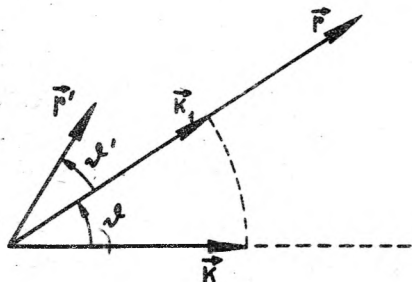
$$\psi_{as} = \frac{e^{i\kappa r}}{r} \frac{1}{4\pi} \int (d\vec{n}') e^{-i\kappa r' \cos \vartheta'} u(\vec{n}') e^{i\vec{k}\vec{n}'}. \quad (44.12)$$

Kuna teiselt poolt $\psi_{as} = f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{i\kappa r}}{r}$, siis

$$f(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{4\pi} \int e^{-i\kappa r' \cos \vartheta'} u(\vec{n}') e^{i\vec{k}\vec{n}'} (d\vec{n}'). \quad (44.13)$$

Hajumisnurgad (ϑ, φ) sisalduvad valemi (44.13) paremas poolles avaldises $\exp [i(\vec{k}\vec{n}' - \kappa r' \cos \vartheta')]$.

Vaatleme valem (43.13) juhul, kui hajutav potentsiaal on tsentraalsümmeetriline, s. t. $u(\vec{r}') = u(r')$. Siis võib efektiivne ristlõige sõltuda ainult nurgast ϑ .



Joon. F.

Polaarnurkadest sõltuvust selgitame joonise F abil.

Vektor \vec{k} määrab pealelangeva osakese liikumise suuna, vektor \vec{r}' on selle raadiusvektor punktis, kus me hajunud osakest vaatleme. ϑ on järelkülg hajumisnurk. $r' \cos \vartheta'$ annab vektori \vec{r}' pro-

jekttsiooni \vec{k} suunale. Kui defineerime \vec{k} -suunalise laine levikuvektori \vec{k}_1 nii, et $|\vec{k}_1| = |\vec{k}|$, võime kirjutada

$$\vec{k}\vec{r}' - kr' \cos \vartheta' = (\vec{k} - \vec{k}_1) \vec{r}' = K r' \cos \vartheta'', \quad (44.14)$$

kus

$$K = |\vec{k} - \vec{k}_1| = k \sqrt{2(1 - \cos \vartheta)} = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}. \quad (44.15)$$

ϑ'' on nurk $\vec{k} - \vec{k}_1$ ja \vec{r}' vahel. (Juhime tähelepanu sellele, et alates valemist (44.8) ühtivad k väärtused, mis on defineeritud valemiga (44.1), vaba osakese energiale E , vastavate väärtustega.)

Kui integraali (44.13) arvutamisel kasutame valem (44.14) ja sfäärilisi koordinaate, kus $\vec{k} - \vec{k}_1$ suuna valime

polaarteljeks, siis $(dr') = r'^2 dr' \sin \vartheta'' d\vartheta'' d\varphi'$ ja

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} e^{iKr' \cos \vartheta''} \sin \vartheta'' d\vartheta'' d\varphi' = \frac{4\pi \sin Kr'}{Kr'}$$

ning

$$f(\vartheta) = \frac{1}{K} \int_0^{\infty} u(r) \sin Kr \cdot r dr. \quad (44.16)$$

Valem (44.16) võimaldab leida hajumise efektiivse ristlõike olenevuse nurgast ϑ mitmesuguste tsentraalsümmeetriliste interaktsioonide korral.

Näit.: kulonilise interaktsiooni korral

$$|f(\vartheta)|^2 = \sigma(\vartheta) = \frac{(Ze^2)^2}{4 \frac{\hbar^4 k^4}{\mu^2} \frac{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}}{2}} \quad (\text{Arvutusülesanne!})$$

Borni meetod on rakendatav ainult siis, kui potentsiaalset energiat $U(\vec{r})$ valemis (43.8) võib tõepoolest vaadelda häiritusena. Üksikasjalisem analüüs näitab, et see kehtib küllalt kiirete osakeste või küllalt lühikese efektiivse raadiusega interaktsioonide korral (vt. ülesannete kogu lisa A p. 51).

45. Pärtsiaallainete meetod.

Partsiaallainete meetodi põhiidee seisneb võrrandi (43.8) lahendi $\psi(\vec{r})$ arendamises impulssmomendi omafunktsioonide (partsiaallainete) järgi. Täpne asümptootiline lahend ja ka hajumise amplituud saadakse lõpmatu rea kujul. Kuna lahendit otsitakse sfäärilistes koordinaatides, on see meetod sobiv

tsentraalsümmeetrilise hajutava potentsiaali $u(\vec{r}) = u(r)$ korral. Siis on hajumise pilt sümmeetriline pealelangeva osakese liikumissuuna (polaartelje) suhtes ning võrrandi (44.2) lahend sõltub ainult muutujatest r , ϑ , mitte aga nurgast φ . Sellele vastavalt sisaldab ψ arendus kerapinnafunktsioonide (impulsmomendi operatori omafunktsioonide) $Y_{\ell m}$ järgi ainult liikmeid $Y_{\ell 0}$, mis teatavasti ei sõltu muutujast φ ning ühtivad harilike Legendre'i polünoomidega:

$$Y_{\ell 0}(\vartheta, \varphi) = P_{\ell}(\cos \vartheta).$$

Kui Schrödingeri võrrandi (44.2) kirjutame sfäärilistes koordinaatides

$$\left(\Delta_{(r, \vartheta)} + \frac{1}{r^2} \Delta(\vartheta, \varphi) + \kappa^2\right) \psi = -u(r) \psi, \quad (45.1)$$

siis tema üldlahendit võime esitleduga kooskõlas otsida kujul:

$$\psi(r, \vartheta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{\chi_{\ell}(r)}{r} P_{\ell}(\cos \vartheta), \quad (45.2)$$

kus kordajad, - funktsioonid $\chi_{\ell}(r)$ - peavad rahuldama nn. radiaalosa võrrandit

$$\frac{d^2 \chi_{\ell}}{dr^2} + \left[\kappa^2 + u(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \chi_{\ell} = 0. \quad (45.3)$$

Vastavalt valemitele (43.10 - 12)

$$\psi_{n\ell} = e^{i\kappa z} + f(\vartheta) \frac{e^{i\kappa r}}{r}. \quad (45.4)$$

Leiame $(\chi_{\ell})_{as}$. Kuna $\lim_{r \rightarrow \infty} u(r) = 0$ ja

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} = 0, \text{ siis } (\chi_{\ell})_{as} \text{ rahuldab võrrandit}$$

$$\frac{d^2}{dr^2} (\chi_{\ell})_{as} + \kappa^2 (\chi_{\ell})_{as} = 0, \quad (45.5)$$

mille üldlahendi võime kirjutada

$$(x_2)_{as} = A_2 e^{i\kappa r} + B_2 e^{-i\kappa r} = D_2 \sin(\kappa r + \alpha_2), \quad (45.6)$$

kus D_2 ja α_2 on reaalsed konstandid. Kasutades hiljem otstarbekaks osutuvald tühistusi

$$\alpha_2 = -\frac{\pi l}{2} + \gamma_2, \quad (45.7)$$

$$D_2 = \frac{C_2}{\kappa},$$

saame funktsioonile (45.2) järgmise asümptootilise kuju

$$\psi_{as}(r, \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l \frac{\sin(\kappa r - \frac{\pi l}{2} + \gamma_l)}{\kappa r} P_l(\cos \vartheta) =$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} C_l P_l(\cos \vartheta) \left[\frac{e^{i(\kappa r - \frac{\pi l}{2} + \gamma_l)}}{2i\kappa r} - \frac{e^{-i(\kappa r - \frac{\pi l}{2} + \gamma_l)}}{2i\kappa r} \right] \quad (45.8)$$

Avaldiste (45.4) ja (45.8) võrrutamise võimaldab leida hajumisamplituudi $f(\vartheta)$. Selleks esitame ka valemi (45.4) parema poole reaksarendusena Legendre'i polünoomide järgi.

Olgu

$$f(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{f_l}{2i\kappa} P_l(\cos \vartheta), \quad (45.9)$$

kus f_l on konstantsed reakordajad.

Legendre'i polünoomide P_l ortogonaalsuseomadusest ja Besseli funktsioonide J_ν definitsioonist järgneb reaksarendus (vt. näit. Ватсон, Н.Г., Теория бесселевых функций, I, М., 1949, lk. 401):

$$e^{i\kappa z} = e^{i\kappa r \cos \vartheta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{\frac{i\pi l}{2}} \sqrt{\frac{\pi}{2\kappa r}} J_{l+\frac{1}{2}}(\kappa r) P_l(\cos \vartheta) \quad (45.10)$$

Valemiga (45.10) oleme avaldanud tasalaine $e^{i\kappa z}$ impulss-

momendi kindlatele väärtustele (määratud kvantarvuga l) vastavate olekufunktsioonide, nn. partsiaallainete superpositsioonina. (Impulssmoment on võetud tsentri suhtes.)

Kasutades poolearvulise indeksiga Besseli funktsioonide asümptootilist kuju:

$$J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right), \quad (45.11)$$

võime avaldise (45.4) parema poole esitada järgmisel:

$$\psi_{as.} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\vartheta) \left\{ (2l+1) e^{\frac{i\pi l}{2}} \left[\frac{1}{2ikr} e^{ikr - i\frac{\pi l}{2}} - \frac{1}{2ikr} e^{-ikr + i\frac{\pi l}{2}} \right] + \frac{1}{2ikr} f_l e^{ikr} \right\}. \quad (45.12)$$

Võrreldes valemities (45.8) ja (45.12) tegurite $\frac{1}{n} e^{ikr}$ ja $\frac{1}{n} e^{-ikr}$ kordajaid, saame vastavalt

$$\begin{aligned} C_l e^{-i\frac{\pi l}{2}} + i\eta_l &= (2l+1) + f_l, \\ C_l e^{-i\eta_l} &= (2l+1) e^{\frac{i\pi l}{2}}, \end{aligned} \quad (45.13)$$

millest $f_l = (2l+1)(e^{2i\eta_l} - 1)$.

Seega

$$\psi_{as.} = \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\vartheta) \left\{ e^{2i\eta_l} e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr} \right\} \quad (45.14)$$

$$f_l = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\eta_l} - 1) P_l(\cos\vartheta). \quad (45.15)$$

Iga liige hajumisamplituudi arenduses vastab hajutatava osakese impulssmomenti ruudu kindlale väärtusele (kvantarv l)

Tuletuskäigust nähtub, et η_e on l -nda partsiaallaine faasi ja ainult pealelangevale osakesele vastava partsiaal-laine faasi vahe (valemid (45.8, 10 ja 11). Seega η_e näi-tab, kuidas hajutamisprotsessi käigus vastava partsiaallai-ne faas muutub, ja teda nimetatakse l -inda laine hajumis-faasiks.

Niisiis taandub hajumisamplituudi arvutamine partsiaal-lainete meetodil hajumisfaaside määramiseks, s. t. võrrandi (45.3) lahendamiseks koos täiendava tingimusega

$$(\chi_e)_{a_1} = \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} + \eta_e \right). \quad (45.16)$$

Üldiselt on see probleem lahendatav vaid numbriliste meetoditega ja ainult erikujuliste potentsiaalide kor-ral avaldub lahend analüütiliselt. Kuna l omab lõpmata pal-ju väärtusi, tuleb lahendada lõpmata palju võrrandeid kaju-ga (45.3). Ulesanne lihtsustub aeglaste osakeste ja väikes-te efektiivse raadiusega interaktsioonide korral, kuna siis arenduse (45.15) liikmed indeksi l kasvades kahanevad ki-resti ning (olenevalt nõutavast täpsusest) võime piirduda esimeste liikmetega.

Et veenduda seatud väite õigsuses, märgime, et võrran-dis (45.3) võime liiget $u' = -\frac{1}{\pi k} l(l+1)$ vaadelda-efektiiv-se tsentrifugaaltungide potentsiaalina. Mida väiksem on in-teraktsiooni mõjuraadius a , seda suuremas piirkonnas do-mineerib u' võrreldes u -ga, kui $l \neq 0$, ning seda vähem erineb funktsioon χ_e funktsioonist χ_e^0 (võrrandi (45.3) lahend, kui $u = 0$).

Olgu n_1 funktsiooni χ_e^0 käänupunktiks, siis võrrandi

$$(45.3) \text{ p\u00f5hjal } \left. \frac{d^2 \chi_e^0}{dn^2} \right|_{n=n_1} = 0, \text{ kui}$$

$$\kappa^2 = \frac{l(l+1)}{n_1^2}. \quad (45.17)$$

Kui

$$a < n_1, \quad (45.18)$$

siis sama punkt on ligikaudu ka χ_e k\u00e4\u00e4nupunktiks ja j\u00e4rel-
kult funktsioonid χ_e ja χ_e^0 ei erine \u00fcksteisest oluliselt
ning vastavad faasivahed η_e v\u00f5ime lugeda v\u00f5rdseks nulliga.
Tingimused (45.17) ja (45.18) annavad kokku

$$\kappa a < \sqrt{l(l+1)} \simeq l. \quad (45.19)$$

Faasid, mis vastavad v\u00f5rratust (45.19) rahuldavatele l -
v\u00e4rtustele, ei tule praktiliselt arvesse ja v\u00f5ime piirduda
ainult nende η_e arvutamisega, millede puhul $l \ll \kappa a$.

