

Report Series in Physics

No A14

JOHDATUS KVANTTIMEKANIikkaAN

K. Kurki-Suonio

1972

Apumoniste atomifysiikan cum laude -kurssia varten*

29. toukokuuta 1972

ISBN 951-45-0049-0

1 Johdanto atomifysiikan ajatusmaailmaan

Kvanttimekaniikka on nykyaikaisen fysiikan keskeisin teoria.

Vain sen avulla voidaan "ymmärtää" ytimien, atomien ja molekyylien rakenne ja ominaisuudet. Siten nykyinen kuva koko aineellisesta maailmasta perustuu ratkaisevasti kvanttimekaniikkaan.

Kvanttimekaniikkaa pidetään kuitenkin yleisesti varsin vaikeatajuisena ja abstraktisena, eikä täysin aiheetta. Sen vuoksi siihen usein liitetään epätodellisuuden ja keinotekoisuuden leima, mikä kuitenkin on ehdottomasti väärin. Kvanttimekaniikka on klassista mekaniikkaa realistisempi, koska se on sopuoinnussa myös atomimaailman ilmiöiden kanssa - selittää ne, kuten usein vähän harhaanjohtavasti sanotaan -, jotka ovat auttamattomasti klassisen fysiikan pätevyysalueen ulkopuolella. Sitä paitsi klassinen mekaniikka sisältyy kvanttimekaniikkaan rajatapauksena.

Klassinen fysiikka, johon tässä tapauksessa luemme lähinnä Newtonin mekaniikan ja Maxwellin elektrodynamiikan, on luonteeltaan hyvin konkreettista ja sellaisena helposti ymmärrettävää mitä nyt joitakin laskennollisia vaikeuksia ilmaantuu. Klassisen fysiikan jälkeen kvanttimekaniikka merkitsee siirtymistä uuteen ajattelutapaan. Jotta tähän siirtymiseen liittyviin vaikeuksiin voitaisiin suhtautua oikealle tavalla, on hyvä tarkastella niitä aivan yleisten periaatteiden valossa.

Oikeastaan on ilmeistä, että siirtyminen makrofysiikasta mikrofysiikkaan välttämättä merkitsee myös siirtymistä konkreettisesta käsitteistöstä abstraktiseen. Luonnontieteethän merkitsevät laajassa mittakaavassa samanlaista prosessia kuin yksityisen ihmisen kohdalla aistimusten hahmottaminen. Näkemään, kuulemaan jne. oppiminen ja aistimusten ymmärtäminen perustuu ärsykkeiden tiettyyn säännönmukaisuuteen. Samoin luonnontiede etsii säännönmukaisuuksia luonnonilmiöistä ja -objekteista. Niin kauan kuin luonnontiede tutkii sellaisia ilmiöitä, jotka ovat myöskin aistein havaittavia tai ainakin läheisesti kytkeytyneet havaintomaailmaamme, ovat sen havaitsemat säännönmukaisuudet ja korrelaatiot samoja kuin ne, joille inhimillinen ajatusmaailma ja luontainen käsityskyky perustuvat, tai ainakin ne voidaan ilmaista tässä mielessä konkreettisesti tajuttavilla käsitteillä. On hyödyllistä ajatella, kuinka irtipääsemättömästi ihmisen luontainen käsitemaailma ja käsityskyky ovat sidotut aistein havaittavaan makromaailmaan. On hyvä myös huomata, että klassinen fysiikka nojautuu tämän makromaailman käsitteistöön. Tämä piirre on niin vallitseva, että voidaan lähes määrätelmänomaisesti sanoa: klassinen fysiikka = konkreettinen fysiikka.

Atomaaristen ilmiöiden maailma on kuitenkin hyvin kaukana konkreettisesta havaintomaailmasta, johon ymmärryksemme perustuu. Meiltä siten luontaisesti puuttuu sellaisten käsitteiden taju, joita siellä tapahtuvien ilmiöiden käsittely edellyttää. Tai ainakin voidaan sanoa, että olisi kovin merkillistä luonnon ilmiömaailman köyhyyttä, jos makromaailman säännönmukaisuudet riittäisivät käsitteistön perustaksi vielä tälläkin alueella. Jos yritämme selittää atomimaailman ilmiöitä klassisen fysiikan teorioiden avulla, olemme oikeastaan hyvin lähellä kehäpäättelyä. Mehän pyrimme selittämään makromaailman rakennetta ja ilmiöitä palauttamalla ne atomaarisiin alkeisobjekteihin ja -ilmiöihin. Yritykset selittää näitä klassisesti merkitsevät pohjimmiltaan pyrkimystä palauttaa ne makromaailman käsitteisiin. Ainoa näkyvässä oleva vaihtoehto on säännönmukaisuuksien abstrakti matemaattinen kuvailu.

Abstraktin fysikaalisen teorian kehittäminen tuottaa luonnollisesti joitakin vaikeuksia ajattelulle, joka perustuu konkreettiseen käsitemaailmaan. Tällöin joudutaan korostetusti nojautumaan luonnontieteen yleisiin periaatteisiin. Erityisesti kannattaa kiinnittää huomiota kahteen pääajatuksen:

1. Vain mittaustulokset ovat fysikaalisesti merkitseviä.
2. Fysiikka etsii malleja luonnonilmiöille.

Nämä kaksi toteamusta ilmaisevat oikeastaan varsin tyhjentävästi kokeellisen ja teoreettisen fysiikan merkityksen ja niiden välisen suhteen.

Jokin suure on fysikaalinen suure vain, jos se voidaan määritellä tietyn mittausmenettelyn avulla.

Väite on fysikaalinen väite vain, jos se voidaan mittauksin vahvistaa tai kumota. Siten fysikaalinen väite voi koskea vain fysikaalisia suureita. Kaikenlaiset muut käsitteet ja väitteet kuuluvat

metafysiikan piiriin.

Jokainen teoria taas on malli, joka toimii tiettyjen pelisääntöjen mukaan. Tiedyt mallin käsitteet vastaavat tiettyjä fysikaalisia suureita, ja siten teorian pelisäännöt voidaan lausua ikään kuin ne olisivat fysikaalisten suureiden välisiä matemaattisia relaatioita.

Jos malli toimii siten, että se antaa oikeita ennusteita ilmiöitä koskeville mittauksille, se on hyvä teoria. Hyvän teorian pelisääntöjä olemme taipuvaiset kutsumaan luonnonlaeiksi.

Kun tunnemme mallin toimintaperiaatteet, kuvittelemme ymmärtävämme sen kuvaamat ilmiöt. Ts. luonnontieteessä ymmärtäminen = teoria.

Mainitut pääperiaatteet liittyvät tällä tavoin fysiikan kahteen päätavoitteeseen:

1. Esittää oikeita lausumia "luonnon todellisuudesta" eli saavuttaa tietoa.
2. Ymmärtää luonnonilmiöitä.

Edellinen näistä vaatii ehdotonta irtisanoutumista metafysiikasta. Oikeat lausumat ts. fysikaalinen tieto voi koskea ainoastaan fysikaalisia suureita, mutta tällöin jää jäljelle vain kokeellisten numerosarjojen luettelo. Jälkimmäinen pyrkimys taas merkitsee välttämättä teoreettisen mallin samastamista luonnonobjektien ja -ilmiöiden kanssa. Mutta malli sinänsä on metafysiikkaa, joten ymmärtämisspyrkimys on aina turvautumista metafysiikkaan.

Luonnontieteen pääpyrkimykset ovat siten keskenään ristiriidassa tavalla, jota voidaan kutsua vaikkapa fysiikan paradoksiksi.

Kokeelliset tulokset ovat aina etusijalla. Siksi ristiriita teorian ja havainnon välillä on aina teorian vika ja vaatii teorian korjaamista. Koska teoria = ymmärtäminen, koetulokset, joita teoria ei selitä, merkitsevät aina myös ymmärryksen kriisiä.

Tämän tilanteen tiedostaminen on usein johtanut teorian merkityksen vähättelyyn. Huomattakamme kuitenkin, ettemme pysty tekemään mitään e.o. määritelmän mukaisella puhtaalla fysikaalisella tiedolla ymmärtämättä sitä jollakin tavoin. Ts. ilman teoriaa on mahdotonta tulla toimeen. Emme oikeastaan pysty edes puhumaan luonnonilmiöistä ilman jonkinlaista käsitteenmuodostusta, joka jo on teoriaa. Erityisen korostetusti teorian itsenäinen merkitys ja oikeutus tulee ilmi niissä lukemattomissa tilanteissa, joissa se on ennustanut ennen tuntemattomia ilmiöitä. Tämä merkitsee, että fysiikan teoriaankin kätkeytyy jotakin olennaista luonnontodellisuuden olemuksesta. Kuitenkin tämä jokin on siis puhtaan fysikaalisen todellisuuden ulkopuolista. Tässä fysiikka ja metafysiikka erottamattomasti kietoutuvat yhteen. Tässä on pisara mystiikkaa luonnontieteen olemuksessa ja tähän perustuu sen viehätys.

2 Kvanttimekaniikan kokeellinen tausta

Kvanttimekaniikan synty ja kehitys ovat mitä selvin esimerkki siitä, miten kokeelliset havainnot pakottavat muuttamaan käsityksiä luonnonilmiöiden perusmekanismeista. Tämän kehityksen lähtökohtana on joukko atomaarisia ilmiöitä, joista tehdyt havainnot ovat jyrkässä ristiriidassa klassisen fysiikan mukaisten ennusteiden kanssa. Nämä havainnot voidaan lyhyesti keskittää kahteen klassiselle fysiikalle vieraaseen seikkaan:

1. Kvantittuminen merkitsee, että jokin fysikaalinen suure ei voi muuttua jatkuvasti vaan vain tietyin hyppäyksin. Tämä ei tosin ole täysin tuntematon ilmiö klassisessakaan fysiikassa, sillä onhan esimerkiksi värähtelevän kappaleen värähdystaajuus kvantittunut suure; vain tietyt ominaistajuudet ovat mahdollisia. Tässä tarkoitetaan kuitenkin tapauksia, joissa suureet, kuten systeemin energia tai impulssimomentti, klassisesti ajatellen voisivat saada mielivaltaisia arvoja, mutta atomaaristen systeemien tapauksessa jostakin syystä esiintyy vain tiettyjä erillisiä arvoja.

2. Dualismi taas koskee fysikaalisten perusobjektien luonnetta. Erityisesti tämä sana viittaa ilmiöihin, joissa perinteisesti aaltoliikkeenä pidetty sähkömagneettinen säteily käyttäytyy hiukkassuihkun tavoin tai jokin hiukkassuihkuna pidetty ilmiö osoittaa selviä aaltoliikkeen piirteitä.

Nämä kaksi käsitettä voidaan ymmärtää eräiden historiallisesti merkittävien koetulosten lyhyeksi yhteenvedoksi. Tosin näihin jo sisältyy huomattava määrä intuitiivista tulosten tulkintaa. Itse näistä tärkeistä kokeista esitetään tässä yhteydessä vain lyhyt kokoava luettelo. Niiden yksityiskoh-

taiseen tarkasteluun nähden riittää viittaus alan oppikirjoihin.

Ominaislämpökapasiteetit matalissa lämpötiloissa eivät noudata klassisen statistisen mekaniikan edellyttämää käyttäytymistä. (Vrt. esim. Feynman Lectures on Physics I: 40–5, 40–6.) Energian tasanjakautumisen periaatteen mukaan molekyylien keskimääräisen energian lämpötilassa T tulisi olla $\langle E \rangle = \frac{1}{2}kT$ kutakin "vapausastetta" kohden ($k =$ Boltzmannin vakio). Lämpötilan laskiessa ominaislämpökapasiteetit kuitenkin käyttäytyvät ikään kuin jotkin vapausasteet "jäätymään", menettäisivät kykynsä vastaanottaa ja luovuttaa energiaa. Historiallisesti tämä on klassisen fysiikan ensimmäinen tunnettu vakava puute, josta jo Maxwell on huomauttanut. Teorian ja todellisuuden välinen ristiriita vielä korostuu, jos otetaan huomioon, että atomien ja molekyylien rakenteeseen kuuluu myös joukko elektroneja. Niiden pitäisi merkitä hyvin huomattavaa liikkeen vapausasteiden lisäystä, mikä ei tavallisissa lämpötiloissa lainkaan ilmene aineen termisissä ominaisuuksissa.