46. Hajutamismatriks.

N\u00e4itame, et igasuguseid protsesse (nii elastseid kui ka
mitteelastseid) on v\u00f5imalik kirjeldada unitaarse operaatori
abil, mis seob olekufunktsiooni l\u00f5pmata kauges minevikus ole-
kufunktsiooniga l\u00f5pmata kauges tulevikus.

\u00a7-s 13 defineerisime valemitega (13.5, 6) unitaarse ope-
raatori $\hat{S}(t)$, mis teisendab olekufunktsiooni ajahetkel t_0
olekufunktsiooniks ajahetkel t , s. t. kirjeldab objekti
ajalist arengut hetkest t kuni hetkeni t_0 k\u00f5ikide v\u00f5ima-
likkude protsesside tulemusena. J\u00e4relikult s\u00f5ltub see operaator
m\u00f5lemast ajamomendist ja \u00f5igem on ta kirjutada kujul
 $\hat{S}(t, t_0)$. Kui tahame arvestada k\u00f5iki protsesse, mis antud

Füüsikalisten tingimustes võivad uuritava objektiga üldse toimuda, peame vaatlema lõpmata pikka ajavahemikku, s. t. võtma piirjuhu $t_0 \rightarrow -\infty$, $t \rightarrow +\infty$.

Defineerime unitaarse operaatori \hat{S} järgmiselt:

$$\hat{S} = \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} \hat{S}(t, t_0). \quad (46.1)$$

Sellele operaatorile vastav maatriks (operaator \hat{S} konkreet-ses esituses) kannab hajutamismaatriksi e. S-maatriksi nime. Näitame, et tema maatrikselemendid kirjeldavad uuritava ob- jektiga toimuvate konkreetsete protsesside tõenäosusi.

Valemite (13.5) ja (46.1) kohaselt

$$\psi(+\infty) = \hat{S} \psi(-\infty). \quad (46.2)$$

Olgu $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n, \dots$ mõnesuguse samaaegselt mõõdetavate suuruste kompleksi omavektorid (kasutame olekuvektoreid ole- kufunktsioonide asemel, kuna esituse täpsustamiseks pole esi- algu vajadust). Indeksid tähistavad siin omaväärtuste (vasta- vate kvantarvude) kompleksi.

Vektorite süsteemi $\{\varphi_n\}$ võime üldsust kitsendamata lu- geda ON süsteemiks:

$$(\varphi_i, \varphi_k) = \delta_{ik}, \quad (46.3)$$

kus (φ_i, φ_k) on defineeritud valemiga (31.2). Pidevate indek- site korral tuleb δ_{ik} all mõista δ -funktsiooni.

Viibigu objekt lõpmata kaugel alghetkel olekus φ_a . Missugune on tõenäosus, et antud füüsikalistes tingimustes toimub protsess, mille tulemusena lõpmata kauges tulevikus leiame objekti olekus φ_f ?

Vastuse leidmiseks arendame olekuvektori $\psi(+\infty)$ vektro-

rite $\{\varphi_n\}$ järgi:

$$\psi(+\infty) = \sum_n c_n \varphi_n. \quad (46.5)$$

Kui algolek on fikseeritud kvantarvuga a , sõltuvad sellest ka arenduse kordajad c_n , s. t. $c_n \equiv c_{na}$. c_{fa} on siis olekust a olekusse f ülemineku tõenäosuse amplituud (vrd. § 42).

Arvestades ortogonaalsusetingimusi (46.3), saame c_{fa} arvutada valemist:

$$c_{fa} = (\varphi_f, \psi(+\infty)) \quad (46.6)$$

Kuid (46.2) põhjal

$$\psi(+\infty) = \hat{S} \psi(-\infty) \equiv \hat{S} \varphi_a$$

ning

$$c_{fa} = (\varphi_f, \hat{S} \varphi_a) \equiv S_{fa} \equiv \langle f | S | a \rangle. \quad (46.7)$$

Seega kirjeldab operaatori \hat{S} maatrikselement S_{fa} üleminekut olekust a olekusse f tõenäosusega w_{fa} , kus

$$w_{fa} = |c_{fa}|^2 = |S_{fa}|^2. \quad (46.8)$$

Kui olekuid määrame ühe indeksiga, f ja a vastavalt, on maatrikselemente sobiv tähistada S_{fa} , kui aga rõhutada indeksite kompleksi, on sobivam tähistus $\langle f | S | a \rangle$.

\hat{S} operaatori unitaarsusetingimusel

$$\hat{S}^+ \hat{S} = \hat{S} \hat{S}^+ = \mathbf{I} \quad (46.9)$$

on lihtne füüsikaline tõlgendus.

Kirjutame valemi (46.9) maatrikselementides:

$$\sum_k S_{ik}^+ S_{kl} = \sum_k S_{ki}^* S_{kl} = \delta_{il}. \quad (46.9')$$

Vaatleme elemente, kus $i = l = a$, siis saame:

$$\sum_k |S_{ka}|^2 = 1. \quad (46.10)$$

Valem (46.10) väljendab tõsiasja, et lähteolekust (a)

mistahes lõppolekusse siirdumise tõenäosus on 1.

Veendume selles, et operaator \hat{S} kommuteerub süsteemi koguenergia operaatoriga \hat{H} ja kõikide liikumisintegraalidele vastavate operaatoritega.

Tõepoolest, Schrödingeri võrrandist ja valemitest (13.5, 6) näeme, et operaator $\hat{S}(t, t_0)$ rahuldab järgmist võrrandit koos vastava algtingimusega:

$$- \frac{\hbar}{i} \frac{d\hat{S}(t, t_0)}{dt} = \hat{H}\hat{S}(t, t_0); \quad \hat{S}(t_0, t_0) = I. \quad (46.11)$$

Kuna \hat{H} ei sisalda vahetult aega, võime (46.11) lahendi esitada

$$\hat{S}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \quad (46.12)$$

Siit järgneb $\hat{S}(t, t_0)$ kommuteeruvus operaatoriga \hat{H} mistahes argumentide (t, t_0) korral, seega ka piirjuhul $t \rightarrow \infty$, $t_0 \rightarrow -\infty$. s. o.

$$[\hat{S}, \hat{H}] = 0. \quad (46.13)$$

Samuti järgneb valemist (46.12), et kõik ajast vahetult sõltumatud operaatorid, mis kommuteeruvad operaatoriga \hat{H} , kommuteeruvad ka operaatoriga \hat{S} . Järelikult on energiaesituses operaatoril \hat{S} diagonaalmaatriksi kuju. Seejuures on S-maatriks diagonaalne ka kõikide kvantarvude suhtes, mis määravad liikumisintegraalide omaväärtused. Kõik liikumisintegraalid omavahel aga ei kommuteeru (näit. impulssmomendi kom-

ponendid omavahel). Sellepärast ei saa S-matriks sõltuda kõikide liikumisintegraalide omaväärtustest. Arvestades, et tema elementide moodulite ruudud annavad füüsikaliste protsesside tõesõnused, on ilmne, et matrikselemendid ei või sõltuda koordinaadistikust kui matemaatilisest abivahendist. Järelikult ei või nad sõltuda ka niisuguste liikumisintegraalide väärtustest, mis ise olenevad koordinaadistikust (näit. kogu impulsi ja impulssmomenti komponendid).

Need kaalutlused võimaldavad analüüsida S-matriksi omadusi (ja seega ka protsesside üldisi seaduspärasusi) osakeste interaktsioone spetsialiseerimata. S-matriksi formalism loiab laialdast kasutamist tuuma- ja elementaerosakeste reaktsioonide uurimisel. Järgmises peatükis peatume lühidalt küsimusel, kuidas S-matriksi abil arvutada efektiivseid ristlõikeid.

47. Mitteelastsed protsessid.

Mitteelastse hajumise protsessid haaravad üldiselt kõiki neid reaktsioone, milles võib muutuda osakeste energia ja liik. Sellepärast tuleb siin vaadelda nii pealelangevatest kui ka märklaua osakestest koosnevat süsteemi tervikuna.

Antud konkreetse protsessi efektiivse ristlõike määrab vastavat tüüpi reaktsioonide arv ajaühikus, jagatud pealelangevate osakeste voo tihedusega.

Efektiivsete ristlõigete arvutamiseks on otstarbekas S-matriksist eraldada koguenergia jäävust kirjeldav tegur

ja liige, mis kirjeldab üleminekut algolekust täpselt samade parameetritega lõppolekusse, s. t. mis ei vasta faktiliselt mingisugusele reaktsioonile.

Kui tähistame algoleku energia sümboliga E_a ja lõppoleku oma vastavalt E_f , siis iseloomustab energia jäävust funktsioon $\delta(E_f - E_a)$ (arvestatud on, et enne ja pärast põrget on osakesed vabad, niisiis pideva energiaspektriga). Esitatud kaalutluste kohaselt avaldame S-matriksi kujul:

$$S_{fa} = \delta_{fa} - 2\pi i T_{fa} \delta(E_f - E_a). \quad (47.1)$$

Siin vastab liige δ_{fa} "üleminekule" lähteolekusse, tegur $-2\pi i$ on välja toodud matemaatilise otstarbekuse huvides.

Valem (47.1) defineerib matrikselemendi T_{fa} , mille kaudu arvutame üleminekute tõenäosused.

Valemeist (46.8) ja (47.1) saame:

$$W_{fa} = |S_{fa}|^2 = (\delta_{fa})^2 + 2\pi \hbar \delta(E_f - E_a) \left\{ \frac{2}{\hbar} \delta_{fa} \text{Im} T_{fa} + \frac{2\pi}{\hbar} |T_{fa}|^2 \delta(E_f - E_a) \right\}. \quad (47.2)$$

Kuna δ -funktsiooni ruut ei ole defineeritud, asendame valemis (47.2) figuursulgude ees seisva δ -funktsiooni arendusega:

$$2\pi \hbar \delta(E_f - E_a) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^{+t} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_f - E_a) t'} dt'. \quad (47.3)$$

Arvestades figuursulgudes olevaid funktsioone $\delta(E_f - E_a)$ ja δ_{fa} näeme, et valemis (47.3) integraali märgi all $E_f - E_a = 0$, mistõttu integraal taandub järgmiseks:

$$2\pi \hbar \delta(E_f - E_a) \rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^{+t} dt'. \quad (47.3')$$

Keskmine üleminekühenäosus ajahüku kohta P_{fa} defineeritakse valemiga:

$$P_{fa} = \frac{W_{fa}}{\lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t dt'} \quad (47.4)$$

Seega saame valemist (47.2, 3' ja 4) (liikmed, mis ei sisalda päratut integraali $\lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t dt'$ lugejas, saavad nulliks):

$$P_{fa} = \frac{2}{\hbar} \delta_{fa} \cdot \text{Im} T_{fa} + \frac{2\pi}{\hbar} |T_{fa}|^2 \delta(E_f - E_a) \quad (47.5)$$

või arvestades ainult tegelikke üleminekuid ($f \neq a$):

$$P_{fa} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{fa}|^2 \delta(E_f - E_a). \quad (47.5')$$

Valem (47.5') sarnaneb täielikult häiritusteoorias tuletatud valemiga, kui üleminekud toimuvad pidevasse energiaspektris (vt. ülesannete kogu lisa A § 4). Kui arvestame lõppolekute kõdumist, peame valemi (47.5') korrutama olekute arvuga energia ühikintervalli kohta $\rho(E_f)$.

Hajutamise efektiivse ristlõike saame:

$$\sigma_{fa} = \frac{P_{fa}}{j_a}, \quad (47.6)$$

$$j_a = \frac{\hbar k_a}{\mu_a}, \quad (47.7)$$

kus j_a on olekus (a) viibivate pealelangevate osakeste voo tihedus ($\hbar k_a$ on pealelangevat lainet iseloomustav suhteline impulss, μ_a - reaktsiooni astuvate osakeste taandatud mass).

Kui osakeste interaktsioon sõltub ainult nende vastastikusest kaugusest (ilma spinita osakeste hajumine tsentraal-

sümmeetrilises väljas), siis on jäävaks suuruseks hajuvate osakeste impulssmoment hajumistsentri suhtes, mida iseloomustab kvantarv l . Järelikult sõltuvad maatrikselementid T_{fa} kvantarvust l . Siis saame hajumise efektiivsele ristlõikele analoogilised valemid nagu §-s 45 puhtelastse hajumise juhul.

Valem (47.7) kehtib eeldusel, et süsteemi algolekut kirjeldab funktsioon φ_a , millel on suhtelistes koordinaatides (\vec{r}) tasalaine kuju, s. t.

$$\varphi_a = \chi_a(\xi) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_a \vec{r}}, \quad (47.8)$$

kus $\chi_a(\xi)$ on reageerivate osakeste seesmiste vabadusastmete funktsioon, $\vec{p}_a = \hbar \vec{k}_a$ - suhtelise liikumise impuls.

(Samasugust esitust kasutame muidugi ka lõppoleku kirjeldamiseks ja maatrikselementide T_{fa} arvutamiseks, et valemid (47.6) ja (47.7) oleksid kooskõlas.)

Kui valemites (47.5 - 7) siirdume impulssmomendi esitusele (spetsialiseerides vastavalt §-des 31, 32 antud üleminekuvalemeid ja kasutades impulssmomendi normeeritud omafunktsioone), saame efektiivsele ristlõikele valemi (tuletuskäigu üksikasju vt. /3/, lk. 472, 473):

$$\sigma_{fa} = \frac{4\pi^3}{k_a^2} \sum_l (2l+1) |\langle f | T(l, E) | a \rangle|^2. \quad (47.9)$$

Valemis (47.9) on integreeritud üle hajumisnurkade ja lõppenergiate. Maatrikselement $\langle f | T(l, E) | a \rangle$ sõltub koguenergiast E ja hajutamistsentri suhtes võetud impulssmomendi kvantarvust l . Seega vastab summa iga liige kindla impulssmomendiga osakesele. Indeksid a ja f tähistavad sellest

valemist alates kõiki muid vabadusastmeid (peale koguenergia, impulssmomendi ja hajumissuundade), mis reaktsiooni käigus võivad üldiselt muutuda. Järelikult elastse hajumise korral $f = a$, mitteelastses protsessis $f \neq a$.