Vapausasteiden "jäätyminen" voidaan ymmärtää niihin liittyvän energian kvantittumisen perusteella, josta seuraa, että energian vaihto näiden vapausasteiden kanssa ei voi tapahtua mielivaltaisen pienissä yksiköissä.

"Mustan kappaleen säteily" on vakiintunut termi, joka tarkoittaa ontelossa tietyssä lämpötilassa T ontelon seinämien kanssa termodynaamisessa tasapainossa olevaa sähkömagneettista säteilyä. Tämän säteilyn energiatiheyden spektraalijakautuma voidaan laskea klassisesti esim. soveltamalla energian tasanjakautumisen periaatetta ontelossa olevan sähkömagneettisen kentän seisovien värähtelyjen vapausasteisiin. Näin saatu tulos (Rayleighn-Jeansin säteilylaki) on kuitenkin jo itsestään järjetön, koska sen mukaan monokromaattinen energiatiheys kasvaisi rajattomasti spektrin lyhytaaltoisessa päässä. Tämä ns. ultraviolettikatastrofi merkitsisi, että sähkömagneettinen kenttä pystyisi nielemään energiaa miten paljon hyvänsä eikä tasapainoa ontelon seinämien emission ja absorption välille voisi koskaan edes muodostua.

Havaittu energian spektraalijakautuma voidaan esittää ns. Planckin säteilylain muodossa. Tämä alunperin puhtaasti empiirinen kaava voidaan myös johtaa ottamalla lähtökohdaksi Planckin hypoteesi: Taajuudella ν värähtelevän säteilyn emissio ja absorptiotapahtuvat kvanteissa $h\nu$, missä h on empiirinen vakio ns. Planckin vakio.

Valosähköisessä ilmiössä metallipintaan osuva säteily irrottaa metallista elektroneja, fotoelektroneja. Klassisesti tällainen ilmiö voisi tapahtua siten, että säteilyn värähtelevä sähkömagneettinen kenttä aiheuttaa elektronien pakkovärähtelyä, joka kasvaa kunnes elektronin näin absorboima energia ylittää elektronin irrottamiseen vaadittavan rajan ns. irrotustyön. Tämän laatukselle mekanismille olisi tunnusomaista

1. ilmiön ensisijainen riippuvuus valon intensiteetistä,
2. säteilyn taajuuden epäolennainen merkitys
3. Viive = aika, jonka elektroni tarvitsee energian keräämiseen.
4. Fotoelektronien pienet liike-energiat, koska irtautumisen yleensä pitäisi tapahtua heti, kun absorboitu energia ylittää irrotustyön.

Havainnot kuitenkin osoittavat, että ilmiö riippuu ensisijaisesti säteilyn taajuudesta ja säteilyn intensiteetillä on vain toissijainen, fotoelektronien määrää lisäävä vaikutus. Erityisesti fotoelektronien liike-energialla on kullekin metallille määrätty maksimiarvo E , joka riippuu lineaarisesti säteilyn taajuudesta $E = a\nu - b$, ja tällöin $\nu_0 = b/a$ on metallista riippuva taajuuden kynnyisarvo, jonka alapuolella ilmiötä ei esiinny lainkaan riippumatta valon intensiteetistä. Lisäksi viivettä ei voida havaita sellaisessakaan tapauksessa, jossa klassisen mekanismin perusteella sen odottaisi olevan useita vuosia ja, kuten jo todettiin, fotoelektroneilla esiintyy liike-energian arvoja taajuudesta riippuvan maksimiarvoon $a\nu - b$ saakka.

Einsteinin tälle ilmiölle antama selitys perustuu olennaisesti Planckin hypoteesiin. Elektroni voi sen mukaisesti absorboida säteilyenergiaa vain kvanteissa $h\nu$. Jos metallin johdinelektronien pienin irrotustyö eli työfunktio on Φ_0 , saadaan fotoelektronien maksimienergialle lauseke $E = h\nu - \Phi_0$, joka täysin selittää kokeelliset havainnot. Lisäksi tämä ilmiö osoittaa, että kvantin absorboituminen elektroniin on hetkellinen prosessi.

Jarrutus säteily on röntgensäteilyä, jota (suuruusluokkaa $U \approx 10$ kV olevalla jännitteellä) kiih-

dytetyn elektronisuihkun elektronit lähettävät osuessaan kohtioon. Ilmiön klassinen mekanismi on täysin ymmärrettävä. Kiihtyvässä liikkeessä oleva varaus luo säteilykentän. Elektronien törmäyksissä kohtioatomien kanssa kokemat äkkisysäykset, jotka jarruttavat elektronisuihkua, johtaisivat tämän mekanismin mukaan yli koko spektrin ulottuvaan jatkuvaan taajuusjakautumaan. Havaittu spektri kuitenkin rajoittuu jyrkästi tiettyyn kiihdytysjännitteestä riippuvaan maksimitaajuuteen.

Tämäkin ristiriita klassisen teorian kanssa selittyy Planckin hypoteesin avulla: suurin mahdollinen emittoituva kvantti saadaan, kun elektronin koko liike-energia muuttuu säteilyenergiaksi yhdessä prosessissa, ts. $h\nu_{\max} = Ue$. Ilmiötä voidaan pitää valosähköisen ilmiön käänteisprosessina.

Comptonin sironta tarkoittaa materiasta (tässä yhteydessä elektroneista) tapahtuvaa esim. röntgensäteiden sirontaa, jonka aallonpituus on suurempi kuin primäärisäteilyn. Tämän sironnan osuus kasvaa voimakkaasti siirryttäessä energieettisempään (lyhytaaltoisempaan) säteilyyn, ts. ilmiö on sitä puhtaampi mitä vähemmän merkitystä elektronien sidosenergialla on. Siten on perusteltua ajatella, että ilmiön luonteeseen hyvin soveltuvana approksimaationa sitä voidaan pitää sähkömagneettisen säteilyn sirontana vapaista elektroneista.

Klassisen mekanismin mukaan sironta on primäärisäteilyn aiheuttamassa pakkovärähtelyssä olevan elektronin emittoimaa säteilyä. Tämä johtaa kahteen vaikeuteen. Sironnan värähdystaajuus on tässä mekanismeissa välttämättä sama kuin primäärisäteilyn, lukuun ottamatta elektronin liikkeestä säteilyn suuntaan aiheutuvaa Dopplerin ilmiön kaltaista muutosta, joka aiheuttaa säteilyn taajuusjakautuman levenemisen sironnassa. Comptonin sironnassa havaittu pienempi taajuus jää siten selityksettä. Vielä hankalampi on toteamus, että vapaa elektroni ei voi absorboida energiaa sähkömagneettisesta säteilystä, koska säteilyn energian ΔW mukana absorboituu välttämättä myös impulssi $\Delta p = \Delta W/c$, eivätkä elektronin impulssi ja liike-energia puolestaan voi tätä ehtoa täyttää.

Ottamalla Planckin hypoteesi lähtökohdaksi voidaan Comptonin sironta tulkita prosessiksi, jossa sekä absorboituu että emittoituu kvantti. Näiden kvanttien energiaero jää elektroneille rekyylienergiaksi. Ilmiössä korostuu absorptio- ja emissioprosessin lokaalisuus vielä erityisesti sen johdosta, että sekä sironnut kvantti että rekyylielektroni voidaan havaita koinsidenssissa ja todeta energian ja impulssin säilymlakien paikkansapitävyys. Ilmiö assosioi sen vuoksi hyvin voimakkaasti malliin, jossa säteilyä pidetään fotonisuihkuna ja tätä sirontaprosessia fotonin ja elektronin kimmoisana törmäyksenä.

Atomin (yleisemmin atomaarisen systeemin) viivaspektri tarkoittaa sen emissiota ja absorptiota, joka keskittyy tiettyihin varsin terävästi määriteltyihin taajuuksiin ν_1, ν_2, \dots . Samat taajuudet esiintyvät osittain sekä emissiossa että absorptiossa.

Klassisesti on mahdotonta ajatella varatuista hiukkasista koostuvaa systeemiä, jolla olisi ääretön määrä resonanssin perustaajuuksia, jollaisiksi viivaspektrin taajuudet klassisen fysiikan mukaan pitäisi tulkita. "Yliääni" -taajuuksia (= perustaajuuksien monikertoja) ei spektreissä havaita. Dynaaminen Rutherfordin atomimalli, jossa elektronit kiertävät positiivisesti varattua ydintä, on klassisesti mahdoton. Kiertoradalla liikkuvien elektronien tulisi säteillä, jolloin ne nopeasti menettäisivät energiansa ja putoaisivat ytimeen, ts. malli ei olisi stabiili. Sitä paitsi näin syntyneen emission spektri olisi jatkuva.

Avainhavaintona on pidettävä ns. Ritzin kombinaatioperiaatetta, joka koskee kaikkia viivaspektrejä. Sen mukaan kaikki tietyn systeemin spektrin taajuudet voidaan esittää ns. spektritermien T_j avulla muodossa $\nu_{ij} = T_j - T_i$. Jos tätä tarkastellaan Planckin hypoteesin valossa, voidaan tätä pitää osoituksena siitä, että atomin kokonaisenergia on kvantittunut siten, että vain arvot $E_j = hT_j$ ovat mahdollisia. Sekä absorptiossa, että emissiossa ovat tällöin vain kvantit $h\nu_{ij} = E_j - E_i$ mahdollisia.

Energiat E_i määrittelevät siten atomin stationaariset, säteilemättömät tilat tai energiatasot ja voidaan sanoa, että atomi "siirtyy energiatasolta E_j tasolle E_i " kun se emittoi kvantin $h\nu_{ij}$. Absorptiossa siirtyminen tapahtuu vastakkaiseen suuntaan.

Voidaan sanoa, että pelkästään sähkömagneettisen säteilyn emission ja absorption perusteella on ennen aikaista päätellä atomin kokonaisenergian kvantittuminen. Tämä hypoteesi tulee mielekkääksi vain, jos osoittautuu, että kaikissa prosesseissa atomin energian vaihto tapahtuu samoissa spektrin edellyttämässä kvanteissa. Tässä mielessä voidaan Franckin-Hertzin koetta pitää ratkaise-

vana todisteena hypoteesin oikeutuksesta. Siinä nimittäin todetaan, että elektronin ja atomin törmäyksessä atomi voi virittyä perustilastaan E_0 tilaan E_j vain jos liike-energia, jonka elektroni tässä törmäyksessä voi luovuttaa on vähintään $E_j - E_0$. Elektronien pysähtyminen tämän prosessin vaikutuksesta havaitaan niiden kuljettaman virran pienenemisenä jännitteellä $U = (E_j - E_0)/e$ ja atomin virittyminen todetaan samanaikaisesti syntyvän emissioviivan avulla.

Davissonin ja Germerin ensimmäisenä havaitsema elektronidiffraktio osoitti, että myöskin elektroneihin liittyy hiukkasluonteen ohella aaltoluonne. Tätä koetta voidaan pitää ensimmäisenä vahvistuksena deBroglie'n hypoteeseille, jonka mukaan luonnon kaikki perusobjektit ovat sähkömagneettisen säteilyn tavoin luonteeltaan duaalisia siten, että niiden hiukkasominaisuuksia karakterisoivat suureet p , E ja aalto-ominaisuudet k , ω kytkeytyvät yhteen yhtälöillä $p = \hbar k$; $E = \hbar \omega$, missä $\hbar = h/2\pi$. Sittemmin mitä erilaisimmilla hiukkasilla suoritettut diffraktiokokeet ovat osoittautuneet näiden hypoteesien mukaisiksi.