Kui valemis (47.9) asendame maatrikselemendid $\langle f | T(E, \ell) | a \rangle$ elementidega $\langle f | S(E, \ell) | a \rangle$ vastavalt valemile (47.1), saame (üle δ -funktsiooni on integreeritud):

$$\sigma_{fa} = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_{\ell} (2\ell+1) |S_{fa}(E, \ell) - \delta_{fa}|^2. \quad (47.10)$$

Kõikide mitteelastsete protsesside summaarse efektiivse ristlõike σ_{in} saame, kui valemis (47.10) summeerime üle indeksi f kõikide väärtuste, kui $f \neq a$,

$$\sigma_{in} = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_{f (f \neq a)} \sum_{\ell} (2\ell+1) |S_{fa}(E, \ell)|^2. \quad (47.11)$$

Elastse hajumise ristlõike ($f = a$) on:

$$\sigma_{el} \equiv \sigma_{aa} = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) |S_{aa}(E, \ell) - 1|^2. \quad (47.12)$$

Kui kirjutame S -maatriksi unitaarsuse tingimuse (46.10) kujul:

$$\sum_f |S_{fa}(E, \ell)|^2 = \sum_{f (f \neq a)} |S_{fa}(E, \ell)|^2 + |S_{aa}(E, \ell)|^2 = 1, \quad (47.13)$$

võime mitteelastsete protsesside summaarse ristlõike σ_{in} avaldada elastse hajumise maatrikselemendi $S_{aa}(E, \ell)$ kaudu:

$$\sigma_{in} = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) (1 - |S_{aa}(E, \ell)|^2). \quad (47.14)$$

Kuna tingimuse (47.13) põhjal $|S_{aa}(E, \ell)| < 1$, võime

Saa kirjutada kompleksarvuna,

$$S_{aa}(E, \ell) = \alpha_\ell e^{2i\eta_\ell}, \quad (47.15)$$

mille amplituud α_ℓ rahuldab tingimust $|\alpha_\ell| < 1$,
faas $2\eta_\ell$ on suvaline.

Valemid (47.12) ja (47.14) omendavad vastavalt kuju:

$$\sigma_{\ell\ell} = \frac{\pi}{ka^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)(1+\alpha_\ell^2 - 2\alpha_\ell \cos 2\eta_\ell), \quad (47.12')$$

$$\sigma_{in} = \frac{\pi}{ka^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)(1-\alpha_\ell^2). \quad (47.14')$$

Näitame, et valemiga (47.12') analoogiline valem on leitav elastse hajumise faasi avaldisest (45.15). Olgu

$$\sigma_{\ell\ell}' = \int_0^\pi d\varphi \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta |\varphi(\vartheta)|^2. \quad (47.16)$$

Legendre'i polünoomide ortogonaalsuse tõttu,

$$\int_0^\pi P_\ell(\cos \vartheta) P_{\ell'}(\cos \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta = \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'},$$

saame

$$\sigma_{\ell\ell}' = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) 4 \sin^2 \eta_\ell. \quad (47.17)$$

Valemid (47.17) ja (47.12') võrreldes näeme, et esimene taandub teiseks, kui $\alpha_\ell = 1$.

Edasi võib lugeja ise kontrollida, et kui valemi (45.14) asemel lähtume ψ_{as} avaldisest

$$\psi_{as} = \frac{i}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(\cos \vartheta) (2\ell+1) (S_\ell e^{i\eta_\ell} - (-1)^\ell e^{-i\eta_\ell}), \quad (47.18)$$

kus $S_\ell = \alpha_\ell e^{2i\eta_\ell}$, saame samade mõttekäikude põhjal, mida kasutasime valemi (47.17) tuletamiseks, valemi (47.12').

Sellel tulemusel on lihtne seletus. Puhtelastse hajumise

korral muutub ainult hajunud laine faas (pealelangeva laine ga võrreldes), kuna amplituud jääb samaks. Kui leiavad aset ka mitteelastsed protsessid, toimub elastset hajumist kirjeldava laine osaline neeldumine tsentris, järelilikult väheneb hajuva laine amplituud tsentrisse koonduva laine omaga võrreldes ($|\alpha_e| < 1$), sest teatud protsent osakesi läheb elastse hajumise kanalist (lähtekanalist) teiste protsesside kanalitesse. (Reaktsiooni kanaliteks nimetatakse reaktsiooni kulgemise võimalikke mooduseid. Igale kanalile vastab kindel lõpptulemus.)

Valemid (47.12') ja (47.14') näitavad, et:

- 1) integraalsed efektiivsed ristlõiked σ_{el} ja σ_{in} liituvad kindlale λ väärtusele vastavatest nn. partsiaalsest ristlõigetest $(\sigma_{el})_e$ ja $(\sigma_{in})_e$:
- 2) igasuguse hajumisega kaasneb alati elastne hajumine. Näiteks $(\sigma_{in})_e = 0$, kui $|\alpha_e| = 1$, kuid $(\sigma_{el})_e = 0$ ainult siis, kui $\alpha_e = 1$.

α_e korral vahemikus $-1 < \alpha_e < +1$:

$$(\sigma_{el})_e > (\sigma_{in})_e , \text{ kui } -1 < \alpha_e < 0 ;$$

$$(\sigma_{el})_e < (\sigma_{in})_e , \text{ kui } 0 < \alpha_e < 1 .$$

$$\text{Kui } \alpha_e = 0 , \text{ siis } (\sigma_{in})_e = (\sigma_{el})_e .$$

Niisiis piisab hajumisprotsessi üldiste seaduspärasuste analüüsimiseks ainult elastsele protsessile vastavast S-maatriksi elemendist (47.15), mida iseloomustab hajunud laine faas $2\eta_e$ ja amplituud α_e . Kui meid huvitavad aga konkreetsed mitteelastsed protsessid ja nende diferentsiaalsed efektiivsed ristlõiked, peame täpsustama maatriks-elemente

$\langle \phi | T | a \rangle$, kus indeksid ϕ ja a sisaldavad ka osakeste suhtelise liikumise suundi, s. t. hajumisnurki.

VII. ÜHTE LIIKI OSAKESTEST KOOSNEVAD SÜSTEEMID.

48. Eristamatuse printsiip.

Klassikalises mehhaanikas ei ole põhimõttelist vahet ühte liiki ja erinevatesse liikidesse kuuluvate osakeste süsteemide vahel. Ühte liiki kuuluvateks loetakse osakesi, millel on ühesugused välistingimustest sõltumatud karakteristikud (näit. massid) ja mis ühesugustes tingimustes käituvad ühtemoodi. Kuna kõik karakteristikud on praktiliselt määratavad ainult teatud täpsuseni, klassikalised suurused aga muutuvad pidevalt, siis on ühte liiki osakeste mõiste klassikalises mehhaanikas tinglik. Põhimõtteliselt säilitavad mistahes süsteemi kuuluvad osakesed oma individuaalsuse, s. t. kui hetkel $t = t_0$ numbrilised osakesed, mõõtes iga üksiku osakese koordinaadid ja impulsid, ja kui hetkel $t = t_1$ kordame mõõtmist, võime klassikalise mehhaanika seaduste kohaselt täpselt kindlaks teha, missuguse numbriga osake on sattunud antud punkti.

Kvantmehhaanikas on ühte liiki ja erinevatesse liikidesse kuuluvate osakeste süsteemidel kvalitatiivne erinevus, mis võimaldab täpsustada ka ühte liiki osakeste mõistet. Kui süsteemi kuuluvad osakesed alluvad eristamatuse printsiibile, siis nad on ühte liiki, vastasel korral mitte. Eristamatuse printsiibi kohaselt kaotavad süsteemi kuuluvad osakesed oma individuaalsuse eespool kirjeldatud tähenduses. Olgu kahest ühte liiki osakesest koosnev süsteem. Kui hetkel $t = t_0$ niimetame punktis P_1 asetsevat osakest osakeseks 1 ja punktis P_2 asetsevat osakeseks 2 ja kui hetkel $t = t_1$ avastame ühe osakese punktis P_3 ning teise punktis P_4 , siis ei võimalda kvantmehhaanika võrrandid kindlaks teha, kumb osake sattus punkti P_3 ja kumb punkti P_4 .

Osakeste eristamatust tuleb arvestada süsteemi hamiltoniaani konstrueerimisel. Tähistagu q_k k-nda osakese koordinaatide ja spini projektsiooni kompleksi. Koosnevu süsteem N ühte liiki osakesest. Siis ei tohi eristamatuse printsiibi kohaselt mistahes 1-nda ja k-nda osakese vahetamine kajastuda süsteemi käitumisel

$$\hat{H}(q_1, \dots, q_i, \dots, q_k, \dots, q_N) = \hat{H}(q_1, \dots, q_k, \dots, q_i, \dots, q_N) \quad (48.1)$$

s. t. ühte liiki osakeste süsteemi hamiltoniaan on invariantne mistahes osakeste paari vahetamise suhtes.

Tähistame 1-nda ja k-nda osakese vahetamise operaatori sümboliga P_{ik} , siis

$$\hat{P}_{ik} f(q_1, \dots, q_i, \dots, q_k, \dots, q_N) = f(q_1, \dots, q_k, \dots, q_i, \dots, q_N), \quad (48.2)$$

kus f on mistahes funktsioon. \hat{H} invarianttsuse nõude või-

me nüüd kirjutada kujul

$$[\hat{P}_{i\kappa}, \hat{H}(q_1, \dots, q_i, \dots, q_\kappa, \dots)] = \hat{P}_{i\kappa} \hat{H}(\dots, q_i, \dots, q_\kappa, \dots) - \hat{H}(\dots, q_\kappa, \dots, q_i, \dots) \hat{P}_{i\kappa} = 0, \quad (48.3)$$

s. t. ühte liiki osakestest koosneva süsteemi korral on suurused $\hat{P}_{i\kappa}$ liikumisintegraalideks.

Leiame $\hat{P}_{i\kappa}$ omaväärtused.

Olgu $\psi(q_1, \dots, q_N)$ süsteemi olekufunktsioon. Valemi (48.2) põhjal

$$\begin{aligned} \hat{P}_{i\kappa} \psi(\dots, q_i, \dots, q_\kappa, \dots) &= \psi(\dots, q_\kappa, \dots, q_i, \dots); \\ \hat{P}_{i\kappa}^2 \psi(\dots, q_i, \dots, q_\kappa, \dots) &= \hat{P}_{i\kappa} \psi(\dots, q_\kappa, \dots, q_i, \dots) = \\ &= \psi(\dots, q_i, \dots, q_\kappa, \dots). \end{aligned} \quad (48.4)$$

Valem (48.4) näitab, et $\hat{P}_{i\kappa}^2$ omaväärtus on $+1$, seega operaatori $\hat{P}_{i\kappa}$ omaväärtused on $+1$ või -1 .

Kuna $\hat{P}_{i\kappa}$ on liikumisintegraaliks sõltumatult välisingimustest, võivad omaväärtused $+1$ või -1 sõltuda ainult süsteemi kuuluvate osakeste nn. seesmistest karakteristikutest.

49. Fermionid ja bosonid. Pauli printsip.

Kooskõlas eristamatuse printsiibiga jagunevad kõik osakesed kahte suurde klassi. Neid osakesi, millele süsteeme kirjeldavad mistahes paari vahetamise suhtes sümmeetrilised olekufunktsioonid (operaatori $\hat{P}_{i\kappa}$ omaväärtus $+1$), ni-

metatakse Bose osakesteks e. bosoniteks (vastavalt statisti-
kale, millele need süsteemid alluvad). Kui olekufunktsioon on
antisümmeetriline (P_{ik} omaväärtus -1), nimetatakse
süsteemi kuuluvaid osakesi fermionideks.

Koosnegu süsteem N osakesest, milledevahelist inter-
aktsiooni võib jätta arvestamata. Iseloomustagu osakeste ole-
kuid vastavalt kvantarvude kompleksid K_1, K_2, \dots, K_N .

Kui süsteem koosneb erinevat liiki osakestest, võime te-
da kirjeldada funktsiooniga

$$\Psi_{K_1 \dots K_N}(q_1, \dots, q_N) = \Psi_{K_1}(q_1) \dots \Psi_{K_N}(q_N). \quad (49.1)$$

Ühte liiki osakestest koosneva süsteemi korral tuleb ar-
vestada sümmeetria nõudeid.

Kui osakesteks on bosonid, peame (49.1) tüüpi funktsiio-
nidest moodustama sümmeetrilised kombinatsioonid, s. t.

$$\begin{aligned} \Psi_{K_1 \dots K_N}^{(+)}(q_1, \dots, q_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \left\{ \Psi_{K_1}(q_1) \Psi_{K_2}(q_2) \dots \Psi_{K_N}(q_N) + \right. \\ &+ \Psi_{K_1}(q_2) \Psi_{K_2}(q_1) \dots \Psi_{K_N}(q_N) + \dots \left. \right\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum P(q) [\Psi_{K_1}(q_1) \dots \Psi_{K_N}(q_N)]. \end{aligned} \quad (49.2)$$

Valemis (49.2) tähistab sümbol $P(q)$ argumentide q_1, \dots, q_N
permutatsiooni, kusjuures summa sisaldab $N!$ liiget, vasta-
valt võimalike permutatsioonide arvule. Kordaja $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ tagab
 $\Psi_{K_1 \dots K_N}^{(+)}$ normeerituse, kui iga üksik funktsioon $\Psi_{K_1},$
 \dots, Ψ_{K_N} on normeeritud.

Kui osakesteks on fermionid, tuleb (49.1) tüüpi funktsi-
onidest moodustada mistahes osakeste paari vahetamise suhtes

antisümmeetriline funktsioon $\psi_{k_1 \dots k_N}^{(-)}$. Sellise funktsiooni võime esitada N järku determinandi kujul:

$$\psi_{k_1 \dots k_N}^{(-)}(q_1, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(q_1) & \psi_{k_1}(q_2) & \dots & \psi_{k_1}(q_N) \\ \psi_{k_2}(q_1) & \psi_{k_2}(q_2) & \dots & \psi_{k_2}(q_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{k_N}(q_1) & \psi_{k_N}(q_2) & \dots & \psi_{k_N}(q_N) \end{vmatrix} \quad (49.3)$$

Osakeste interaktsiooni korral ei iseloomusta olekufunktsiooni üldiselt rääkides enam kindlad kvantarvude kompleksid k_1, \dots, k_N . Sel juhul on sümmeetriline olekufunktsioon konstrueeritav (49.2) tüüpi funktsioonide lineaarkombinatsioonina

$$\phi^{(+)}(q_1, \dots, q_N) = \sum_{k_1 \dots k_N} a_{k_1 \dots k_N} \psi_{k_1 \dots k_N}^{(+)}(q_1, \dots, q_N), \quad (49.4)$$

kus $a_{k_1 \dots k_N}$ on arenduse kordajad.

Fermionide korral saame vastavalt

$$\phi^{(-)}(q_1, \dots, q_N) = \sum_{k_1 \dots k_N} b_{k_1 \dots k_N} \psi_{k_1 \dots k_N}^{(-)}(q_1, \dots, q_N). \quad (49.5)$$

Vaatleme funktsiooni (49.5) ainult kahest osakesest koosneva süsteemi korral. Siis

$$\psi_{k_1 k_2}^{(-)}(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} [\psi_{k_1}(q_1) \psi_{k_2}(q_2) - \psi_{k_1}(q_2) \psi_{k_2}(q_1)] \quad (49.6)$$

ja

$$\phi^{(-)}(q_1, q_2) = \sum_{k_1 k_2} b'_{k_1 k_2} [\psi_{k_1}(q_1) \psi_{k_2}(q_2) - \psi_{k_1}(q_2) \psi_{k_2}(q_1)],$$

$$b'_{k_1 k_2} = \frac{1}{\sqrt{2!}} b_{k_1 k_2}.$$

Arvestades, et k_1 ja k_2 on summeerimisindeksid, mis

kulgevad üle samade väärtuste, asendame teises liikmes kõikjal $\kappa_1 \rightarrow \kappa_2$ ja $\kappa_2 \rightarrow \kappa_1$, saame

$$\begin{aligned} \phi^{(-)}(q_1, q_2) &= \sum_{\kappa_1, \kappa_2} (b'_{\kappa_1, \kappa_2} - b'_{\kappa_2, \kappa_1}) \psi_{\kappa_1}(q_1) \psi_{\kappa_2}(q_2) = \\ &= \sum_{\kappa_1, \kappa_2} c_{\kappa_1, \kappa_2} \psi_{\kappa_1}(q_1) \psi_{\kappa_2}(q_2); \end{aligned} \quad (49.7)$$

$$c_{\kappa_1, \kappa_2} = -c_{\kappa_2, \kappa_1} = b'_{\kappa_1, \kappa_2} - b'_{\kappa_2, \kappa_1}. \quad (49.8)$$

Valemis (49.7) annab kordaja C_{κ_1, κ_2} mooduli ruut tõesaosuse leida üks osake olekus κ_1 , teine olekus κ_2 . Valemist (49.8) järgneb

$$|c_{\kappa\kappa}|^2 = 0. \quad (49.9)$$

S. t. tõesaosus leida fermionide süsteemis kahte osakest ühes ja samas kvantolekus ($\kappa_1 = \kappa_2 = \kappa$) on null. See tulemus kannab Pauli printsiibi nimetust. Tuletuskäigust nähtub, et Pauli printsiip kehtib ainult fermionide korral, kuna bosonit korral osutuks C_{κ_1, κ_2} -le vastav kordaja sümmeetriliseks indeksiteks κ_1 ja κ_2 .

Mitterelativistlikus lähenduses käsitletavates probleemides ei sõltu hamiltoniaan tavaliselt osakeste spinmuutujatest. Siis võime olekufunktsiooni otsida spinfunktsiooni $\chi(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ ja koordinaatidest sõltuva funktsiooni $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ korrutisena

$$\Psi(q_1, \dots, q_N) = \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \chi(\sigma_1, \dots, \sigma_N) \quad (49.10)$$

Sümmeetrilise funktsiooni $\Psi^{(+)}(q_1, q_2)$ saame kahel viisil:

$$\Psi^{(+)}(q_1, q_2) = \begin{cases} \varphi^{(+)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi^{(+)}(\sigma_1, \sigma_2), \\ \varphi^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi^{(-)}(\sigma_1, \sigma_2). \end{cases} \quad (49.11)$$

Analoogiliselt võime $\psi^{(\pm)}(q_1, q_2)$ esitada kujul:

$$\psi^{(\pm)}(q_1, q_2) = \begin{cases} \varphi^{(+)}(\vec{n}_1, \vec{n}_2) \chi^{(-)}(b_1, b_2), \\ \varphi^{(-)}(\vec{n}_1, \vec{n}_2) \chi^{(+)}(b_1, b_2). \end{cases} \quad (49.12)$$

Kui hamiltoniaan ei sõltu spinmuutujaist, näiteks

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right) + \mathcal{U}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N),$$

jäävad funktsioonid χ täpsustamata. Spinide suhtelise orientatsiooni mõju (funktsiooni χ sümmeetria omadused) avaldub aga koordinaatide funktsioonide φ sümmeetria omadustes. Nagu selgub He-aatomi juhust, sõltuvad näiteks süsteemi omaväärtused sellest, kas koordinaatfunktsioon on kujul $\varphi^{(+)}$ või $\varphi^{(-)}$.

50. Heeliumi aatom. Vahetusmõju.

Heeliumisarnase aatomi elektronkate on lihtsaim fermionide süsteem (koosneb kahest elektronist), mida teatud täpsuseni võime vaadelda antud kulonilises väljas (lõpmata raske tuuma väli) viibivana.

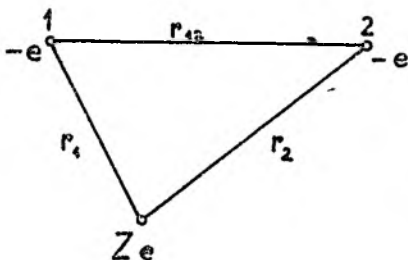
Mitterelativistlikus lähenduses kirjeldab seda süsteemi Hamiltoni operaator

$$\hat{H}(\vec{n}_1, \vec{n}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 - \frac{2Ze^2}{r_1} - \frac{2Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}, \quad (50.1)$$

kus Ze on tuuma laeng. Valemis (50.1) kasutatud tähistused r_1 , r_2 , r_{12} selguvad jooniselt G, kus numbrid 1 ja 2 tähistavad elektrone.

Kvalitatiivsete tulemuste saamiseks käsitleme elektronide vastastikust mõju (viimane liige valemis (50.1)) häiritusena, s. t.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \quad (50.2)$$



kus

$$\hat{H}' = \frac{e^2}{r_{12}},$$

$$\hat{H}_0 = \sum_{\kappa=1}^2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\kappa}} \Delta_{\kappa} - \frac{Ze^2}{r_{\kappa}} \right). \quad (50.3)$$

Joon. G.

Nn. "häirimata" süsteemi omaväärtusvõrrandi

$$\hat{H}_0 \psi_0 = E_0 \psi_0 \quad (50.4)$$

lahendeiks on vesiaikusarnase aatomi omafunktsioonid ja omaväärtused, s. t. $E_0 = E_{n_1} + E_{n_2}$,

$$\psi_0 = \psi_1 = \psi_{k_1}(\vec{r}_1) \psi_{k_2}(\vec{r}_2) \quad \text{või} \quad (50.5)$$

$$\psi_0 = \psi_2 = \psi_{k_2}(\vec{r}_1) \psi_{k_1}(\vec{r}_2),$$

kus n_1 ja n_2 on peakvantarvu mõnesugused väärtused, k_1 ja k_2 on kvantarvude n_1, l_1, m_1 ja n_2, l_2, m_2 kompleksid.

Kuna võrrandit (50.4) rahuldavad mõlemad funktsioonid

ψ_1 ja ψ_2 sama omaväärtuse korral, tuleb rakendada häirituservutust kõdunud juhul. S. t. võrrandist

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}')(\psi_0 + \varphi) = (E_0 + \varepsilon)(\psi_0 + \varphi)$$

tuletatud võrrandis häiritusliikme φ jaoks,

$$(\hat{H}_0 - E_0)\varphi = (\varepsilon - \hat{H}')\psi_0, \quad (50.6)$$

peame ψ_0 võtma järgmisekujulise lineaarkombinatsioonina

$$\psi_0 = C_1 \psi_1 + C_2 \psi_2. \quad (50.7)$$

Kooskõlas häiritusarvutusega kõdunud juhul (9.41) saame konstantide C_1 ja C_2 ning energia paranduse ε määramiseks vastavalt valemid:

$$\begin{aligned} (H'_{11} - \varepsilon) C_1 + H'_{12} C_2 &= 0, \\ H'_{21} C_1 + (H'_{22} - \varepsilon) C_2 &= 0; \end{aligned} \quad (50.8)$$

$$\begin{vmatrix} K - \varepsilon & A \\ A & K - \varepsilon \end{vmatrix} = 0. \quad (50.9)$$

Siin on kasutatud järgmisi tähistusi:

$$K \equiv H'_{11} = e^2 \int \frac{|\psi_{k_1}(\vec{r}_1)|^2 |\psi_{k_2}(\vec{r}_2)|^2}{r_{12}} (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = H'_{22} \quad (50.10)$$

on kahe elektroni kuloniline energia, kui üks elektron on olekus k_1 , teine olekus k_2 ;

$$\begin{aligned} A \equiv H'_{12} &= e^2 \int \frac{\psi_{k_1}^*(\vec{r}_1) \psi_{k_2}(\vec{r}_1) \psi_{k_2}^*(\vec{r}_2) \psi_{k_1}(\vec{r}_2)}{r_{12}} (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = \\ &= H'_{21} \end{aligned} \quad (50.11)$$

on elektronide nn. vahetusenergia.

Võrrandeist (50.8, 9) järgneb, et He -aatomil on antud kvantarvude k_1 ja k_2 puhul kaks võimalikku olekut, millele vastavad erinevad energilaväärtused:

paraseisund: $E_s = E_{n_1} + E_{n_2} + K + A,$

$$\phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 + \psi_2); \quad (50.12)$$

ortoseisund: $E_a = E_{n_1} + E_{n_2} + K - A,$

$$\phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 - \psi_2). \quad (50.13)$$

Kooskõlas § 49 tulemustega peab täielik lainefunktsioon, mis arvestab nii koordinaate kui ka spinmuutujaid, olema antisümmeetriline. Seega vastab ortoseisundile sümmeetriline spin-funktsioon $\chi_S(\sigma_1, \sigma_2)$ (elektronide spinid paralleelsed) ja para-seisundile antisümmeetriline funktsioon $\chi_A(\sigma_1, \sigma_2)$ (elektronide spinid antiparalleelsed). Jättes esimeses lähenduses arvestamata spinide vastastikusest mõjust tingitud liikmed hamiltoniaanis, võime $\chi_S(\sigma_1, \sigma_2)$ ja $\chi_A(\sigma_1, \sigma_2)$ moodustada funktsioonide $\chi_{\pm \frac{1}{2}}(\sigma_1)$ ja $\chi_{\pm \frac{1}{2}}(\sigma_2)$ korrutiste lineaarkombinatsioonidest. $\chi_{+\frac{1}{2}}$ tähistab spini projektsiooni omafunktsiooni, mis vastab omaväärtusele $+\frac{\hbar}{2}$ ($\chi_{-\frac{1}{2}}$ vastavalt omaväärtusele $-\frac{\hbar}{2}$.)

Antisümmeetrilisi funktsioone saame ainult ühe:

$$\chi_A(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi_{+\frac{1}{2}}(\sigma_1) \chi_{-\frac{1}{2}}(\sigma_2) - \chi_{+\frac{1}{2}}(\sigma_2) \chi_{-\frac{1}{2}}(\sigma_1) \right],$$

sümmeetrilisi aga kolm

$$\chi_S(\sigma_1, \sigma_2) = \begin{cases} \chi_{+\frac{1}{2}}(\sigma_1) \chi_{+\frac{1}{2}}(\sigma_2), \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi_{+\frac{1}{2}}(\sigma_1) \chi_{-\frac{1}{2}}(\sigma_2) + \chi_{+\frac{1}{2}}(\sigma_2) \chi_{-\frac{1}{2}}(\sigma_1) \right], \\ \chi_{-\frac{1}{2}}(\sigma_1) \chi_{-\frac{1}{2}}(\sigma_2). \end{cases}$$

Kõrgemates lähendustes vastab igale spinifunktsioonile muude kvantarvude samadel väärtustel isesugune energia. Seega on ortoheeliumi energiatasemetel faktiliselt tripletne struktuur, paraheeliumi omadel aga singuletne. Nagu valemest (50.12, 13) näha, võib kooskõlas Pauli printsibiiga olla madalaim energiatase [$k_1 = k_2 = (n=1, \ell=0, m=0)$] ainult paraheeliumi tase.