3. Hiukkaset ja aallot

Fysikaalisten perusobjektien havaittu dualismi tuntuu aluksi hämmäntävältä, koska siihen näyttää sisältyvän sisäinen ristiriita. Objekti, joka on hiukkanen, ei voi olla aaltoliikettä ja kääntäen! Tämä on luonnollisesti totta, mutta hiukkanen ja aaltoliike ovat vain kaksi eri mallia. Luonnon objektit eivät ole hiukkasia eivätkä aaltoja, vaan me yritämme esittää niitä hiukkasmallilla tai aaltomallilla. Dualismin havaitseminen osoittaa, että kummallakin mallilla on osittainen oikeutuksensa tiettyjen objektien kuvaamisessa, mutta kumpikaan ei ole oikea, niin kuin malli yleensäkin ei periaatteessa voi olla oikea, vaan ainoastaan hyvä tai huono – tässä kohden *siis* ilmeisesti huono. Ajatussekaannus johtuu siitä, että liiaksi tottuneina klassisen fysiikan konkreettiseen käsitteistöön, johon myös hiukkanen ja aalto kuuluvat, me virheellisesti samastamme mallin ja fysikaaliset objektit.

Ei ole oikein kysyä, niin kuin historian kuluessa on usein tehty, onko jokin säteily (valo, röntgensäteily, radioaktiivisen säteilyn eri lajit jne.) hiukkasia vai aaltoliikettä, vaan voidaanko sitä esittää paremmin hiukkasmallilla vai aaltomallilla. Erityisesti on dualismin kokeellisen toteamisen jälkeen mielekästä ja mielenkiintoista kysyä: Missä määrin on tiettyjä objekteja mahdollista esittää samanaikaisesti kummallakin klassisella mallilla?

De Broglie'n ehdot jo sisältävät tämän ajatuksen samanaikaisesta kuvaamisesta kahdella mallilla. Ne poikkeavat luonteeltaan täydellisesti kaikista fysiikassa aikaisemmin kirjoitetuista yhtälöistä juuri siinä suhteessa, että ne eivät ole tietyn mallin tai teorian sisäisiä yhtälöitä, vaan esittävät kahden täysin eri mallin välistä yhteyttä, joka aiheutuu siitä, että niillä kuvataan samaa ilmiötä.

Seuraavassa otetaan lähtökohdaksi tämä samanaikaisen kuvauksen vaatimus. Pyrimme tarkastelemaan, kuinka nämä mallit voitaisiin yhdistää niin, että muodostuisi ristiriidaton teoria ja missä mielessä tällöin kumpikin malli vastaa objektien fysikaalista luonnetta, ts. miten tällainen teoria on tulkittava. Tällä tavoin voimme huomattavasti selvittää itsellemme dualismin käsitteen fysikaalista sisällystä. Osoittautuu erityisesti, että de Broglie'n ehdot ovat suureksi osaksi välttämätöntä seurausta samanaikaisen kuvauksen vaatimuksesta. Samalla pääsemme jo varsin pitkälle kvanttimekaniikan käsitemaailmaan.

* * *

Hiukkaset ja aaltoliike ovat siinä määrin konkreettiseen havaintomaailmaan perustuvia (= klassisia) käsitteitä, ettei niiden määrittely tunnu välttämättömältä. Niiden merkitys tajutaan intuitiivisesti, mutta niiden yksinkertainen ja täsmällinen määrittely on varsin vaikeata. Oikeastaan koko se tapa, jolla fysiikassa näitä käsitteitä käytetään, kuuluu näihin määritelmiin. Tämän käsittelytavan keskeisimmät pääpiirteet sisältyvät seuraaviin näiden mallien esittelyihin:

Hiukkaset ovat 1. lokaalisia ja 2. erillisiä objekteja, yksilöitä.

Aaltoliike on perusteeltaan 1. laaja-alainen, ja saman kentän aaltoliikkeiden kesken tapahtuu täydellinen 2. superpositio mikä merkitsee niiden täydellistä yhtymistä siten, ettei mistään aaltoliikkeyksilöistä ole mielekästä puhua.

Hiukkasen lokaalisuus tarkoittaa, että kaikki sitä luonnehtivat suureet kuten massa, varaus, impulssi, energia ym. ovat keskittyneet yhteen pisteeseen (tai oikeammin tiettyyn hyvin rajoitettuun avaruuden alueeseen). Hiukkasen paikka kunakin hetkenä on täysin määrätty ja se liikkuu siten pitkien tiettyä rataa $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$. Hiukkasen käyttäytymistä hallitaan klassisen mekaniikan mukaan sen liikeyhtälöllä $\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{F}$. Tämä merkitsee, että jos hiukkasen paikka \mathbf{r} ja nopeus $\dot{\mathbf{r}}$ alkuhetkellä tunnetaan sen rata voidaan laskea tästä yhtälöstä.

Hiukkasten yksilöllisyys taas tarkoittaa, että useamman hiukkasen systeemissä kutakin hiukasta voidaan seurata erikseen muista riippumatta. Toisin sanoen, hiukkaset voidaan numeroida tai nimetä siten, että kunakin hetkenä on mahdollista osoittaa, missä kukin hiukkanen on. Erityisesti ei kahden tai useamman hiukkasen summasta puhumisella ole fyysikaalista mieltä, vaan hiukkaset ovat ja pysyvät erillisinä objekteina.

Aaltoliike merkitsee aina jonkin kentän riippuvuutta ajasta, ja sen täydellinen esittäminen edellyttää, että ilmaistaan millä tavoin kenttäsuure (kenttävoimakkuus tms.) riippuu ajasta kussakin kentän pisteessä. Aaltoliikkeen määrittelee siten jokin kenttäsuureta A esittävä funktio $A = A(\mathbf{r}, t)$. Tällä tavoin aalto yleisesti on yli koko kentän ulottuva laaja-alainen objekti. Aaltoliikkeeseen voi liittyä, kuten sähkömagneettiseen aaltoliikkeeseen tietty energiatiheys ja liikemäärätiheys ym. suureita, jotka samoin ovat jakautuneet yli koko kentän.

Luonteenomaisimmin aaltoliikettä kuvataan kuitenkin sen aaltotiheydellä \mathbf{k} (tai aallonpituudella $\lambda = 2\pi/k$) ja kulmataajuudella ω (tai taajuudella $\nu = 1/T = \omega/2\pi$). Aaltoliikkeen perusmuotona pidetään monokromaattista aaltoa

$$A_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)},$$

jolla on määrätty \mathbf{k} ja ω sekä määrätty amplitudi A_0 . Kyseessä on siis yksinkertainen sinimuotoinen tasoaalto, joka etenee vaihenopeudella ω/k aaltolukuvektorin \mathbf{k} suuntaan. Kentän ominaisuuksista riippuu, millä taajuudella minkin aallonpituuden omaava aaltoliike värähtelee. Yhtälöä $\omega = \omega(\mathbf{k})$, joka tämän ilmaisee, kutsutaan kyseisen kentän tai aaltoliikkeen dispersiorelaatioksi.

Mahdollisimman yleinen aaltoliike saadaan yhdistämällä mielivaltaisella tavalla monokromaattisia aaltoja. Hetkellä $t = 0$ voidaan yleinen aaltoliike esittää siten Fourier-integraalin muodossa

$$A(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int B(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3k, \quad (1)$$

missä amplitudifunktio $B(\mathbf{k})$ osoittaa, millä painolla mikin aaltoluku on edustettuna, ts. millainen on aaltoliikkeen spektri. Fourier-integraaliteoreeman mukaan mielivaltainen fyysikaalinen aaltoliikettä esittävä funktio (ts. sellaiset säännöllisyys-, integroituvuus-, ym. ehdot täyttävä funktio, että se voi esittää jotakin fyysikaalista aaltoliikettä) voidaan kirjoittaa tähän muotoon ja sen amplitudifunktio voidaan esittää muodossa

$$B(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int A(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3r. \quad (2)$$

Fysikaalisesti tämä teoreema tarkoittaa, että mielivaltaisen muotoisella aallolla on yksikäsitteisesti määrätty spektri. Aallon aaltolukujakautuma $B(\mathbf{k})$, josta yksinkertaisella muunnoksella saadaan sen taajuusjakautuma, on siten aaltoliikkeen kuvaamiseen sopiva suure yhtä hyvin kuin kenttäsuure $A(\mathbf{r})$

Jos tiedetään, miten aaltoliikkeet superponoituvat ja jos dispersiorelaatio tunnetaan, voidaan mielivaltaisen aallon ajallinen käyttäytyminen hallita. Siten voidaan sanoa, että superpositiosääntö ja dispersiorelaatio yhdessä merkitsevät aaltoliikkeen liikeyhtälöä. Ns. lineaarinen superpositio on yksinkertaisin. Se tarkoittaa yksinkertaisesti, että kaksi aaltoliikettä A_1, A_2 aina muodostavat summa-aaltoliikkeen $A = A_1 + A_2$. Esim. sähkömagneettinen aaltoliike noudattaa hyvin suurella tarkkuudella lineaarista superpositiota. Tässä yhteydessä on tarkoituksenmukaista olettaa lineaarinen superpositio erityisesti, koska diffraktiokokeiden perusteella ilmeisestikin kaikki muutkin de Broglien aallot noudattavat tätä (sähkömagneettiset aallot voidaan käsittää fotoneja vastaaviksi de Broglien aalloiksi). Kääntäen tämä sääntö merkitsee myös, että aalto voidaan mielivaltaisella tavalla jakaa komponenteiksi ja että aalto käyttäytyy ikään kuin kukin sen komponentti käyttäytyisi muista riippumatta. Superposition lineaarisuus on siten erittäin tehokas oletus. Sen perusteella voidaan välittömästi todeta, että mielivaltaisessa aallossa sen kukin (infinitesimaalinen) monokromaattinen

komponentti värähtelee omalla dispersiorelaation $\omega = \omega(\mathbf{k})$ mukaisella taajuudellaan. Yleisen aallon ajallinen käyttäytyminen voidaan siis suoraan kirjoittaa muotoon

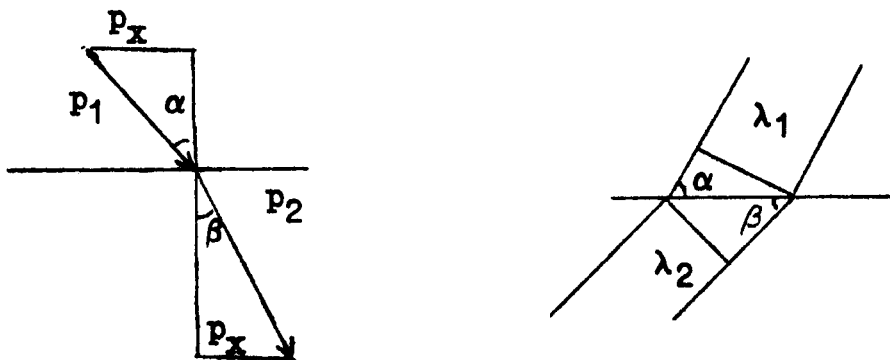
$$A(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int B(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega(\mathbf{k})t)} d^3k. \quad (3)$$

Tämän perusteella on helppo osoittaa, että aalto, jossa vain hyvin lähellä tiettyä aaltoluvun arvoa \mathbf{k}_0 olevat aaltoluvut ovat mainittavassa määrin edustettuina, etenee ensimmäisessä approksimaatiossa yleisen muotonsa säilyttäen ns. ryhmänopeudella $\nabla_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}_0}$. (Todistuksen suhteen viitataan oppikirjoihin.) On huomattava, että täysin monokromaattisessa aallossa energiatiheys on välttämättä homogeeninen, eikä energian etenemistä aaltoliikkeen mukana voida siinä havaita. Aaltoliikkeestä voidaan muodostaa havaittava signaali vain eri aaltolukuja yhdistämällä. Jos tällainen signaali on melkein monokromaattinen, sen käyttäytyminen on siis yksinkertaista etenemistä tietyllä nopeudella. Täten ryhmänopeus merkitsee fysikaalisesti energian etenemisnopeutta monokromaattisessa aaltoliikkeessä.

* * *

Kysymys objektien duaalisesta luonteesta heräsi nimenomaan erilaisten säteilyyn liittyvien ilmiöiden yhteydessä. Nähdäksemme, millä tavoin siihen liittyvän kahden täysin erilaisen mallin yhdistäminen on mahdollista, on siis luonnollista ottaa tarkasteltavaksi erilaisia säteilyyn liittyviä piirteitä ja katsoa, miten kumpikin malli erikseen voi ne selittää.