Näitame, et valemiga (50.11) defineeritud vahetusenergia

põhjustab tõepoolest erilise vahetusefekti elektronide olekute vahel. Selleks vaatleme mõnesugust mittestatsionaarset olekut ϕ , mille moodustame statsionaarsete olekute

$$\phi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 + \psi_2) e^{-\frac{i}{\hbar} E_s t} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 + \psi_2) e^{-\frac{i}{\hbar} (E_0 + K + A) t}$$

ja

$$\phi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 - \psi_2) e^{-\frac{i}{\hbar} E_a t} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 - \psi_2) e^{-\frac{i}{\hbar} (E_0 + K - A) t}$$

lineaarkombinatsioonina:

$$\begin{aligned} \phi &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_s + \phi_a) = \\ &= \frac{1}{2} e^{-i\omega_0 t} \left\{ \psi_1 (e^{-i\delta t} + e^{i\delta t}) + \psi_2 (e^{-i\delta t} - e^{i\delta t}) \right\}. \end{aligned} \quad (50.14)$$

Valemis (50.14) oleme liikmed grupeerinud järgmiselt:

$$\phi = c_1(t) \psi_1 + c_2(t) \psi_2, \quad (50.15)$$

kus

$$\begin{aligned} c_1(t) &= e^{-i\omega_0 t} \cos \delta t; \\ c_2(t) &= i e^{-i\omega_0 t} \sin \delta t; \end{aligned} \quad (50.16)$$

$$\omega_0 = \frac{E_0 + K}{\hbar}; \quad \delta = \frac{A}{\hbar}.$$

Pidades silmas ψ_1 ja ψ_2 definitsiooni (valem (50.5)) näeme, et $|c_1(t)|^2$ annab tõenäosuse leida momendil t esimest elektroni olekus k_1 , teist olekus k_2 ; $|c_2(t)|^2$ annab tõenäosuse, et hetkél t on esimene elektron olekus k_2 ja teine olekus k_1 .

Kuna

$$|c_1(t)|^2 = \cos^2 \frac{A}{\hbar} t; \quad |c_2(t)|^2 = \sin^2 \frac{A}{\hbar} t, \quad (50.17)$$

siis näeme, et funktsiooni (50.14) oleme moodustanud nii, et alghetkel ($t=0$) esimene elektron oleks olekus κ_1 ja teine olekus κ_2 .

$$\text{Kui } \frac{A}{\hbar} t = \frac{\pi}{2}, \text{ s. o. } t = \tau = \frac{\hbar \pi}{2A}, \text{ siis}$$

$$|c_1(\tau)|^2 = 0; |c_2(\tau)|^2 = 1,$$

s. t. pärast τ sekundi möödumist vahetasid elektronid oma olekud. Vahetamise sagedus on järelikult võrdeline vahetus-energiaga A .

A definitsioonivalemist (50.11) järeleb, et A on oluliselt nullist erinev vaid siis, kui piirkonnad, kus funktsioonid ψ_{κ_1} ja ψ_{κ_2} on nullist erinevad, enam-vähem kattuvad. Seda esineb siis, kui peakvantarvud n_1 ja n_2 märgatavalt ei erine. Niisiis on vahetumõju tugevaim lähestikuste olekute vahel.

51. Elementide perioodilisuse süsteem.

Aatomite elektronkatte uurimisel võib lähtuda oletusest, et igale üksikule elektronile mõjuv väli on tsentraalsümmeetriline. Tsentraalse välja lähend on seda parem, mida suurem on aatomi järjenumber Z . Küllalt kaugel tuumast võib elektroni potentsiaalset energiat neutraalses aatomis lugeda kuloniliseks, s. t. $U(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{e^2}{r}$. Seetõttu on võimalik üksikute elektronide olekuid iseloomustada kvantarvude nelikuga n, l, m_l ja m_s , kusjuures $0 \leq l \leq n-1$; $-l \leq m_l \leq l$; $m_s = \pm \frac{1}{2}$ iseloomustab elektroni spini

projektsiooni. Vastavalt Pauli printsiibile võib aatomis olla ainult üks elektron antud kvantarvude nelikuga. Kuna üldises tsentraalsümmeetrilises (mittekulonilises) väljas, on energia määratud kvantarvudega (n, ℓ) ja fikseeritud (n, ℓ) -le vastab $2(2\ell + 1)$ olekut (m_s ja m_ℓ väärtustega määratud), siis kooskõlas Pauli printsiibiga võib ühes kihis (määratud n ja ℓ väärtustega) olla maksimaalselt $2(2\ell + 1)$ elektroni. Aatomi järjekorranumbri Z suurenemisel suureneb elektronide arv ja seega ka täidetud kihtide arv.

Spektroskoopias tähistatakse kvantarvuga ℓ iseloomustatud kihte tähtedega $s (\ell=0)$, $p (\ell=1)$, $d (\ell=2)$, $f (\ell=3)$, $g (\ell=4)$, $h (\ell=5)$, ..., kuna kvantarvu n väärtused kirjutatakse välja numbritega. Spektroskoopilistest andmetest selgub, et enamikus aatomites võime kihid reastada nendele vastava energia kasvamise järjekorras järgmiselt:

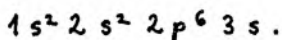
$$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, (4s, 3d), 4p, (5s, 4d), \\ 5p, (6s, 4f, 5d), 6p, (7s, 5f, 6d). \quad (51.1)$$

Sulgudesse paigutatud kihtides on energiad peaaegu võrdsed, mistõttu kihtide täitumisel elektronidega võib esineda kõrvalekaldumisi esitatud järjekorrast. Igas sulus täitub esmalt s -kiht, kui aga lisanduvad juba järgmised kihid, võib mõni s -elektron üle minna mõnda teise (d - või f -) kihti. Põhjus, miks näiteks tasemele $4s$ vastav energia võib osutada väiksemaks kui tasemele $3d$ vastav energia, on seletav teiste elektronide ekraaneeriva toime kahanemisega väikesel ℓ väärtuste puhul, kuna siis tungib elektron tuuma-

le lähemale (ekstsentrilised elliptilised orbiidid Bohri teoorias).

Järjestusest (51.1) nähtub, et väliselektronide (nn. valentselektronid, mis määravad aatomi keemilised omadused) konfiguratsioon kordub alates igast uuest s-tasemest. Seega algab iga uue s-taseme täitmisega uus periood. Elementide arvu perioodis saame jadast (31.1), kui arvestame, et igas s-kihis võib olla 2, p-kihis 6, d-kihis 10, f-kihis 14 jne. elektroni /üldiselt $2(2\ell + 1)/$.

Ühe kihi $((n, \ell)$ -ga määratud) elektrone nimetatakse ekvivalentseteks. Elektronide konfiguratsiooni tähistuses märgitakse ekvivalentsete elektronide arv vastava taseme juurde astmenäitajana. Näiteks Na põhioleku konfiguratsioon on



Antud elektronide konfiguratsioon ei määra üheselt elektronkatte kui terviku energiateme. Kui käsitleda elektronkatte mitterelativistlike fermionide süsteemina efektiivses tsentraalses väljas (tekitatud nii tuuma kui ka kõikide elektronide poolt), on süsteemi liikumisintegraalideks paarsus, summaarse orbitaalse momendi absoluutväärtus (kvantarv L) ja summaarse spini absoluutväärtus (kvantarv S). Spinorbitaalse interaktsiooni tõttu, mida kõrgemates lähendustes tuleb arvestada, laguneb iga (L, S) -ga iseloomustatud tase alatasemeteks, millele vastab kindel kvantarvu J väärtus, mis iseloomustab koguimpulssmomendi absoluutväärtust.

Antud konfiguratsioonile vastavad võimalikud termid

(tähistatakse suurte tähtedega $S, P, D, F \dots$ vastavalt L väärtustele $0, 1, 2, 3, \dots$, kusjuures üles vasakule märgitakse arv $2S + 1$, näiteks 2P , mille puhul $S = \frac{1}{2}$, $L = 1$) leitakse impulssmomentide liitmise seaduse alusel. Ekvivalentsete elektronide puhul tuleb täiendavalt arvestada Pauli printsiipi.

52. Aatomi efektiivse välja arvutamise meetodeid.

(a) Aatomi elektronkattete mõjuva tsentraalse välja ligikaudseks arvutamiseks on mitu meetodit. Põhimõtteliselt mistahes aatomi puhul on rakendatav nn. kooskõlastatud välja meetod (tuntud ka Hartree-Focki meetodina). Selle meetodi idee kohaselt on k -ndale elektronile mõjuvat välja võimalik arvutada, kui on teada tuuma potentsiaal ja kõikide teiste elektronide olekufunktsioonid. Seejuures avaldub i -nda elektroni laengutihedus

$$\rho_i(\vec{r}_i) = e |\phi_i(\vec{r}_i)|^2.$$

Sellele vastavalt saame k -ndale elektronile Schrödingeri võrrandi

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_k - \frac{Ze^2}{r_k} + \right. \\ & \left. + \sum_{i \neq k} \int |\phi_i(\vec{r}_i)|^2 \frac{e^2}{r_{ik}} (d\vec{n}_i) \right] \phi_k(\vec{r}_k) = \\ & = \epsilon_k \phi_k(\vec{r}_k), \quad k = 1, 2, \dots, Z. \end{aligned} \tag{52.1}$$

Saadud Z vörrandist koosneva süsteemi lahendamisel võetakse potentsiaalne energia (vörrandi kolmas liige) nullindas lähenduses vabalt ette ja leitakse vastavad funktsioonid $\phi_i^{(0)}$. Seejärel paigutatakse $\phi_i^{(0)}$ vörrandi (52.1) kolmandas liikmes esinevasse integraali, keskmistatakse üle vektori \vec{r}_k suundade (et saada tsentraalsümmeetrilist probleemi) ja leitakse vastavad lahendid $\phi_k^{(1)}$. Edasi paigutatakse $\phi_i^{(1)}$ vörrandis (52.1) esinevasse integraali, keskmistatakse üle \vec{r}_k suundade ja leitakse lahendid $\phi_k^{(2)}$, jne. Seega täpsustub koos lahendi täpsustamisega ka elektronidele mõjuv efektiivne väli (siit pärinebki meetodi nimetus).

Vörrandid (52.1) on tuletatavad variatsiooniprintsiibist. Kui elektronide süsteemi olekufunktsiooni esitame

$$\Psi(q_1, \dots, q_Z) = \psi_1(q_1) \dots \psi_Z(q_Z), \quad (52.2)$$

kus

$$\psi_i(q_i) = \phi_i(\vec{r}_i) \chi_i(\sigma_i),$$

ja Hamiltoni operaatori

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^Z \hat{H}_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k=1}^Z \frac{e^2}{r_{ik}},$$

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \frac{Ze^2}{r_i},$$

saame koguenergiale E avaldise

$$\begin{aligned} E &= \int \Psi^* \hat{H} \Psi dq_1 \dots dq_Z = \\ &= \sum_{i=1}^Z \int \phi_i^*(\vec{r}_i) \hat{H}_i \phi_i(\vec{r}_i) (d\vec{r}_i) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i \neq k=1}^Z \iint \frac{|\phi_i(\vec{r})|^2 |\phi_k(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} (d\vec{r})(d\vec{r}') = \end{aligned}$$

$$= \sum_{i=1}^Z H_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k=1}^Z U_{ik}, \quad (52.3)$$

kus

$$H_{ii} = \int \phi_i^* \hat{H}_i \phi_i (d\vec{r}_i),$$

$$U_{ik} = e^2 \iint \frac{|\phi_i(\vec{r}_i)|^2 |\phi_k(\vec{r}_k)|^2}{r_{ik}} (d\vec{r}_i)(d\vec{r}_k). \quad (52.4)$$

Valemiga (52.3) defineeritud suuruse E minimumitingimus ($\delta E = 0$) koos Z lisatingimusega ($\int |\phi_i|^2 (d\vec{r}_i) = 1$, $i = 1, 2, \dots, Z$) annabki võrrandsüsteemi (52.1), kus ε_k -del on Lagrange'i kordajate tähendus.

Võrranditest (52.1) avaldame parameetrid ε_k , korrutades mõlemad pooli $\phi_k^*(\vec{r}_k)$ -ga ja integreerides:

$$\varepsilon_k = H_{kk} + \sum_{i=1}^Z U_{ki}. \quad (52.5)$$

Võrdlus valemiga (52.3) annab seose koguenergia E ja võrrandsüsteemis (52.1) esinevate parameetrite ε_k vahel:

$$E = \sum_{k=1}^Z \varepsilon_k - \frac{1}{2} \sum_{i \neq k=1}^Z U_{ik}. \quad (52.6)$$

Kirjeldatud meetodis ei ole seni arvestatud eristamatuse printsibist järgnevaid olekufunktsioonide sümmeetriaomadusi (Hartree lähendus). Focki idee kohaselt asendatakse süsteemi lihtne olekufunktsioon (52.2) täielikult antisümmeetrilise funktsiooniga

$$\Psi(q_1, \dots, q_Z) = \frac{1}{\sqrt{Z!}} \begin{vmatrix} \psi_1(q_1) & \dots & \psi_1(q_Z) \\ \dots & \dots & \dots \\ \psi_Z(q_1) & \dots & \psi_Z(q_Z) \end{vmatrix}. \quad (52.7)$$

ja tuletatakse (52.1)-le vastavad võrrandid variatsiooniprintsiibist ($\delta E = 0$), kusjuures E avaldises arvestatakse juba ainult koordinaatidest sõltuvate funktsioonide sümmeetria omadusi (sõltuvalt elektronide spinide suhtelisest orientatsioonist) Hartree võrranditest arvutatud olekufunktsioonid võetakse Focki võrranditesse tavaliselt nullinda lähendina.