1. Säteily merkitsee aina energian kuljetusta tiettyyn suuntaan. Homogeeninen säteily voidaan käsitellä hiukkasmallin mukaan samanlaisista hiukkasista muodostuneeksi suihkuksi, jonka kaikki hiukkaset etenevät säteilyn suuntaan. Aaltomallissa se taas on käsiteltävä monokromaattiseksi säteilyn suuntaan liikkuvaksi aalloksi. Hiukkasten impulssi \mathbf{p} ja aaltoliikkeen aaltolukuvektori \mathbf{k} on siis asetettava säteilyn suuntaan. Samanaikainen kuvaaminen merkitsee siten mallien välistä relaatiota $\mathbf{p} \parallel \mathbf{k}$.



2. Säteilyn taittumista rajapinnassa luonnehtii taitekerroin $\mu = \sin \alpha / \sin \beta$, joka on säteilylle ja rajapinnalle luonteenomainen vakio. Jos säteilyä pidetään hiukkassuihkuna, käsitetään taittumisen tapahtuvaksi siten, että hiukkasten impulssin pinnan suuntainen komponentti säilyy. Taitekertoimeksi saadaan tällöin $\mu = p_2/p_1$. Aaltoliikkeen taittumisen tarkastelu taas on alkeisoptiikasta tuttu ja antaa taitekertoimeksi $\mu = \lambda_1/\lambda_2 = k_2/k_1$. Samanaikainen kuvaaminen edellyttää siis mallien välistä relaatiota $p_2/p_1 = k_2/k_1$. Koska tämän tulee olla voimassa mielivaltaiselle rajapinnalle, merkitsee tämä yleisesti, että impulssi on suoraan verrannollinen aaltolukuun $\mathbf{p} = H\mathbf{k}$,

$$\mathbf{p} = H\mathbf{k} \quad (4)$$

missä H on – tämän tarkastelun perusteella – säteilylle luonteenomainen "mallienkytkentävakio".

3. Energian eteneminen säteilyssä tapahtuu hiukkasmallin mukaan hiukkasten kuljettamana. Energian etenemisnopeus on sama kuin hiukkasten nopeus $v = p/m$. Aaltomallissa taas energia etenee ryhmänopeudella $d\omega/dk$. Saamme siis mallien välisen relaation

$$p/m = d\omega/dk .$$

Jos tässä otetaan huomioon edellisessä kohdassa saatu mallisuureitten samaistus $k = p/H$, voidaan tämä käsittää funktion $\omega = \omega(p)$ differentiaaliyhtälöksi. Jos oletetaan massa impulssista riippumattomaksi (epärelativistinen tarkastelu), saadaan

$$H\omega = \frac{p^2}{2m} + C,$$

missä C on integroimisvakio. Vakion C valintaa voidaan perustella toteamalla, että "ei mitään" merkitsee hiukkaskuvassa $E = 0$ ja aaltokuvassa $\omega = 0$, missä E ymmärretään hiukkasen kokonaisenergiaksi. Tällä tavoin saadaan relaatio

$$E = H\omega . \quad (5)$$

Tuloksen johtaminen relativistisesta hiukkasnopeuden lausekkeesta lähtien jää lukijan harjoitustehäväksi.

On huomattava, että energian absoluuttiarvon kiinnittäminen on aina vain sopimus. Ainoastaan systeemin energian muutokset ovat havaittavia, eikä sopimuksella siten ole varsinaisesti fysikaalista merkitystä. Näin ollen relaation kirjoittaminen tähän muotoon on fysikaalisesti täysin oikeutettua riippumatta esitetystä "perustelusta". Sen sijaan on todettava, että saadun relaation perusteella tutkittavien objektien aaltomalliin liittyvän kulmataajuuden absoluuttiarvolla ei myöskään voi olla fysikaalista merkitystä vaan ainoastaan sen muutoksilla.

Saadut relaatiot, jotka välttämättä seuraavat mallien yhdistämisestä, ovat esiintyvän verrannollisuuskertoimen H arvoa lukuun ottamatta samat kuin de Broglien kaksi ehtoa. Esitetyn perusteella voidaan sanoa enintään, että H on säteilylle tai objektille ominainen vakio. Tehtävän hypoteesin osalle jää siten vain oletus, että H on objektista riippumaton yleinen luonnonvakio, jota vakiintuneen tavan mukaan merkitään $H = h$. Sen arvon määrittäminen ja hypoteesin vahvistaminen (tai kumoaminen) on taas puhtaasti kokeellinen ongelma. Toistaiseksi ei kuitenkaan ole ilmennyt aiheutta luopua tästä hypoteesista.

Teorian rakentamisen kannalta on hyvä huomata, että saadut relaatiot merkitsevät suureiden p ja k sekä suureiden E ja ω varsin syvällistä samastusta. Tällöin p ja E on ymmärrettävä hiukkasmalliin liittyviksi suureiksi, vastaavasti k ja ω aaltomalliin liittyviksi. Esitetyt tarkastelut sisältävät sen ajatuksen, että fysikaaliselta kannalta ts. ilmiöstä havaittavien suureiden kannalta p ja k sekä E ja ω ovat ekvivalentteja suureita. Jos siis rakennamme esitetyle samanaikaiselle kuvaamiselle perustuvan teorian, on tämän samaistuksen sisällyttävä ilmeisestikin siihen niin, että on fysikaalisessa mielessä samantekevää, puhutaanko tämän teorian puitteissa impulssista vai aaltoluvusta tai vastaavasti energiasta vai kulmataajuudesta.

4. Lokaaliset kvantit, joita havaitaan kaikessa atomaarisessa säteilyssä ovat, ainakin näennäisesti, hiukkasmallia suosiva ilmiö. Hetkellä t pisteessä r havaittu kvantti, jonka impulssi ja energiakin voidaan määrätä, on luontevaa tulkita hiukkaseksi, jolla on tietty p ja E . Tässä kohden edellä saadut samaistukset $p \Leftrightarrow k$ ja $E \Leftrightarrow \omega$ näyttävät soveltuvan huonosti tilanteeseen. Tarkalleen määrätty k ja ω merkitsevät sekä paikallisesti että ajallisesti täysin lokalisoitumatonta, yli ajan ja avaruuden homogeenisesti ulottuvaa monokromaattista aaltoliikettä, kun taas kvantti esiintyy paikallisena ja hetkellisenä ilmiönä, johon hiukkasen tiettyä hetkenä tiettyyn pisteeseen keskittyneet p ja E sopivat hyvin.

Yleisellä aaltoliikkeen esitysmuodolla (1) voidaan kuitenkin aina kuvata – ainakin hetkellisesti – lokaalistakin objektia rakentamalla suppea "aaltopaketti". Funktioksi $A(\mathbf{r})$ (yhtälö (1)) voidaan nimittäin valita millainen tahansa fysikaalisesti mielekäs funktio, joka häviää tarkasteltavan alueen ulkopuolella. Yhtälö (2) osoittaa tällöin "paketin" aaltolukujakautuman. Jo kvalitatiivisestikin on ilmeistä, että hyvin terävän paketin esittämiseksi muodossa (1) tarvitaan hyvin pieniäkin aallonpi-

* Kirjoitettu ja monistettu ensimmäisen kerran kevään 1971 kurssille

tuuksia eli suuria arvoja \mathbf{k} , joten ilmeisestikin lokaalisuuden korostaminen merkitsee aaltolukujakautuman levittämistä. Tämä funktioiden $A(\mathbf{r})$ ja $B(\mathbf{k})$ "leveyden" käänteinen suhde voidaan ilmaista myös täsmällisessä matemaattisessa muodossa. Määritellään sitä varten aallon paikkajakautuma $\rho_A(\mathbf{r}) = |A(\mathbf{r})|^2$ ja aaltolukujakautuma $\rho_B(\mathbf{k}) = |B(\mathbf{k})|^2$, jotka ovat reaalisia, positiivisia funktioita. Merkitään jakautumien painopisteitä

$$\frac{\int \mathbf{r} \rho_A d^3 r}{\int \rho_A d^3 r} = \langle \mathbf{r} \rangle_A \quad ; \quad \frac{\int \mathbf{k} \rho_B d^3 k}{\int \rho_B d^3 k} = \langle \mathbf{k} \rangle_B \quad (6)$$

ja niiden hajontoja $\Delta_A \mathbf{r}$ ja $\Delta_B \mathbf{k}$, jolloin

$$\begin{cases} (\Delta_A \mathbf{r})^2 = \langle (\mathbf{r} - \langle \mathbf{r} \rangle)^2 \rangle = \frac{\int (\mathbf{r} - \langle \mathbf{r} \rangle)^2 \rho_A(\mathbf{r}) d^3 r}{\int \rho_A(\mathbf{r}) d^3 r} \\ (\Delta_B \mathbf{k})^2 = \langle (\mathbf{k} - \langle \mathbf{k} \rangle)^2 \rangle = \frac{\int (\mathbf{k} - \langle \mathbf{k} \rangle)^2 \rho_B(\mathbf{k}) d^3 k}{\int \rho_B(\mathbf{k}) d^3 k} \end{cases} \quad (7)$$

näiden suureiden normaalin määrittely tavan mukaisesti. Tällöin on yleisesti voimassa epäyhtälö

$$\Delta \mathbf{r} \Delta \mathbf{k} \geq \frac{3}{2} \quad (1 \text{ dimensiossa } \Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}). \quad (8)$$

Jos otamme huomioon samaistuksen (4), tämä saa Heisenbergin epätarkkuusrelaation muodon

$$\Delta \mathbf{r} \Delta \mathbf{p} \geq \frac{3}{2} \hbar \quad (1 \text{ dimensiossa } \Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar). \quad (9)$$

Aaltomallissa lokaalisen objektin (hetkellistä) esittämistä rajoittaa siis ainoastaan epätarkkuusperiaate (9). Tässä yhteydessä se on ehdoton matemaattinen rajoitus, joka koskee aaltoliikkeessä esiintyvien paikan arvojen ja impulssin arvojen jakautumien leveyttä.

Kuvatessamme lokaalista kvanttia aaltomallilla joudumme siis tinkimään sen lokalisaation tai sen impulssin arvon tarkkuudesta epäyhtälön (9) mukaisesti. Toisaalta, jos tarkastelemme hiukkasmallia, tätä rajoitusta ei ole itse mallissa. Kuitenkin, jos pidämme kiinni perusvaatimuksesta, jonka mukaan vain mitattava on fysikaalista, on meidän todettava, että paikan ja impulssin arvojen tarkkuus on tämän mallin puhtaasti metafysikaalinen piirre. Jokin raja varmasti on sillä tarkkuudella, jolla näitä suureita voidaan mitata. Samalla tämä merkitsee rajaa tarkkuudelle, jolla olemme oikeutetut määrittelemään kyseiset malliin liittyvät suureet fysikaalista luontoa kuvaavina suureina. Useat erilaiset oppikirjoissa esitetyt ajatuskokeen luontoiset tarkastelut viittaavat siihen, että tällaiseksi hiukkasmallin yhteyteen liitettäväksi havaintotarkkuuden rajaksi voidaan luontevasti postuloida sama Heisenbergin epätarkkuusperiaate (9), joka hallitsee aaltomallia. Hiukkasmallin kannalta tämä periaate siis primäärisesti merkitsee suureiden \mathbf{r} ja \mathbf{p} pienimpien mahdollisten mittausepätarkkuuksien välistä relaatiota. Tosin, viitaten mitattavuuteen suureiden fysikaalisuuden perusehtone, voidaan todeta, että mittaustarkkuuden raja määritelmän luontoisesti merkitsee samalla suureiden määriteltävyyden rajaa.