(b) Suure järjekorranumbriga aatomite korral annab küllalt häid tulemusi tsentraalse välja arvutamisel Thomas-Fermi statistiline mudel. Arvestades, et rasketes aatomites on enamikul elektronidel suured peakvantarvu väärtused ja järelikult ka suured energiad, võime neid käsitleda kvaasiklassikaliste partiklitena, pidades ainult silmas Fermi-Diraci statistika seadusi, millele elektronid alluvad.

Vaatleme elektrone faasiruumis, mille punktid on määratud elektroni impulsside ja koordinaatide väärtustega. Kui elektroni impulss on vahemikus $(0, p)$ ja ta on suletud ruumalasse dV , siis on vastav faasiruumi ruumala $d\Omega$:

$$d\Omega = \frac{4}{3} \pi p^3 dV.$$

6 -dimensionaalne faasiruum koosneb rakkudest, mille suurus määratakse kooskõlas kvaasiklassikalise kvanttingimusega $\prod_{i=1}^3 p_i dq_i = \prod_{i=1}^3 2\pi \hbar$. Seega sisaldab ruumala $d\Omega$ N faasirakku, kus $N = \frac{4}{3} \frac{\pi p^3 dV}{(2\pi \hbar)^3}$.

Kuna igas rakus võib olla ainult 2 elektroni (mis erinevad spini orientatsioonilt), saame elektronide arvu dn ruumalas dV ja maksimaalse impulsiga p_0 :

$$dn = 2N = \frac{p_0^3}{3\pi^2 \hbar^3} dV$$

või elektronide tiheduse ρ ($\rho = \frac{dn}{dV}$) :

$$\rho = \frac{p_0^3}{3\pi^2 \hbar^3} . \quad (52.8)$$

Kui elektron viibib elektriväljas, mida iseloomustab potentsiaal φ , siis avaldub tema koguenergia:

$$E = E_{kin} - e\varphi .$$

Neutraalse aatomi korral $E_{max} = E_{kin}^{max} - e\varphi = 0$, millest

$$E_{kin}^{max} = e\varphi . \quad (52.9)$$

Teiselt poolt

$$E_{kin}^{max} = \frac{p_0^2}{2m} = \frac{1}{2m} (3\pi^2 \rho)^{\frac{2}{3}} \hbar^2 . \quad (52.10)$$

Valemite (52.9) ja (52.10) võrdlus võimaldab elektronide tiheduse avaldada nende mõjuva potentsiaali kaudu:

$$\rho = \frac{\sqrt{8}}{3\pi^2} \left(\frac{m e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \varphi^{3/2} . \quad (52.11)$$

Kui avaldise (52.11) paigutame Poissoni võrrandisse skalaarse potentsiaali jaoks,

$$\Delta \varphi = -4\pi \rho ,$$

saame Thomas-Fermi mudeli põhivõrrandi

$$\Delta \varphi = - \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \left(\frac{m e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \varphi^{3/2} , \quad (52.12)$$

mis tuleb lahendada ääretingimustel $e\varphi(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} - \frac{Ze^2}{r}$

(tuuma läheduses tuleb oluliselt arvesse ainult tuuma potent-

siaal), $r \varphi(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$ (neutraalse aatomi korral on summaarne laeng lõplikus ruumalas null, mistõttu potentsiaalne energia peab kahanema kiiremini kui r^{-1}).

Asendustega

$$r \varphi(r) = - \frac{Z e^2}{r} \chi, \quad r = b x,$$

$$b = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{m e^2} Z^{-1/3} = 0,885 a Z^{-1/3},$$

$$a = \frac{\hbar^2}{m e^2}$$

on võrrand (52.12) taandatav järgmiseks

$$x^{1/2} \frac{d^2 \chi}{dx^2} = \chi^{3/2} \quad (52.13)$$

lisatingimustega

$$\chi = 1, \quad \text{kui } x = 0; \quad \chi = 0, \quad \text{kui } x \rightarrow \infty.$$

Võrrandi (52.13) lahendamiseks kasutatakse numbrilisi meetodeid. Statistilise mudeli eeliseks on tema lihtsus. Ta annab hea lähenduse niisuguste suuruste arvutamisel, mis muutuvad monotoonselt aatomi järjenumbriga.

53. Molekulide energiatasemete liigitus.

Molekulide energiatasemete arvutamisel lähtutakse tõsisasjast, et tuumade liikumise energia (tänu suurtele massidele) on palju kordi väiksem elektronide energiast. Seetõttu võib elektronkatte struktuuri uurimisel lugeda tuumi esimeses lähenduses paigalolevaiks (nn. adiabaatne lähendus). Tuu-

nade liikumisest tingitud parandusliikmete leidmisel võib oletada, et igale hetkelisele tuumade konfiguratsioonile vastab statsionaarne elektronkatte olek. Kooskõlas oletusega, et igas molekulis eksisteerib stabiilne tasakaaluolekule vastav tuumade konfiguratsioon, iseloomustab tuumade liikumist selle konfiguratsiooni translatsioon, rotatsioon ja tuumade võnkumised tasakaaluasendi ümber. Kuna translatoorne liikumine ei tule arvesse molekuli energiatasemete kirjeldamisel, võib molekuli energiatasemeid liigitada elektroonseiks, ostsillatoorseiks ja rotatoorseiks.

Leiame nende energiatega suurusjärgud. Kui a on molekuli lineaarmõõde, siis kooskõlas määramatuserelatsiooniga on elektroni impulss suurusjärgus $p \sim \frac{h}{a}$ ning vastavalt kineetiline energia $E_{kin} \sim \frac{h^2}{ma^2}$. Sama suurusjärgu on ka koguenergiat, niisiis

$$E_{el} \sim \frac{h^2}{ma^2} \quad (53.1)$$

Ostsillatoorse energia suurusjärgu leiame järgmistel kaalutlustel. Kvantmehhaanilise ostsillaatori energia on suurusjärgus $\hbar\omega$, kus ω on nn. klassikaline sagedus. ω leidmiseks arvestame ostsillaatori potentsiaalse energia klassikalist valemit

$$E_{pot} = \frac{M\omega^2}{2} x^2, \quad (53.2)$$

kus M on antud juhul tuuma mass, x - hälve tasakaaluasendist. Suured hälbed, kus $x \sim a$, muudavad ka elektronkatte olekuid, mistõttu nendele hälvetele vastav energia osutub suu-

rusjärgult võrreldavaks E_{el} -ga. Kõrvutades valemuid (53.2) ja (53.1) (asendades esimeses $\lambda \sim a$), saame hinnangu ω -le:

$$\omega \sim \frac{\hbar}{ma^2} \left(\frac{m}{M} \right)^{\frac{1}{2}},$$

millest

$$E_0 \sim \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{m}{M} \right)^{\frac{1}{2}} \sim \left(\frac{m}{M} \right)^{\frac{1}{2}} E_{el} \sim 10^{-2} E_{el}. \quad (53.3)$$

Rotaatori energia võime arvutada valemist

$$E_{rot} = \frac{L^2}{2J} \sim \frac{\hbar^2}{Ma^2} \sim \frac{m}{M} E_{el} \sim 10^{-2} E_0, \quad (53.4)$$

kuna impulssmomenti ruudu (L^2) omaväärtused on suurusjärgus \hbar^2 , inertsmoment J aga suurusjärgus Ma^2 .

Vastavalt hinnangutele (53.1, 3, 4) võime molekulide energiatasemete arvutamisel kasutada eespool mainitud lähendusi.

Vaatleme N -aatomilist molekuli, mille statsionaarseid olekuid kirjeldab Schrödingeri võrrand:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \Delta_i - \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_j} \Delta_j + V \right] \Psi = E \Psi, \quad (53.5)$$

kus n on elektronide arv, V - kõikide osakeste elektrostaatilise interaktsiooni energia.

Kui esimeses lähenduses jätta arvestamata tuumade liikumine, esinevad tuumade koordinaadid \vec{R}_j lihtsalt võrrandi parameetritena. Kooskõlas õelduga otsime funktsiooni $\Psi(\vec{r}, \vec{R})$ (kus \vec{r} on elektronide, \vec{R} - tuumade kohavektorite kompleks) kujus:

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \phi_R(\vec{r}) \chi(\vec{R}). \quad (53.6)$$

Kui oletada, et $\phi_R(\vec{r})$ rahuldab võrrandit

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i + \mathcal{N} \right] \phi_R(\vec{r}) = \mathcal{U}(\vec{R}) \phi_R(\vec{r}) \quad (53.7)$$

iga tuumade konfiguratsiooni jaoks, saame (arvestades (53.5-7))

$$\left[-\sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_j} \Delta_j + \mathcal{U}(\vec{R}) \right] \Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E \Psi(\vec{r}, \vec{R}). \quad (53.8)$$

Funktsioon $\chi(\vec{R})$ rahuldab siis võrrandit

$$\begin{aligned} & \left[-\sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_j} \Delta_j + \mathcal{U}(\vec{R}) - E \right] \chi(\vec{R}) = \\ & = \frac{1}{\phi_R(\vec{r})} \sum_{j=1}^N \left[\frac{\hbar^2}{2M_j} \chi(\vec{R}) \Delta_j \phi_R(\vec{r}) + 2 \nabla_j \chi(\vec{R}) \nabla_j \phi_R(\vec{r}) \right]. \end{aligned}$$

Võttes ϕ avaldises \vec{R} konstandiks, saame funktsioonile χ esimeses lähenduses võrrandi

$$\left[-\sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_j} \Delta_j + \mathcal{U}(\vec{R}) - E \right] \chi(\vec{R}) = 0. \quad (53.9)$$

Elektronkatte energia $\mathcal{U}(\vec{R})$ on funktsioon tuumade momentaanses konfiguratsioonist. Tuumade liikumist kirjeldavas võrrandis (53.9) on funktsioonil $\mathcal{U}(\vec{R})$ potentsiaalse energia tähendus. Küllalt hea kooskõla katsega annab kaheaatomiliste molekulide elektronkatte põhiolekus nn. Morse'i potentsiaal

$$\mathcal{U}(\vec{R}) = \mathcal{U}_0 \left[e^{-2(R-R_0)/a} - 2 e^{-(R-R_0)/a} \right],$$

kus R_0 on potentsiaalse energia miinimumile ($\mathcal{U}_{\min} = -\mathcal{U}_0$) vastav kaugus tuumade vahel, a annab piirkonna suurusjärgu, kus mõjuvad tõmbetungid.

54. Kaheaatomilise molekuli elektroonsed energiatasemed.

Kaheaatomiliste molekulide energiatasemete e. termide süstemaatika aluseks on molekuli sümmeetria.

Leiame suurused, mis kommuteeruvad molekuli elektronkatte hamiltoniaaniga. Kooskõlas valemiga (53.7) on hamiltoniaanil kuju

$$\hat{H}_{el} = - \sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_1, \vec{R}_2). \quad (54.1)$$

Suuname Z -telje mööda aatomite tuumi ühendavat sirglõiku. Siis on Z -telg sümmeetriateljeks. \hat{H}_{el} jääb invariantseks pöorete suhtes ümber Z -telje, millele vastab kogumomendi projektsiooni jäävus. Rittorelativistlikus lähenduses on jääv ka summaarse orbitaalse momendi projektsioon. Samuti jääb \hat{H}_{el} invariantseks peegeldusteisendustel, kui peegeldav tasand läbib Z -telge. Orbitaalse impulssmomendi projektsioon Z -teljele muudab nimetatud peegelduse korral märki.

Molekuli elektroonsed energiatasemeid võime öeldu põhjal iseloomustada summaarse orbitaalse impulssmomendi projektsiooni absoluutväärtusega tuumi ühendavale sirgele ($|M_z|$). Vastavaid kvantarve ($|M_z|$ väärtusi) tähistatakse kreeka tähega Λ , $\Lambda = 0, 1, 2, \dots$ ning terme nimetatakse Σ ($\Lambda = 0$), Π ($\Lambda = 1$), Δ ($\Lambda = 2$) jne. termideks. Näiteks kõik termid peale Σ -termi on kahekordselt kõdunud (\hat{M}_z ei kommuteeru peegeldusoperaatoriga). Σ -termi olekufunktsioon võib olla kas paaris (Σ^+ -term) või paaritu

(Σ^- -term) vastavalt peegeldusoperaatori kahele võimalikule omaväärtusele.

Igat elektroonset olekut iseloomustab veel elektronkatte summaarne spin S . Arvu $2S + 1$ nimetatakse termi multiplertsuseks ja märgitakse termi sümboli juurde. Näiteks kui $\Lambda = 1$, $S = 1$, saame termi ${}^3\Pi$.