Täysin ekvivalentilla tavalla voidaan tarkastella aaltopakettien ajallista käyttäytymistä kiinteässä pisteessä sekä tietyn energian omaavan hiukkasen hetkellistä havaitsemista. Aallolle voidaan kirjoittaa ω -jakautuman avulla lauseke

$$A(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int C(\omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (10)$$

missä Fourier-integraaliteoreeman mukaan

$$C(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int A(t) e^{i\omega t} dt .$$

(11)

Aallon "ajallisen jakautuman" ja sen kulmataajuusjakautuman välillä vallitsee samalla tavoin matemaattinen ehto

$$\Delta t \Delta \omega \geq \frac{1}{2}$$

eli jos otamme huomioon samaistuksen (5)

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{1}{2} \hbar .$$

(12)

Tämä merkitsee tiettyä käänteistä riippuvuutta aaltoliikkeeseen osallistuvien kokonaisenergian arvojen jakautuman leveyden ja sen ajan välillä, jonka aaltopaketti havaittavassa määrin viipyy tarkasteltavassa pisteessä. Erityisesti, jos tarkastelemme tilannetta tutkittavan objektin "omassa" koordinaatistossa, voidaan Δt tulkita objektin elinajaksi. Objekti voi myös olla vaikkapa tietyssä viritystilassa oleva atomi, joka tietyn ajan kuluessa hajoaa fotoniksi ja alemmassa energiatilassa olevaksi atomiksi,

Vastaavasti joudutaan hiukkasmalliin liittämään lisäpostulaattina Heisenbergin epätarkkuusperiaate (12). Primäärisesti se tällöin mallin suhteen koskee epätarkkuutta havaitun objektin ajoittamisessa ja sen energian mittaamisessa, mutta voidaan jälleen todeta, että tämä saolla merkitsee rajoitusta ko. suureiden fysikaaliselle määriteltävyydelle.

Kaikkiaan näiden tarkastelujen tuloksena voidaan todeta, ettei lokaalisten kvanttien havaitsemiseen liity mitään, minkä perusteella jompaa kumpaa mallia voitaisiin pitää toista huonompana.

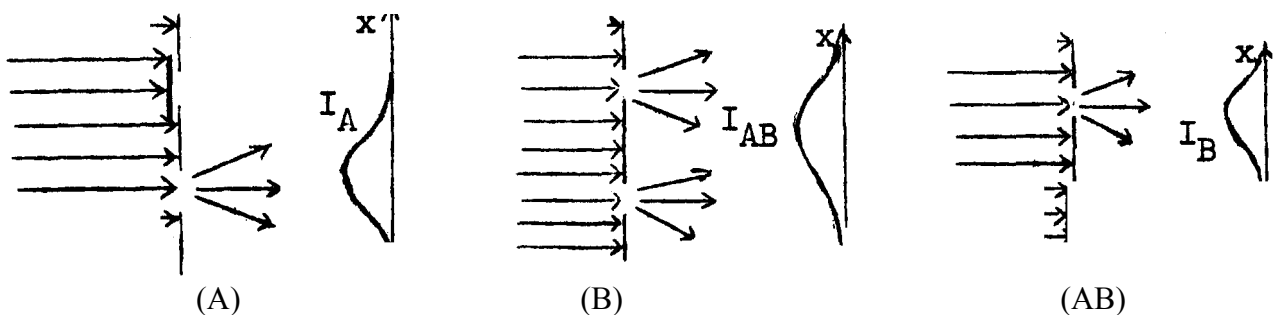
5. Kaksoisrakokoe on oikeastaan ajatuskoe. Se on kuitenkin luonteeltaan vain reaalisten diffraktiokokeiden pelkistys, jonka tarkoituksena on havainnollistaa näissä todettuja tuloksia. Sillä tarkoitetaan koejärjestelyä, jossa saapuvan säteilyn annetaan kulkea kahden vierekkäisen raon A ja B läpi ja havaitaan rakojen takana varjostimelle langenneen säteilyn energiajakautuma. Mittaukset suoritetaan kolmessa vaiheessa:

(A) raon B ollessa suljettuna,

(B) raon A ollessa suljettuna ja

(AB) molempien rakojen ollessa avoimina.

Kussakin vaiheessa saapuva intensiteetti ja mittausaika ovat samat.



Kaksoisrakokokeen kolme vaihetta

Jos säteily olisi hiukkassuihku, voisimme havaita varjostimella yksityiset osumakohdat. Saapunut energiajakautuma saataisiin tällöin yksinkertaisesti osumakohtien jakautumana. Koska vaiheessa AB havaitaan yhteensä molemmista raoista tulevat hiukkaset, on välttämättä

$$I_{AB}(x) = I_A(x) + I_B(x) .$$

(13)

* Kirjoitettu ja monistettu ensimmäisen kerran kevään 1971 kurssille

Jos säteily olisi aaltoliikettä (jonka oletamme noudattavan lineaarista superpositiota), saapuisi kolmannessa vaiheessa varjostimen kuhunkin pisteeseen aaltoliike, joka olisi kahdessa ensimmäisessä vaiheessa saatavien aaltojen superpositio. Jos kenttäsuuretta merkitään E :llä, olisi siis värähtelylle varjostimien pisteessä x voimassa

$$E_{AB}(x) \cos(\omega t - \delta_{AB}(x)) = E_A(x) \cos(\omega t - \delta_A(x)) + E_B(x) \cos(\omega t - \delta_B(x)) .$$

tai kompleksista esitysmuotoa käyttäen

$$C_{AB} e^{-i\omega t} = C_A e^{-i\omega t} + C_B e^{-i\omega t} ; C_N = E_N(x) e^{-i\delta_N(x)} , N = A, B, AB$$

Kun intensiteetti on verrannollinen amplitudin neliöön, saadaan sille (verrannollisuuskerrointa lukuun ottamatta)

$$I_{AB}(x) = E_{AB}^2 = E_A^2 + E_B^2 + 2 \operatorname{Re}\{C_A^* C_B\} = I_A + I_B + I_{\text{int}} .$$

(14)

Tulos siis eroaa kahden ensimmäisen vaiheen summasta interferenssitermillä

$$I_{\text{int}} = 2 |E_A E_B| \cos[\delta_B(x) - \delta_A(x)] ,$$

jonka vuoksi intensiteetti vaihtelee arvojen $(E_A + E_B)^2$ ja $(E_A - E_B)^2$ välillä.

Huomattakoon, että hiukkasilla ja aaltoliikkeillä saatavat tulokset (13) ja (14) olennaisesti seuraavat näiden mallien perusominaisuuksista, hiukkasten käyttäytymisestä yksilöinä ja aaltoliikkeen superpositiosta tai täydellisestä epäyksilöllisyydestä. Tällainen koe atomaarisilla objekteilla suoritettuna merkitsisi siten ratkaisevaa testiä tämän mallien välisen peruseron toteamiseksi.

Todellisia havaintoja vastaava tilanne kaksoisrakokokeessa

on kuitenkin senlaatuinen, että intensiteetit voidaan havaita yksittäisten kvanttien osumakoh-tien jakautumana, kuten hiukkasilla, mutta nämä jakautumat noudattavat aaltoliikkeen edellyttämää interferenssilakia (14). Tätä toteamusta voidaan pitää dualismin ytimenä.

Jos haluaisimme pitää kiinni hiukkasmallista, meidän olisi pakko selittää, millä tavoin raosta B kulkevat hiukkaset voivat tietää, onko rako A auki vai kiinni ja kääntäen, sillä niiden raon jälkeinen käyttäytyminen on tästä seikasta riippuvainen. Hiukkassuihkun hiukkasten väliset vuorovaikutukset eivät voi tätä selittää, sillä tulos on suihkun intensiteetistä riippumaton. Taylorin 1908 näkyvällä valolla suorittamassa interferenssikokeessa valon intensiteetti oli jopa niin heikko, että fotonin keskimääräiseksi voitiin arvioida n. 300 m. Vastaavan kokeen elektronisuihkulla ovat suorittaneet Suchkin ja Fabrikant 1949.

Joudumme siten välttämättä seuraavanlaatuisiin johtopäätöksiin:

Havaitut kvantit eivät ole yksilöitä hiukkasmallin edellyttämässä mielessä. Tämä merkitsee, ettei esim. tarkasteltavan systeemin elektroneja voida nimetä tai numeroida. Ne ovat identtisiä varsin syvässä mielessä. Hiukkasia ei voi oikeastaan siis edes yksilöidä siten, että olisi mielekäästä kysyä yhden elektronin systeemissäkään, onko hetkellä t_2 havaittu elektroni sama kuin hetkellä t_1 havaittu. Tässä mielessä jokainen hiukkasen tai kvantin havaitseminen on aina kertahavainto. Eri-tyisesti tämä merkitsee, että hiukkasen radasta puhuminen menettää fysikaalisen mielensä. Tällä tavoin voidaan ymmärtää se, että kokeen kokonaistilanne määrää kvanttien esiintymistiheyden kus-sakin kokeessa erikseen.

Yhden elektronin osumakohta ei ole ennustettavissa. Oikeastaan, jos emme voi pitää niitä yksilöinä, on syytä kysyä, missä mielessä on järkevää puhua yhden elektronin käyttäytymisestä. Luonnollisesti voimme puhua yhden elektronin systeemin käyttäytymisestä siinä fysikaalisessa mielessä kuin sitä voidaan havaita, jolloin tarkastelussa ovat koko ajan mukana myös kaikki systeemin puitteet, mutta puhuttaessa elektronin käyttäytymisestä systeemissä ollaan ilmeisesti varsin petollisella maaperällä. Itse asiassa elektronidiffraktiokoe merkitsee lukemattomien elektronien lähettä-

mistä systeemiin samalla tavoin yksi kerrallaan ja jos diffraktiokuvioita on uskomisen, ne "käyttäytyvät" eri tavoin. Kuitenkin hyvin monen elektronin tultua rekisteröidyksi tilastollinen lopputulos on sama säännönmukainen diffraktiokuvio. Elektronin osumisen todennäköisyys on siten määrätty tämän kuvion osoittama funktio. Joudumme näin liittämään yksittäiseen elektroniin tietyn todennäköisyysjakautuman, joka riippuu koetilanteesta ja aikaansaa diffraktiokuvion. Tällä tavoin tulee de Broglien aalto, ts. se aalto, jonka interferenssin tuloksena diffraktiokoe antaa kaavaa (14) vastaavan tuloksen, tulkituksi hiukkaseen liittyväksi todennäköisyysamplitudiksi. Tämä on alku kvanttimekaaniselle aaltofunktion käsitteelle.

4. Klassinen ja kvanttimekaaninen systeemi toisiinsa verrattuina

Ennen kuin siirrymme varsinaisesti kvanttimekaniikkaan, luomme yleiskatsauksen kysymyksiin, joita meidän on selvitettävä tällaisen uuden teorian puitteissa. Erityisesti on tarkoituksenmukaista ottaa vertailukohdaksi klassinen käsittely, jonka periaatteet jo hyvin tunnemme.

Fysikaalisessa ongelmassa on aina kysymys tietyn systeemin tarkastelusta. Systeemin teoreettiseen hallintaan liittyy kolme käsitettä:

1. Systeemin tila
2. Systeemiin liittyvät fysikaaliset suureet (dynaamiset muuttujat) ja
3. Systeemin liikeyhtälö.

Lähtökohdaksi tarvitaan välttämättä jonkinlainen systeemin alustava määrittely, josta lähinnä voisi käyttää sanontaa koordinaattien tai vapausasteiden toteaminen. Tämä merkitsee ainakin sopimusta siitä, mitä objekteja systeemimme kuuluu, mutta se ei ole mahdollista ilman, että meillä jo on tietty mielikuva objektien luonteesta ts. malli. Täten edeltävät atomaaristen objektien luonnetta koskevat tarkastelut muodostavat välttämättömän taustan niiden muodostamien systeemien teoreettiselle tarkastelulle.

Klassisessa fysiikassa objektit ovat hiukkasia ja kenttiä. Todettaessa, mitkä hiukkaset ja kentät kuuluvat systeemiin sen objekteina, tulee samalla implisiittisesti ilmaista, mitkä ovat systeemin kuvaamiseen tarvittavat "koordinaatit". Kvanttimekaniikan lähtökohta on sama alustava systeemin määrittely. Esim. voimme ottaa tarkasteltavaksi N hiukkasen kolmiulotteisen systeemin. Tämä alustava määritelmä on ilmaistu yhtä hyvin kvanttimekaanista kuin klassistakin käsittelyä varten. Lähtökohdaksi molemmissa otetaan samat systeemin koordinaatit – esimerkissämme N hiukkasen paikakoordinaatit x, y, z . Tässä mielessä – ja vähän laajemmassakin kuten tulee ilmenemään – kvanttimekaniikkakin on pakotettu rakentamaan klassiselle käsitteistöille. Tähän kuitenkin liittyy pieni terminologinen sekaannus. Klassisessa käsittelyssä hiukkasella tarkoitetaan nimenomaan edellä tarkastellun hiukkasmallin mukaista objektia. Kvanttimekaniikassa sen sijaan hiukkasella tarkoitetaan objektia joka on "hiukkanen" vain dualismin edellyttämässä rajoitetussa mielessä, kvanttina ilman yksilöllisyyttä.

Tässä yhteydessä rajoitetaan käsiteltävien systeemien luonnetta siten, että vain hiukkaset ovat systeemin objekteja. Sen sijaan kaikki kentät, sekä ulkoiset että hiukkasten välisiin vuorovaikutuksiin liittyvät, käsitetään kuuluviksi systeemin ulkoisiin puitteisiin siten, että hiukkasten ollessa tietyissä pisteissä niillä on näiden kenttien ansiosta tietty potentiaalienergia. Tässäkin suhteessa hiukkasysteemien kvanttimekaniikka vielä seisoo toisella jalallaan klassisella maaperällä. (Yleisemmältä pohjalta voidaan myös kehittää kvanttimekaniikka samoja suuntaviivoja noudattaen, mutta se veisi tässä yhteydessä liian pitkälle.)

Systeemin klassinen hetkellinen tila on määrätty, kun sen koordinaattien ja niitä vastaavien impulssikoordinaattien arvot tunnetaan, ts. tila = $\{x_1, \dots, x_N, p_1, \dots, p_N\}$.

Klassisen systeemin fysikaalisille suureille voidaan kirjoittaa lausekkeet koordinaattien ja impulssien avulla, esimerkkeinä liike-energia, potentiaalienergia, impulssimomentti. Yleisesti voidaan sanoa, että ne ovat muotoa $A = A(x_1, \dots, x_N, p_1, \dots, p_N)$. Kun systeemin tila tunnetaan on siten jokaisen suureen A arvo yksikäsitteisesti määrätty ja suoraan laskettavissa sen lausekkeesta.

Kvanttimekaniikassa systeemin tilan ilmaisee sen koordinaateista riippuva kompleksiarvoinen

aaltofunktio $\Psi = \Psi(x_1, \dots, x_N)$.

Systeemiin kuuluvat fysikaaliset suureet menettävät kvanttimekaniikassa sen kiinteän keskinäisen kytkennän, mikä niillä on toisiinsa klassisessa systeemissä. Erityisesti impulssilla ei enää voi olla, kuten jo edellä esitetystä samaistuksesta aaltoluvun kanssa on ilmeistä, samanlaista kiinteätä yhteyttä koordinaattien muutosnopeuteen. Tällaiset nopeudet itse asiassa ovat menettäneet käsitteellisen sisältönsä klassisen hiukkasmallin mukana.

Oleennaista on, että fysikaalisen suureen arvo annetussa tilassa ei enää ole yksikäsitteisesti määrätty. Enin, mitä suureesta A voidaan sanoa tilassa Ψ , on sen mahdollisten eri arvojen a_i todennäköisyydet $P\{A = a_i | \Psi\} = c_i$. Nämä todennäköisyydet ilmaisevat A :n arvojen jakautuman tilassa Ψ , ja näiden perusteella voidaan helposti määrittellä A :n odotus arvo $\langle A \rangle = \sum c_i a_i$ ja hajontaneliö $(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \sum (a_i - \langle A \rangle)^2 c_i$.

Yleensä suureen kaikki klassisen lausekkeen $A(x_i, P_i)$ edellyttämät arvot eivät ole mahdollisia. A :n mahdollisia arvoja a kutsutaan sen ominaisarvoiksi ja sen kaikkien ominaisarvojen joukko $\{a\}$ on sen ominaisarvospektri. Sellainen erityinen tila, jossa A :lla on määrätty arvo a eli $P\{A = a\} = 1$ ja $P\{A \neq a\} = 0$, on A :n tähän ominaisarvoon kuuluva ominaistila Ψ_a . Ilmeisestikin on tilassa Ψ_a odotusarvo $\langle A \rangle = a$ ja hajonta $\Delta A = 0$. Kääntäen ominaistilan määrittelyn perusteella Ψ on varmasti A :n ominaistila jos siinä $\Delta A = 0$.

Klassinen tilan määrittely on niin konkreettinen, että on periaatteessa täysin selvää, miten systeemin tila voidaan mittaamalla todeta. Sen sijaan kvanttimekaaninen tila on siinä määrin abstraktinen, että vastaavaa mittausta voidaan tuskin ajatella. Esim. elektronidiffraktiossa ilmenevän elektronin de Broglien aallon havaitseminen on aivan vastaava kysymys. Interferenssi osoittaa tämän aallon olemassaolon tilannetta säätelevänä taustamekanismina. Se ilmenee selvästi havaitusta osu-makohtien todennäköisyysjakautumasta. Tämä jakautuma on karakteristinen kyseiseen systeemiin tarkasteltavalla energialla saapuvan yhden elektronin aaltofunktiolle. Mutta sitä ei voitaisi havaita pelkästään tuon yhden elektronin perusteella, eikä sekään sitä paitsi vielä riittä ilmaisemaan itse aaltoa, ts. sen kompleksista amplitudia, paikan funktiona, vaan ainoastaan sen intensiteetin, joka on amplitudin itseisarvon neliöön verrannollinen.

Tilan havaitsemiseen ja säätelemiseen liittyvät vaikeudet eivät kuitenkaan tuhoa teorian kytkentää havaintoihin niin ratkaisevasti kuin saattaisi ajatella. Itse aaltofunktio on tässä teoriassa vain abstrakti "taustamekanismi" ja kytkennän havaintoihin muodostaa kaikki se, mitä fysikaalisista suureista teorian perustella voidaan sanoa. Jotta hallitsisimme tämän kysymyksen teorian puitteissa, meidän on osattava vastata kunkin tarkasteltavaan systeemiin liittyvän fysikaalisen suureen A kohdalla seuraaviin kysymyksiin:

1. Miten löydetään suureen A ominaisarvot a_i ja -tilat Ψ_i ?
2. Miten annetussa mielivaltaisessa tilassa Ψ määritetään kunkin arvon $A = a_i$ todennäköisyys $P\{A = a_i | \Psi\}$?

(Nämä kysymykset lukijan on syytä esittää itselleen jokaisen tarkastelemansa systeemin ja suureen kohdalla. Osatessaan vastata näihin hän hallitsee erään olennaisen osan kvanttimekaanista käsittelykoneistoa.)

Näistä ensimmäinen kysymys johtaa selvimpään ja yksinkertaisimpaan teorian kokeelliseen testiin. Sen vastaukset merkitsevät kvanttimekaniikan vastausta suureiden kvantittumista koskevaan ongelmaan. Erityisesti teoria antaa tietyn ennusteen atomaarisen systeemin kokonaisenergian mahdollisille arvoille, joita tulee verrata systeemin havaitun spektrin mukaisiin stationaaristen tilojen energioihin

Jälkimmäinen kysymys on teorian hallinnan kannalta aivan olennainen. Teorian kokeellista testausta ajatellen se sen sijaan on hyvin hankala. Ensinnäkin se johtaa meidät takaisin tilan määrittäystä tai säätelyä koskeviin hankaluuksiin. Toiseksi todennäköisyyksien mittaaminen edellyttäisi äärettömän monen samassa tilassa olevan systeemin havaitsemista, mikä on tarkkaan ottaen mahdoton tehtävä. Monien ongelmien yhteydessä suureen arvojen todennäköisyysjakautuman yksityis-

kohtainen tunteminen ei siksi olekaan niin tärkeää, vaan jakautuman yleinen luonne, esim. sen keskiarvon ja hajonnan ΔA tunteminen riittää. Kun tämän vuoksi usein keskitytään tutkimaan, miten odotusarvo $\langle A \rangle$ määritetään annetussa tilassa, on hyvä muistaa, että tämä on vain hyvin pieni osa täydellistä kysymystä 2.

Alussa kolmantena käsitteenä mainittu liikeyhtälö poistaa tarkastelujemme hetkellisyyden tuoden mukanaan tilan ajallisen käyttäytymisen. Klassisessa fysiikassa ja kvanttimekaniikassa liikeyhtälöllä on sama merkitys. Se on yhtälö, jonka avulla voidaan laskea systeemin tila mielivaltaisella ajanhetkellä t , kun se tunnetaan alkuhetkellä $t = 0$.

Tilan ja fysikaalisten suureiden erilaisen luonteen johdosta se kuitenkin saa hiukan erilaisen sisällön. Koska klassisessa fysiikassa tila määrää yksikäsitteisesti kaikkien systeemiin liittyvien fysikaalisten suureiden $A = A(x_i, p_i)$ arvot, saadaan ne kaikki liikeyhtälön perusteella ajan funktiona $A(t) = A(x_i(t), p_i(t))$. Kvanttimekaniikassa voidaan vastaavasti laskea liikeyhtälön perusteella suureen A eri arvojen todennäköisyydet, erityisesti siis myös sen odotusarvo ja hajonta ajan funktiona.

Huomattakoon, että tilan ja fysikaalisten suureiden luonteen ja mahdollisten arvojen tarkastelua varten riitti systeemin määrittelyksi sen koordinaattien toteaminen. Tätä voitaisiin kutsua systeemin kinemaattiseksi määrittelyksi. Sen sijaan ajallisen käyttäytymisen selvittäminen ja siis liikeyhtälön kirjoittaminen edellyttää systeemin täydellistä dynaamista määrittelyä, ts. systeemin ulkoisten puitteiden, kaikkien esiintyvien vuorovaikutusten ja ulkoisten kenttien eksplisiittistä toteamista. Siksi liikeyhtälö on aina spesifisempi käsite kuin tila ja systeemin fysikaaliset suureet.

Tämän yleisluontoisen katsauksen jälkeen lähdemme tarkastelemaan, millä tavoin kvanttimekaniikassa saadaan vastaukset edellä esitettyihin kysymyksiin. Tätä varten otamme käsiteltäväksi mahdollisimman yksinkertaisen systeemin, yhden hiukkasen systeemin yhdessä ja kolmessa dimensiossa. Systeemin koordinaatteina on tällöin yksi paikkavektori \mathbf{r} , joka yksiulotteisessa tapauksessa supistuu yhdeksi ainoaksi skalaarimuuttujaksi x . Mielenkiintoisia fysikaalisia suureita ovat lähinnä hiukkasen paikka \mathbf{r} , impulssi \mathbf{p} , liike-energia T , potentiaalienergia V , impulssimomentti \mathbf{L} ja kokonaisenergia E .