Kui kaheaatomiline molekul moodustub aatomitest, mida iseloomustavad kindlad orbitaalsete momentide kvantarvud L_1 ja L_2 , siis võivad tekkida molekulerimid $\Lambda = 0, 1, 2, \dots, L_1 + L_2$, vastavalt orbitaalse impulssmomenti võimalikkudele projektsiooni absoluutväärtustele:

$$\Lambda = |M_1 + M_2|.$$

Molekuli spin arvutatakse momentide liitmise reegli abil:

$$S = |S_1 - S_2|, |S_1 - S_2| + 1, \dots, S_1 + S_2.$$

Σ^+ - ja Σ^- -termidele vastavad olekufunktsioonid võime esimeses lähenduses esitada kummagi aatomi olekufunktsioonide korrutatiste lineaarkombinatsioonidena. Σ^- -termi saame, kui $M_1 = -M_2 = M$. Siis vastab Σ^+ -le (normeerimata) olekufunktsioon $\psi^+ = \psi_M^{(1)}\psi_{-M}^{(2)} + \psi_{-M}^{(1)}\psi_M^{(2)}$, Σ^- -le aga $\psi^- = \psi_M^{(1)}\psi_{-M}^{(2)} - \psi_{-M}^{(1)}\psi_M^{(2)}$, kus numbrid 1 ja 2 märgivad aatomeid.

Kui $M_1 = M_2 = 0$, siis olekufunktsioon $\psi = \psi_0^{(1)}\psi_0^{(2)}$ võib olla kas sümmeetriline või antisümmeetriline. Ta on antisümmeetriline, kui $(-1)^{L_1+L_2} J_1 \cdot J_2 = -1$, ja sümmeetriline, kui $(-1)^{L_1+L_2} J_1 \cdot J_2 = 1$. Siin on J_1 ja J_2 kummagi aatomi paarsused.

Kui molekul koosneb ühte liiki aatomitest (näiteks \mathcal{R}_2 , O_2 jne.), tuleb arvestada täiendavat sümmeetriat tuumi ühendava lõigu keskpunkti suhtes. Kui valime selle punkti koordinaatide alguspunktiks, on hamiltoniaan invariantne teisenduse suhtes, mis muudab kõikide elektronide koordinaatide märgid (tuumade koordinaadid jäävad muutmata). Järelikult on niisuguse molekuli kõik energiatermid (iseloomustatud Λ väärtustega) kindla paarsusega. Paaristermid tähistatakse tähega g , näiteks Σ_g , Π_g , jne., paaritud tähega u : Σ_u , Π_u , Δ_u , jne. (saksakeelsetest sõnadest "gerade" ja "ungerade").

Empiirilise reegli alusel on enamikul molekulidest põhiterm $^1\Sigma^+$, ühte liiki aatomitest koosnevatel molekulidel aga $^1\Sigma_g^+$ (excl O_2 , kus normaalolekule vastab $^3\Sigma_g^-$).

55. H_2 -molekul. Valents.

H_2 -molekul on lihtsaim 2-aatomiline molekul. Kui tähistame elektrone numbritega 1, 2 ja tuumi tähtedega A, B, siis Hamiltoni operaator on (vt. 54.1))

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_1 + \Delta_2) + e^2 \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1A}} - \frac{1}{r_{1B}} - \frac{1}{r_{2A}} - \frac{1}{r_{2B}} \right), \quad (55.1)$$

kus tähistused selguvad jooniselt.

Vastavalt Heitleri ja Londoni lähendusmeetodi põhiideele otsime Schrödingeri võrrandi

$$[\hat{H} - U(R)] \phi_R(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0 \quad (55.2)$$

lahendit kujul

$$\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + c \psi_B(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (55.3)$$

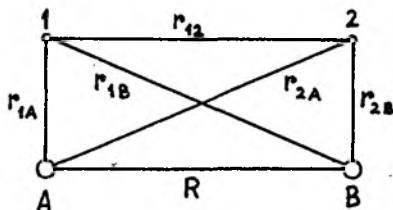
kus

$$\psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_A(\vec{r}_1) \psi_B(\vec{r}_2),$$

$$\psi_B(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_A(\vec{r}_2) \psi_B(\vec{r}_1). \quad (55.4)$$

ψ_A ja ψ_B on vastavalt tuuma A ja B juurde kuuluva elektroni põhioleku normeeritud funktsioonid vesinikuaatomis.

Valemis (55.3) on C mõnesugune parameeter, mis leitakse energia miinimumist. Koostõlas valemitega (55.2,3)



Joon. H.

saame

$$U(R) \leq \frac{(1+c^2)H_{11} + 2cH_{12}}{1+c^2+2c\gamma}, \quad (55.5)$$

kus

$$\gamma = \int \psi_1 \psi_2 (d\vec{r}_1) (d\vec{r}_2),$$

$$H_{11} = H_{22} = \int \psi_1 \hat{H} \psi_1 (d\vec{r}_1) (d\vec{r}_2),$$

$$H_{12} = H_{21} = \int \psi_1 \hat{H} \psi_2 (d\vec{r}_1) (d\vec{r}_2). \quad (55.6)$$

Seostes (55.6) on arvestatud, et H -aatori põhioleku funktsioon on reaalne, operaator \hat{H} aga hermitiline ja kummagi elektroni suhtes sümmeetriline. Fikseeritud R korral on $U(R)$ ekstreemumitingimuseks

$$\frac{\partial u}{\partial c} = \frac{2(1-c^2)(H_{12} - \gamma H_{11})}{(1+c^2 + 2c\gamma)^2} = 0,$$

millest $c = \pm 1$. Kui avaldada integraalid (55.6) tabuleeritud funktsioonidena, osutub, et miinimumile vastab $c = +1$.

Seega on vesiniku molekuli põhiolek vastavas lähenduses

$$\phi = \psi_1 + \psi_2,$$

$$u(R) \leq \frac{H_{11} + H_{12}}{1 + \gamma}. \quad (55.7)$$

Kooskõlas valemiga (55.7) iseloomustab seotud olekut elektronide koordinaatide sümmeetriline funktsioon. Seega peab spinfunktsioon olema antisümmeetriline, mis vastab koguspinile $S = 0$. Nii saamegi põhitermiks $1 \Sigma^+$.

Osutub, et kõikide paarühma elementide keemilistes ühendites on spinidel tendents kompenseeruda (erandiks on O_2 , mille põhiterm on 3Σ ja NO põhitermiga 2Π ja mõned teised). Aatomite omadust moodustada stabiilseid ühendeid iseloomustab valentsus, mis arvukselt võrdub summaarse spini S kahekordse väärtusega.

Perioodilise süsteemi esimese paarühma elementide (leelismetallide) aatomite summaarne spin $S = \frac{1}{2}$ (üks optiline elektron), mistõttu nad on ühevalentsed. Ergutatud olekus võib olla ka suurem summaarne spin, kuid see saadakse ainult mõne täidetud kihi elektroni ergutamise tulemusena (väga suur ergutusenergia), mistõttu suurema S väärtusega aatomid antud juhul ei saa moodustada stabiilseid ühendeid.

Teise rühma elementide aatomites on normaalolekus $S=0$ (optiliste elektronide konfiguratsioon s^2). Kuna aga orgutatud olek, mis vastab konfiguratsioonile sp ja koguspinile $S=1$, on põhiolekule energeetiliselt lähedal, võivad tekkida keemilised ühendid just selles olekus, mis vastab valentsile 2.

Kolmanda rühma elementide optiliste elektronide konfiguratsioon on s^2p ja summaarne spin $S=\frac{1}{2}$, kuid sellele lähedane on ergutatud olek sp^2 , $S=\frac{3}{2}$, mistõttu selle rühma elemendid võivad olla kolme- või ühevalentsed (valents 1 esineb ainult raskematel elementidel).

IV rühmas on põhioleku konfiguratsioon s^2p^2 ja spin $S=1$, sellele lähedane aga olek sp^3 spiniga $S=2$, mistõttu esineb valents 2 ja 4 (madalama valentsi esinemise tendents kasvab aatomi järjenumbriga kasvades).

V rühmas on põhiolek s^2p^3 , $S=\frac{3}{2}$. Kui üks p -elektron läheb ühe võrra suuremale peakvantarvule vastavasse s -olekusse (tähistame s'), saame konfiguratsiooni s^2p^2s' ja spini $S=\frac{5}{2}$. Seega on V rühma elemendid 3- ja 5-valentsed.

VI rühma põhiolek on s^2p^4 , $S=1$. Sellele lähedased on ergutatud olekud s^2p^3s' , $S=2$ ja $sp^3s'p'$, $S=3$. Sellele vastavalt võivad VI rühma elemendid olla 2-, 4- ja 6-valentsed.

VII rühmas on põhiolekuks s^2p^5 , $S=\frac{1}{2}$. Stabiilseid ühendeid aga võivad moodustada veel ergutatud olekutele vastavad konfiguratsioonid s^2p^4s' , $S=\frac{3}{2}$; $s^2p^3s'p'$,

$S = \frac{5}{2}$ ja $s p^3 s' p'$, $S = \frac{7}{2}$, valentsid vastavalt 1, 3, 5, 7. Nagu VI rühmas, nii esineb ka siin vähima järjenumbriga element (O ja F vastavalt) ainult madalaima valentsiga.

Kuna inertseid gaase iseloomustavad täidetud kihid, on siin $S = 0$.

Täidetud kihid aatomite ühinemisel molekulideks peaaegu ei muutu. Elektronide tiheduse jaotus aga täitmata kihtides võib oluliselt muutuda. Näiteks heteropolaarse seose korral lähevad ühe aatomi valentselektronid teise aatomi elektronkattesse, mistõttu molekul koosneb praktiliselt ioonidest. Esimese rühma elemendid moodustavad heteropolaarseis ühendis positiivseid ioone. Homeopolaarsetes ühendites on molekuliks ühinenud aatomid keskmiselt neutraalsed ja vastavatel molekulidel puuduvad dipoolmomentid. Erinevus hetero- ja homeopolaarsete molekulide vahel on puhtkvantitatiivne, kusjuures esinevad kõik võimalikud vaheastmed.

Elementidel, mida iseloomustavad sügaval asetsevad täitmata d - ja f -kihid, võivad tänu nendele elektronidele esineda ühendites kompenseerimata spinid. Ühtlasi võivad nad mõne d - või f -elektroni ergutumise tulemusena omada valentse, mis põhivalentsist erinevad näiteks ühe võrra (pea-rühmades esinevad ainult paarisarvu võrra erinevad valentsid).

Peale eespool käsitletud, valentsiga iseloomustatud keemiliste tungide mõjuvad üksteisest küllalt kaugel asetsevate aatomite vahel samuti klassikalise analoogiga nn. van der Waalsi tungid, mis aatomite põhiolekus on alati tõmbetungid.

Kui aatom on neutraalne, võib tema mõju küllalt kaugel

iseloomustada dipoolmomendiga, mis on null ainult keskmiselt. Vastava paranduse kahest aatomist koosneva süsteemi energiatasemetele annab häiritusarvutus.

Esimeses lähenduses

$$\Delta E_1 = H'_{nn} = \int \psi^* \frac{(\vec{d}_1 \vec{d}_2) - 3(\vec{d}_1 \vec{n}_1)(\vec{d}_2 \vec{n}_2)}{R^3} \psi dV =$$

$$= \frac{(\vec{d}_1 \vec{d}_2) - 3(\vec{d}_1 \vec{n}_1)(\vec{d}_2 \vec{n}_2)}{R^3} = 0, \quad (55.9)$$

kuna $\vec{d}_1 = \vec{d}_2 = 0$. Siin on \vec{d}_1 ja \vec{d}_2 kumagi aatomi dipoolmomendid, $\vec{n}_1 = -\vec{n}_2$ - aatomeid ühendava sirge sihiline ühikvektor, R - aatomite kaugus, $dV = dV_1 dV_2$, $\psi = \psi(1)\psi(2)$.

Teises lähenduses

$$\Delta E_2 = \frac{1}{R^6} \sum_m \frac{[(\vec{d}_1 \vec{d}_2) - 3(\vec{d}_1 \vec{n}_1)(\vec{d}_2 \vec{n}_2)]_{mn}^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} =$$

$$= \frac{A}{R^6}. \quad (55.10)$$

Kuna n tähistab põhiolekut, siis $E_n^{(0)} > E_m^{(0)}$, mistõttu konstant A on valemis (55.10) (mis on seotud aatomite polariseeritavusega) alati negatiivne ja järelikult on vastavad van der Waalsi tungid, mis kõikide aatomite korral on $\sim \frac{1}{R^6}$, tõmbetungid. Erinevalt keemilistest tungidest on van der Waalsi tungid aditiivsed.

56. Võnke- ja rotatoorsed energiatasemed.

Analüüsime tuumade liikumist adiabaatilises lähenduses kirjeldavat võrrandit (53.9), mille kaheaatomilise molekuli korral võime kirjutada kujul:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + U(R) \right] \chi(\vec{R}) = E \chi(\vec{R}), \quad (56.1)$$

kus μ on tuumade taandatud mass, \vec{R} - nende suhteline koordinaat:

$$\vec{R} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2.$$

Sfäärilistes koordinaatides võime võrrandi (56.1) lahendit otsida kujus

$$\chi(R, \theta, \varphi) = \frac{\xi_j(R)}{R} Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (56.2)$$

kus l ja m on impulsmomendi kvantarvud (arvude l ja m analoogid ühe osakese korral tsentraalsümmeetrilises väljas). Funktsioonile $\xi_j(R)$ saame võrrandi

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \xi_{j_l}}{dR^2} + W_{j_l}(R) \xi_{j_l} = E \xi_{j_l}, \quad (56.3)$$

kus

$$W_{j_l} = U(R) + \frac{\hbar^2 j_l(j_l+1)}{2\mu R^2}, \quad j_l = 0, 1, 2, \dots \quad (56.4)$$

on efektiivne potentsiaalne energia.

Arendame funktsiooni $W_{j_l}(R)$ Taylori ritta punkti $R = R_1$ ümbruses, kus R_1 vastab $W_{j_l}(R)$ miinimumile $\left(\frac{\partial W}{\partial R} \Big|_{R=R_1} = 0 \right)$:

$$W_{j_n}(R) = W_0 + K_0(R-R_1)^2 + l(R-R_1)^3 + C(R-R_1)^4 + \dots \quad (56.5)$$

kus

$$\begin{aligned} W_0 &= U(R) \Big|_{R=R_1} + \frac{\hbar^2}{2\mu R_1^2} j_n(j_n+1); \\ K_0 &= \frac{1}{2}\mu\omega_c^2 + \frac{3\hbar^2}{\mu R_1^3} j_n(j_n+1); \quad (56.6) \\ \omega_0 &= \sqrt{\frac{1}{\mu} \frac{d^2U}{dR^2} \Big|_{R=R_1}}; \quad l = \frac{1}{6} \frac{d^3W}{dR^3} \Big|_{R=R_1}; \quad j_n. \end{aligned}$$

Arendus (56.5) on lubatud mitte väga suurte rotatoorse, kvantarvude j_n väärtuste korral. Kui paigutame (56.5) omaväärtusvõrrandisse (56.3), saame anharmoonilise ostsillaatori võrrandi, mille omaväärtuste leidmiseks võib kasutada häiritusmeetodit anharmoonilisust põhjustavate liikmete $l(R-R_1)^3$, $C(R-R_1)^4$ j.j. arvestamiseks.

Kasutades võnkekvantrvu n , $n = 0, 1, 2, \dots$ saame võnkerotatoorse termide energiale väärtused:

$$\begin{aligned} E &= W_0 + \hbar \left(\frac{2\mu\omega_c}{\mu} \right)^{\frac{1}{2}} \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^2 l^2}{4\mu\omega_c^3} \left[\frac{15}{4} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{7}{16} \right] + \\ &+ \frac{3\hbar^2 c}{2 \cdot 2\mu\omega_c} \left[\left(n + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{1}{4} \right] + \dots \quad (56.7) \end{aligned}$$

Molekulspektrite uurimiseks esimeses lähenduses piisab, kui E avaldises piirdume liikmetega

$$E = U_0 + \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) + B j_n(j_n+1). \quad (56.8)$$

Olgu E_1 ja E_2 vastavalt lähte- ja lõppoleku energiad.

Vaatleme juhtu, kui elektroonne olek ei muutu. Siis

$$\begin{aligned} \hbar \omega_{12} = E_1 - E_2 = \hbar \omega_0 (n_1 - n_2) + \\ + B [j_1 (j_1 + 1) - j_2 (j_2 + 1)] . \end{aligned} \quad (56.9)$$

Valikureeglid rotatoorse kvantarvu j_2 jaoks on Σ -termile vastavas elektronkatte põhiolekus samaaegselt orbitaalsel kvantarvul l , s. o.

$$j_2 = j_1 \pm 1 . \quad (56.10)$$

(Indeksi n oleme lihtsustuseks ära jätnud.)

Kui aga elektronkate on olekus, kus $\Lambda \neq 0$ (Π -, Δ -jne. termid), võivad esineda üleminekud

$$j_2 = j_1 \pm 1 \quad \text{või} \quad j_2 = j_1 . \quad (56.10')$$

Fikseeritud $\Delta n = n_1 - n_2$ ja valikureeglite (56.10) korral saame 2 haru:

1) kui $j_2 = j_1 + 1$, siis

$$\hbar \omega' = \hbar \omega_0 (n_1 - n_2) - 2B (j_1 + 1) ; j_1 = 0, 1, 2, \dots ; \quad (56.11)$$

2) kui $j_2 = j_1 - 1$, siis

$$\hbar \omega'' = \hbar \omega_0 (n_1 + n_2) + 2B j_1 ; j_1 = 1, 2, 3, \dots . \quad (56.11')$$

Valemiga (56.11) määratud sagedusega spektrijooned moodustavad nn. P-haru, valemiga (56.11') - vastavalt R-haru. Kõik need jooned kuuluvad infrapunasesse spektri ossa.

Kui esinevad ka elektroonsed üleminekud, muutuvad kooskõlas valemitega (56.6) E avaldises ka konstandid U_0 , ω_0 ja B . Üleminekul n -indalt elektroonselt nivoolt

m -lekkale koos võnne- ja resonantsote üleminekatega, saame vastava joone sageduseks ω , kus

$$\begin{aligned} \hbar \omega = & \Delta U_0 + \hbar \omega_n \left(n' + \frac{1}{2} \right) - \hbar \omega_m \left(n'' + \frac{1}{2} \right) + \\ & + B_n (j' + 1) j' - B_m j'' (j'' + 1). \end{aligned} \quad (56.12)$$

Valemiga (56.12) määratud sagedusega jooned on (tänn elektroonse ülemineku energia suurusel) nähtavas või ultravioletses spektris.

Igale fikseeritud n' ja n'' paarile vastavad jooned moodustavad riba. Antud juhul koosneb iga riba kolmest harust:

1) R -haru, kui $j'' = j' - 1$, siis

$$\hbar \omega_R = A + \bar{B} j'^2 + C j', \quad (56.13)$$

kus $A = \Delta U_0 + \hbar \omega_n \left(n' + \frac{1}{2} \right) - \hbar \omega_m \left(n'' + \frac{1}{2} \right)$,

$$\bar{B} = B_n - B_m, \quad C = B_n + B_m;$$

2) Q -haru, kui $j'' = j'$, siis

$$\hbar \omega_Q = A + \bar{B} j' (j' + 1); \quad (56.14)$$

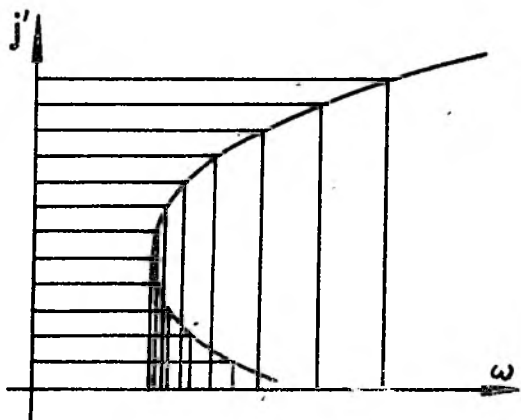
3) P -haru, kui $j'' = j' + 1$;

$$\hbar \omega_P = A - 2B_m + \bar{B} j'^2 + (B_n - 3B_m) j'. \quad (56.15)$$

Valemid (56.13-15) määravad ribade struktuuri. Kui näiteks $\bar{B} > 0$, määrab ω sõltuvuse kvantarvust j_n joonisel I esitatud parabool. Parabooli lõikepunktidest horisontaaljoontega langetatud vertikaalid annavad vastavad sagedused. Sageduste kuhjumiskoht määrab riba pea. Ant 1 juhul on

riba pea madalamate sageduste poolel.

Kui $\bar{E} < 0$, tekib riba, mille pea vastab suurematele sagedustele.



Jocan I.

Kui molekul koosneb kahest ühte liiki aatomist (näit. \mathcal{H}_2), tuleb võrrandi (56.1) lahendamisel arvestada tuumade eristamatust. Vaatleme näiteks \mathcal{H}_2 molekuli. Et tuumade spin on $\frac{1}{2}$, siis peab kogu lainefunktsioon olema antisümmeetriline. Kui spinfunktsioon on sümmeetriline (tuumade summaarne spin on 1), peab koordinaatide funktsioon olema antisümmeetriline. See kehtib, kui valemis (56.2) on kvantarv j_2 paaritu (vastav molekul kannab ortovesiniku molekuli nimetust). Kui spinfunktsioon on antisümmeetriline (tuumade summaarne spin võrdub nulliga), saame paravesiniku molekuli, mille terme iseloomustab paarisarvuline rotatoorne kvantarv j_2 .

Kahe tuuma korral spiniga I on kogu spinolekute arv $(2I + 1)^2$ (niipalju sõltumatuid funktsioone saame moodustada spinfunktsioonide korrutistest $\chi_{\sigma_1(1)} \chi_{\sigma_2(2)}$, kus σ_1 ja σ_2 omandavad mõlemad $2I + 1$ väärtust). Kõikidest korrutistest, kus $\sigma_1 \neq \sigma_2$, saame moodustada võrdse arvu sümmeetrilisi ja antisümmeetrilisi funktsioone $\chi_{\sigma_1(1)} \chi_{\sigma_2(2)} \pm \chi_{\sigma_2(1)} \chi_{\sigma_1(2)}$. Neid on kokku $\frac{1}{2}(2I+1) \cdot 2I$. Korrutised, kus $\sigma_1 = \sigma_2$ (neid on kokku $2I + 1$), vastavad sümmeetrilistele funktsioonidele. Järelikult on kõikide sümmeetriliste funktsioonide arv $(I+1)(2I+1)$, antisümmeetriliste arv aga $I(2I+1)$. Seega on statistilise tasakaalu korral ortovesiniku suhe paravesinikusse (sümmeetriliste seisundite arvu suhe antisümmeetriliste sisundite arvusse)

$$\frac{I+1}{I} = \frac{3}{1}.$$

Kalletõttu on ortovesiniku ribades joonte intensiivsus 3 korral suurem paravesiniku vastavate joonte intensiivsusest.

Üldiselt võimaldab ühte liiki aatomitest koosnevate molekulide ribaspektrite naaberjoonte intensiivsuste mõõtmine määrata tuumade spine ja kontrollida statistikat (kas tuumad moodustavad Bose või Fermi gaasi).

K i r j a n d u s .

Блохинцев Д.И., Основы квантовой механики, "Высшая школа",
Москва, 1963.

Давыдов А.С., Квантовая механика, Физматгиз, Москва, 1963.

Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Квантовая механика I, Физматгиз,
Москва, 1963.

Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А., Курс теоретической фи-
зики II, ФМ, Москва, 1962.

Бом Д., Квантовая теория, Физматгиз, Москва, 1961.

Дирак П.А.М., Принципы квантовой механики, Физматгиз, Москва,
1960.

Шифф Л., Квантовая механика, И.Л., Москва, 1957.

S i s u k o r d .

Eessõna	3
Sissejuhatus	4
I. KVANTMEHHAANIKA PÕHIMÕISTED	
1. Uurimisobjekt ja iseärasused	24
2. Kvantmehhaanilise oleku mõiste ja kvantmehhaanika põhiülesanded	25
3. Olekufunktsioon. Superpositsiooni printsiip.	28
4. Füüsikalistele suurustele vastavad operaatorid	32
5. Teoreemid hermiitilise operaatori oma- funktsioonide kohta	36
6. Omafunktsioonide süsteemi täielikkus	39
7. Füüsikalise suuruse keskväärtuste arvutamine	42
8. Operaatorite korrutamine	44
9. Klassikaline mehhaanika kvantmehhaanika piirjuhuna	51
10. Poissoni sulud ja kommutaatorid	53
11. Määramatuse printsiip ja määramatuse relat- sioonid	56
12. Matemaatilise formalismi ja füüsikaliste hüpoteeside vastavus	61.

II. Lainevõrrand. Liikumisintegraalid.

13. Lainevõrrand	63
14. Operaatori ajaline tuletis	66
15. Impulss	70
16. Impulssoperaatori omaväärtused ja omafunktsioonid	73
17. Impulssmoment	74
18. Impulssmomendi operaatori omaväärtused ja omafunktsioonid	82
19. Impulssmomentide liitmine	85
20. Paarsus	90

III. Statsionaarsed olekud.

21. Statsionaarse oleku mõiste	92
22. Mitterelativistlik Schrödingeri võrrand	94
23. Vooluvektor. Pidevuse võrrand	98
24. Vaba osake.	100
25. Ühedimensionaalne liikumine	103
26. Osake tsentraalsümmeetrilises väljas.	108
27. Kahe keha probleemi taandamine ühe keha probleemiks	112
28. Vesinikusarnase aatomi diskreetsete energia- nivoode määramine	114
29. Hamiltoni operaatori omafunktsioonid vesi- nikusarnase aatomi korral	117
30. Elektroni orbitaalne magnetmoment.	122

IV. Esituste teooria alused.

31. Olekufunktsioonide esitused. Olekuvektor.	125
32. Operaatorite esitused	133

33. Omaväärtuste ja keskvärtuste arvutamine maatriksesituses	136
34. p- ja q-esitus maatrikskujus	140
35. Schrödingeri võrrand maatrikskujus	142
36. Tihedusmaatriks	145
37. Impulssmoment maatriksesituses. Elektroni spin	150
38. Spini arvestavad olekufunktsioonid	154
39. Pauli võrrandid	158
V. Häiritusarvutuse põhijooned.	
40. Schrödingeri häiritusarvutus kõdumata juhul.	162
41. Schrödingeri häiritusarvutus kõdunud juhul .	166
42. Häiritus üleminekute põhjustajana.	171
VI. Põrketeooria alused.	
43. Diferentsiaalne efektiivne ristlõige	175
44. Elastse hajumise efektiivse ristlõike arvutamine Borni lähendusmeetodiga	180
45. Partsiaallainete meetod	185
46. Hajutamismaatriks	190
47. Mittelelastsed protsessid.	194
VII. Ühte liiki osakestest koosnevad süsteemid.	
48. Eristamatuse printsiip	201
49. Fermionid ja bosonid. Pauli printsiip.	203
50. Heeliumi aatom. Vahetusmõju	207
51. Elementide perioodilisuse süsteem.	212
52. Aatomi efektiivse välja arvutamise meetodeid.	215
53. Molekulide energiatasemete liigitus.	220

54. Kaheaatomilise molekuli elektroonsed energiatasemed	224
55. H ₂ -molekul. Valents.	226
56. Vönke- ja rotatoorsed energiatasemed	232
Kirjandus	239