5. Kvanttimekaaniset perusprobleemat yhden hiukkasen systeemissä

Tila

Yhden hiukkasen systeemin tilaa kuvaa aaltofunktio $\Psi = \Psi(x)$ (1-dim) ; $\Psi = \Psi(\mathbf{r})$ (3-dim). Aaltofunktio merkitsee hiukkasen de Broglien aallon käsitteellistä täsmennystä. Intuitiivisena johdopäätöksenä kaksoisrakokokeen analysoinnista vahvistetaan sen tulkinta: $\Psi(x)$ tai $\Psi(\mathbf{r})$ on hiukkasen paikan suhteellinen todennäköisyysamplitudi. Tämä merkitsee, että $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$ on paikan suhteellinen todennäköisyystiheys. Tällöin on suhteellinen todennäköisyys, että systeemin ollessa tilassa Ψ hiukkanen esiintyy välillä $a \leq x \leq b$ tai alueessa V , esitettävissä integraalina

$$\int_a^b \Psi^* \Psi dx \quad \text{tai} \quad \int_V \Psi^* \Psi d^3r .$$

Tulkinta osoittaa, että vakiolla kertominen ei muuta systeemin tilaa, toisin sanoen aaltofunktio $c\Psi$ esittää aina samaa tilaa kuin Ψ . Varman tapahtuman todennäköisyys on yleisen sopimuksen mukaisesti = 1. Yhden hiukkasen systeemiä tarkasteltaessa on varma tapahtuma, että hiukkanen on systeemissä. Siten on tarkoituksenmukaista normittaa aaltofunktio eli kertoa se sellaisella vakiolla, että

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = 1 \quad \text{tai} \quad \int_{r\text{-avaruus}} \Psi^* \Psi d^3r = 1 \quad (15)$$

Normitettu aaltofunktio on paikan todennäköisyysamplitudi absoluuttisessa mielessä ja antaa myös hiukkasen paikkaa koskevat todennäköisyydet

$$P\{a \leq x \leq b\} = \int_a^b \Psi^* \Psi dx \quad ; \quad P\{\mathbf{r} \in V\} = \int_V \Psi^* \Psi d^3r \quad . \quad (16)$$

Erilaisten probleemojen yhteydessä joudutaan kysymään, millaiset funktiot ovat aaltofunktioksi kelpaavia. Tällöin on kiinnitettävä huomiota säännöllisyyteen ja normittuvuuteen. Yleensä vaaditaan, että aaltofunktio on kaikkine derivaattoineen jatkuva. Vain jos systeemin itsensä määrittelyyn liittyy epäjatkuvuuskohtia, mikä luonnollisesti merkitsee aina todellisen tilanteen epäfysikaalista idealisointia, on pakko näissä kohdissa tinkiä säännöllisyysvaatimuksista. Tätä voidaan perustella yleisin fysikaalisiin argumentein. Erikoispisteet ovat epäfysikaalisia jo pelkästään, koska ajatus ylimalkaan mistä tahansa tarkasti yhteen pisteeseen keskittyvästä on epäfysikaalinen mitattavuuden vaatimuksen perusteella. Voidaan myös todeta, että kvanttimekaniikan käsittelykoneisto välttämättä edellyttää hyvin suurta säännöllisyyttä aaltofunktiolta.

Normittuvuuden suhteen tilanne on hyvin samanlainen. Probleemasta riippuen kvanttimekaaninen käsittelykoneisto saattaa edellyttää jopa kaikkien aaltofunktion derivaattojen normittuvuutta. Toisaalta normittumatonkin aaltofunktio saattaa esittää fysikaalisesti täysin mielekkäällä tavalla määriteltyä tilannetta. Esim., jos $|\Psi|^2 \equiv 1$, voidaan todeta, että hiukkanen on yhtä suurella todennäköisyydellä missä tahansa, ts. se on täysin lokalisoitumaton. Tosin tällainen tilanne ei ole havaitajan hallittavissa millään tavoin. Normittumattomat aaltofunktiot, kuten epäsäännölliset, tulevat kysymykseen erilaisina idealisoituina rajatapauksina. Usein on tällöin kysymyksessä hiukkassuihkun tapainen fysikaalinen tilanne, jossa voidaan katsoa olevan äärettömän monta samassa tilassa olevaa yhden hiukkasen systeemiä. Ehdottomasti kelpaamaton fysikaalinen tilannetta esittämään sen sijaan on jokainen funktio, joka kasvaa rajattomasti \mathbf{r} :n kasvaessa.

Paikka ja potentiaalienergia

Aaltofunktion tulkinta sisältää suoranaisten vastauksen (yhtälöt (16) kysymykseen, miten annetussa tilassa paikan eri arvojen todennäköisyydet voidaan määrittää. Tämä vastaus koskee samalla mitä tahansa pelkästään paikan funktiona määriteltävää suuretta, kuten potentiaalienergiaa $V(\mathbf{r})$ jolla on tietty tämän funktion määrittelemä arvo $V(\mathbf{r}_0)$, jos hiukkanen on pisteessä \mathbf{r}_0 . Erityisesti paikan odotusarvoksi saadaan tällä perusteella

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx \quad ; \quad \langle \mathbf{r} \rangle = \int_{\mathbf{r}\text{-avaruus}} \Psi^* \mathbf{r} \Psi d^3r \quad (17)$$

ja potentiaalienergian odotusarvoksi

$$\langle V(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* V(x) \Psi dx \quad ; \quad \langle V(\mathbf{r}) \rangle = \int_{\mathbf{r}\text{-avaruus}} \Psi^* V(\mathbf{r}) \Psi d^3r \quad (18)$$

Myöskin paikan ominaisarvoja koskevaan kysymykseen on vastattu samalla. Kaikki reaaliarvot x tai \mathbf{r} ovat paikan ominaisarvoja. Ominaisfunktion Ψ_{r_0} tulisi määritelmän mukaan olla sellainen funktio, että $P\{\mathbf{r} = \mathbf{r}_0\} = 1$. Tällainen funktio on tavanomaisen funktiokäsitteen puitteissa oikeastaan mahdoton, mikä vastaa sitä toteamusta että fysikaalisesti myös tarkalleen määrätty paikka on mahdoton. Kysymyksessä siis pitäisi olla funktio, joka häviää kaikkialla paitsi pistettä $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$. (Oikeammin $\int_V \Psi^* \Psi d^3r = 0$ kaikille alueille V , joihin piste \mathbf{r}_0 ei kuulu). Tällaista "funktioita" on tapana merkitä $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ ja kutsua Diracin delta-funktioksi. Paikan ominaisarvoon \mathbf{r}_0 kuuluva ominaisfunktio on siis $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$.

Impulssi ja liike-energia

Impulssin samaistaminen aaltoluvun kanssa (de Broglien ensimmäinen ehto (4)) osoittaa, että tilaa, jonka impulssi on määrätty $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0$, tulee esittää aallolla, jonka aaltoluku on määrätty $\mathbf{k} = \mathbf{p}_0/\hbar$. Toisin sanoen, impulssin ominaisarvoon \mathbf{p}_0 kuuluvan ominaistilan on oltava muotoa

$$\psi_{p_0} = e^{ip_0x/\hbar} \quad (1\text{-dim}) \quad \psi_{p_0} = e^{ip_0 \cdot \mathbf{r}/\hbar} \quad (3\text{-dim}). \quad (19)$$

Impulssin mahdollisten arvojen suhteen ei ilmeisesti ole mitään rajoituksia vaan kaikki reaaliset arvot p_0 tai \mathbf{p}_0 ovat impulssin ominaisarvoja. Ominaisfunktiot (19) ovat normittumattomia sillä $|\psi_{p_0}|^2 \equiv 1$. Ne vastaavat tiettyä idealisoitua rajatapausta, joka on epäfysikaalinen jo siksi, että impulssin tarkka mittaaminen on mahdotonta.

Tarkastaaksemme kysymystä impulssin eri arvojen todennäköisyyksistä otamme aluksi yksinkertaisen esimerkin. Tilassa

$$\psi = Ae^{ik_1 \cdot \mathbf{r}} + Be^{ik_2 \cdot \mathbf{r}} \quad (20)$$

ovat edustettuina impulssin arvot $\mathbf{p}_1 = \hbar\mathbf{k}_1$ ja $\mathbf{p}_2 = \hbar\mathbf{k}_2$. On luontevaa tulkita tässä A ja B näiden impulssin arvojen suhteelliseksi todennäköisyysamplitudeiksi, jolloin $|A|^2$ ja $|B|^2$ olisivat näiden arvojen suhteelliset todennäköisyydet tilassa (20) ja varsinaisiksi todennäköisyyksiksi saataisiin näin

$$P\{\mathbf{p} = \mathbf{p}_1\} = \frac{|A|^2}{|A|^2 + |B|^2} \quad ; \quad P\{\mathbf{p} = \mathbf{p}_2\} = \frac{|B|^2}{|A|^2 + |B|^2}.$$

Mielivaltainen aaltofunktio ψ voidaan esittää aivan vastaavassa muodossa

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \phi(p) e^{ipx/\hbar} dp \quad ; \quad \psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \phi(\mathbf{p}) e^{ip \cdot \mathbf{r}/\hbar} d^3 p, \quad (21)$$

jolloin Fourier-amplitudifunktio ϕ voidaan tulkita impulssin suhteelliseksi todennäköisyysamplitudiksi. Fourier-integraaliteoreeman mukaan tämä saadaan lasketuksi aaltofunktiosta ψ integraalina

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx \quad ; \quad \phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\mathbf{r}) e^{-ip \cdot \mathbf{r}/\hbar} d^3 r. \quad (22)$$

Tulkinnan mukaisesti $|\phi|^2 = \phi^* \phi$ on impulssin suhteellinen todennäköisyystiheys, josta integroimalla tietyn impulssin arvojoukon yli saadaan suhteellinen todennäköisyys sille, että tilassa ψ olevan hiukkasen impulssilla on tähän arvojoukkoon kuuluva arvo. Todennäköisyydet saadaan suoraan absoluuttisina, jos impulssin todennäköisyysamplitudi on normitettu eli

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^* \phi dp = 1 \quad ; \quad \int_{p\text{-a varuus}} \phi^* \phi d^3 p = 1 \quad (23)$$

Tässä yhteydessä on hyvin suuri merkitys Fourier-integraaleja koskevalla yleisellä teoreemalla:

Jos ψ_1 ja ψ_2 ovat kaksi mielivaltaista aaltofunktiota sekä ϕ_1 ja ϕ_2 niiden Fourier-amplitudifunktiot, on voimassa yhtälö

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \psi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1^* \phi_2 dp \quad ; \quad \int_{r\text{-a var uus}} \psi_1^* \psi_2 d^3 r = \int_{p\text{-a var uus}} \phi_1^* \phi_2 d^3 p . \quad (24)$$

Tästä seuraa erityisesti asettamalla $\psi_2 = \psi_1$, että impulssijakautuma on normitettu jos aaltofunktio on normitettu.

Siis, jos tilaa esittävä aaltofunktio on normitettu, voidaan suoraan lausua todennäköisyys sille, että tässä tilassa hiukkasen impulssi sattuu välille $p_1 \leq p \leq p_2$ tai arvojoukkoon Q , integraalina

$$P\{p_1 \leq p \leq p_2\} = \int_{p_1}^{p_2} \phi^* \phi dp \quad ; \quad P\{p \in Q\} = \int_Q \phi^* \phi d^3 p . \quad (25)$$

Erityisesti seuraa tästä impulssin odotusarvolle lauseke

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^* p \phi dp \quad ; \quad \langle p \rangle = \int_{p\text{-a var uus}} \phi^* p \phi d^3 p . \quad (26)$$

Koska liike-energia $T = p^2/2m$ riippuu vain impulssista on samalla saat vastaukset liike-energian arvoja ja niiden todennäköisyyksiä koskeviin kysymyksiin:

$$P\left\{\frac{p_1^2}{2m} \leq T \leq \frac{p_2^2}{2m}\right\} = \begin{cases} \int_{-p_2}^{-p_1} \phi^* \phi dp + \int_{p_1}^{p_2} \phi^* \phi dp \\ \int_{p_1}^{p_2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \phi^* \phi p^2 \sin\theta dp d\theta d\varphi \end{cases} \quad (27)$$

$$\langle T \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^* \frac{p^2}{2m} \phi dp \quad ; \quad \langle T \rangle = \int_{p\text{-a var uus}} \phi^* \frac{p^2}{2m} \phi d^3 p \quad (28)$$

Odotusarvojen (26) ja (28) laskemiseen nähden seuraa teoreemasta (24) eräs hyvin tärkeä tulos.

Asetetaan tässä teoreemassa $\psi_1 = \psi$, jolloin $\phi_1 = \phi$, ja derivoidaan aaltofunktion lauseke (21) seuraavasti

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} p \phi(p) e^{ipx/\hbar} dp \quad ; \quad \frac{\hbar}{i} \nabla \psi = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int p \phi(p) e^{ip\cdot r/\hbar} d^3 p . \quad (29)$$

Tämä osoittaa, että jos asetetaan $\psi_2 = \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dx}$ tai $\psi_2 = \frac{\hbar}{i} \nabla \psi$, on $\phi_2 = p\phi(p)$ tai $\phi_2 = p\phi(p)$. Teoreema (24) lausuu siis tuloksen

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dx} dx \quad \text{tai} \quad \langle p \rangle = \int \psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \psi d^3 r . \quad (30)$$

Samalla tavalla nähdään, että

$$\langle T \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} \right) dx \quad \text{tai} \quad \langle T \rangle = \int \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \right) d^3 r . \quad (31)$$

Tulokset ovat sikäli merkittäviä, että ne antavat odotusarvot $\langle p \rangle$ ja $\langle T \rangle$ ilman että on ensin välttämätöntä laskea impulssijakautumaa $|\phi|^2$.

Koska mielivaltaisille (samanlaatuisille) suureille A ja B pätee $\langle A+B \rangle = \langle A \rangle + \langle B \rangle$, on meillä tulosten (18) ja (31) perusteella nyt myös lauseke kokonaisenergian $E = T + V$ odotus arvolle

$$\langle E \rangle = \int \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi \right) d^3r \quad (32)$$

Fysikaalisia suureita vastaavat operaattorit

Edellä todetut suureiden odotusarvojen lausekkeet ovat mielenkiintoisella tavalla samanmuotoiset. Tämä samanmuotoisuus voidaan pukea eksplisiittiseen muotoon ottamalla käytäntöön annettua suuretta A vastaava operaattori \hat{A} . Tällainen operaattori kohdistuu aina aaltofunktioon ψ siten, että $\hat{A}\psi$ on jokin muu aaltofunktioksi kelpaava funktio. Operaattorin avulla odotusarvot voidaan kirjoittaa yleiseen esitysmuotoon

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{A} \psi dx \quad \text{tai} \quad \langle A \rangle = \int_{r\text{-a var uus}} \psi^* \hat{A} \psi d^3r . \quad (33)$$

Edellä olevan perusteella tällainen operaattorin käsite on vielä varsin rajoitettu. Voimme todeta, että mielivaltaista paikan funktiota $V(\mathbf{r})$ vastaa operaattori \hat{V} , joka merkitsee tällä funktiolla kertomista

$$\hat{V}\psi = V(\mathbf{r}) \cdot \psi . \quad (34)$$

Impulssia p taas vastaa laskusäännön (30) mielessä differentiaalioperaattori

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad \text{tai} \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (35)$$

ja liike-energiaa $T = p^2/2m$ operaattori

$$\hat{T} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad \text{tai} \quad \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (36)$$

Liike-energian odotusarvoa esittävän, muotoa (33) olevan lausekkeen (31) johto on ilmeisellä tavalla yleistettävissä koskemaan suuretta, joka on mielivaltainen impulssin potenssi $A = p^n$. Tätä suuretta vastaava operaattori on selvästikin $\hat{A} = \hat{A} = \hat{p}^n = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^n$ tai $\hat{A} = \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right)^n$. Yleistystä voidaan

jatkaa edelleen impulssin polynomeihin ja lopulta p :n potenssisarjoihin (mikä luonnollisesti edellyttäisi joitakin konvergenssitarkasteluja). Tällä tavoin voidaan todeta, että säännön (33) mielessä suuretta $A = f(p)$, joka saa olla varsin yleinen impulssin funktio vastaa operaattori, joka voidaan muodollisesti kirjoittaa

$$\hat{A} = f(\hat{p}) = f\left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) . \quad (37)$$

*Tämä kirjoitustapa luonnollisesti edellyttää, että $f(p)$ voidaan kehittää p :n potenssisarjaksi, koska (toistaiseksi) meillä on välitön määrittely ainoastaan operaattorin potensseille (\hat{A}^n on n peräkkäistä

operaatiota \hat{A}) ja summalle $((\hat{A}+\hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi)$.

Ottaen huomioon, että aina $\langle A+B \rangle = \langle A \rangle + \langle B \rangle$, voidaan todeta että tähänastisen perusteella, varsin mielivaltaista muotoa $A = A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = V(\mathbf{r}) + f(\mathbf{p})$ olevaa suuretta vastaa säännön (33) mielessä

$$\hat{A} = A(\hat{r}, \hat{p}) = A(\mathbf{r}, \frac{\hbar}{i} \nabla). \quad (38)$$

Oikeastaan tämä korvausperiaate, jonka mukaan suuretta vastaava operaattori saadaan suureen klassisesta lausekkeesta korvaamalla siinä impulssi impulssioperaattorilla $\frac{\hbar}{i} \nabla$, on hyvin yleinen, paljon yleisempi kuin tässä on mahdollista todeta, (Pieni yleistys tosin tähän vielä saadaan impulssimomentin yhteydessä.) Erityisesti on tässä yhteydessä todettava, että tämä pätee kokonaisenergiaan $E = T + V$ nähden, jota vastaavan operaattoria

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \hat{V} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) & \text{1-dim} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) & \text{3-dim} \end{cases} \quad (39)$$

kutsutaan systeemin Hamiltonin operaattoriksi.

Fysikaalisia suureita vastaavilla operaattoreilla voidaan havaita olevan eräitä yleisiä yhteisiä ominaisuuksia. Tärkein on toteamus, että ne ovat 1. lineaarisia ja 2. hermiittisiä eli itseadjungoituja. Tämä merkitsee, että jos ψ_1 ja ψ_2 ovat kaksi mielivaltaista aaltofunktiota, niin

$$\hat{A}(a\psi_1 + b\psi_2) = a\hat{A}\psi_1 + b\hat{A}\psi_2 \quad (\text{lineaarisuus}) \quad (40)$$

ja

$$\int \psi_1^* \hat{A}\psi_2 d^3r = \int (\hat{A}\psi_1)^* \psi_2 d^3r \quad (\text{hermiittisyys}). \quad (41)$$

Lukijan on hyvä todeta nämä ominaisuudet eksplisiittisesti esiintyneille operaattoreille.

Ominaisarvoprobleema

Paikan ja impulssin sekä oikeastaan samalla kaikkien vain paikasta riippuvien sekä vain impulssista riippuvien suureiden osalta olemme vastanneet molempiin luvussa 4. esitettyihin peruskysymyksiin. Sen sijaan muihin suureisiin A nähden olemme vasta todenneet odotusarvon laskemistavan (33) kun tila on tunnettu, mikä on vain eräs hyvin pieni osa jälkimmäistä kysymystä. Tämän avulla voidaan kuitenkin löytää vastaus ominaisarvoja ja ominaistiloja koskevaan kysymykseen 1.

Oletamme, että korvausperiaate (38) on riittävän yleinen sääntö odotusarvojen laskemiseksi operaattoreiden avulla, jotta sitä voidaan soveltaa myös odotus arvon $\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle$ eli suureen hajontaneliön laskemiseen. Tälle saadaan näin lauseke

$$\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \int \psi^* (\hat{A} - \langle A \rangle) (\hat{A} - \langle A \rangle) \psi d^3r,$$

ja edelleen operaattorin \hat{A} hermiittisyyden (41) vuoksi

$$(\hat{A} - \langle A \rangle) \psi)^2 = \int [(\hat{A} - \langle A \rangle) \psi]^* (\hat{A} - \langle A \rangle) \psi d^3r = \int |(\hat{A} - \langle A \rangle) \psi|^2 d^3r. \quad (42)$$

Kuten aikaisemmin todettiin, suureen hajontaneliön häviäminen on välttämätön ja riittävä eh-

to sille, että tarkasteltava tila olisi suureen ominaistila. Tällöin odotusarvo $\langle A \rangle = a$ on vastaava ominaisarvo. Nyt lauseke (42) voi hävitä vain jos $(\hat{A} - \langle A \rangle)\psi = 0$. Siten ψ voi olla suureen A ominaistila ja a sen ominaisarvo vain, jos ne toteuttavat ominaisarvoyhtälön

$$\hat{A}\psi = \psi a \quad (43)$$

Suureen ominaisarvojen ja -tilojen määrittäminen voi siis tapahtua ratkaisemalla suureta vastaava ominaisarvoyhtälö (43). Ratkaisemisella tarkoitetaan tässä yhteydessä huomattavasti spesifiempää toimitusta kuin pelkästään yhtälön matemaattisten ratkaisujen määrittämistä. Se merkitsee, että on etsittävä ne arvot a , joilla tällä yhtälöllä on aaltofunktioksi kelpaavia ratkaisuja. Nämä ovat suureen ominaisarvot, ja näitä arvoja vastaavat aaltofunktoratkaisut ovat suureen ominaistiloja. (Lukijan on syytä tarkastella esimerkkeinä paikan ja impulssin ominaisarvoyhtälöitä ja varmistautua siitä, että niiden ratkaisut vastaavat sitä mitä aikaisemmin on niiden ominaisarvoista ja -tiloista todettu.)

Tehtyjen oletusten vuoksi esitettyä johtoa ei voida pitää varsinaisena todistuksena sille, että suureen ominaisarvojen ja -tilojen etsiminen johtaa ominaisarvoyhtälöön. Ominaisarvoyhtälön tämä merkitys on paremminkin kvanttimekaniikan itsenäinen postulaatti. Sen mielekkyys perustuu suuremäärin hermiittisten operaattoreiden ominaisarvojen teorian rakenteeseen. Koska tämän välitöntä näkemistä ei tässä yhteydessä voida edellyttää, on tässä pyritty esittämään senlaatuinen johto, joka valaisisi eräiden olennaisten kysymysten välisiä yhteyksiä ja siten mahdollisesti auttaisi paremmin ymmärtämään teorian fysikaalista motiivointia.

Joka tapauksessa siis kvanttimekaniikassa ominaisarvoyhtälö antaa ominaisarvoprobleeman ratkaisun systeemin mielivaltaiselle fysikaaliselle suurelle A . Erityisesti kokonaisenergian ominaisarvot ja ominaistilat saadaan kokonaisenergian ominaisarvoyhtälöstä

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad \text{eli} \quad \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi & \text{1-dim} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\psi + V(\mathbf{r})\psi = E\psi & \text{3-dim} \end{cases} \quad (44)$$

jota kutsutaan ajasta riippumattomaksi Schrödingerin yhtälöksi. Sen ratkaisujen tulisi selittää atomaaristen, systeemien (tässä tapauksessa vasta yhden hiukkasen systeemin) kokonaisenergian kvantittuminen.

Jos aaltofunktiot ψ_j ovat samaan ominaisarvoon a kuuluvia A :n ominaistiloja, on niiden mielivaltainen lineaarikombinaatio $\psi = \sum_j c_j \psi_j$ myös ominaisarvoon a kuuluva A :n ominaistila. Sillä

\hat{A} :n lineaarisuuden perusteella on

$$\hat{A}\psi = \sum_j c_j \hat{A}\psi_j = a \sum_j c_j \psi_j = a\psi.$$

Muista ratkaisuista lineaarisesti riippuvaa ratkaisua *ei* sen johdosta pidetä eri ratkaisuna. Jos ominaisarvoon a kuuluu n eri ratkaisua on a n -kertainen ominaisarvo. Jos $n > 1$, a on degeneroitunut. Lukija voi todeta esimerkkinä, että paikan ja impulssin ominaisarvot ovat yksinkertaisia, liikeenergian ominaisarvot T ovat yhdessä dimensiassa kaksinkertaisia ja useammassa dimensiassa ∞ -kertaisia paitsi $T = 0$, joka on aina yksinkertainen.

Todennäköisyyksien $P\{A = a \mid \psi\}$ määrittäminen.

Suuretta A vastaava ominaisarvoyhtälö on kvanttimekaniikan vastaus ensimmäiseen s.22 esitettyyn peruskysymykseen. Jälkimmäiseen kysymykseen on tähän mennessä vastattu vain paikan ja impulssin suhteen tai yleisemmin vain paikasta tai impulssista riippuvien suureiden suhteen. Yleisempi vastaus perustuu hermiittisten operaattoreiden ominaisuuksiin, joista tässä yhteydessä olen-

* Kirjoitettu ja monistettu ensimmäisen kerran kevään 1971 kurssille

naisia ovat

1. Ominaisarvojen reaalisuus
2. Eri ominaisarvoihin kuuluvien ominaisfunktioiden ortogonaalisuus.
3. Ominaisfunktioiden joukon täydellisyys.

Kaksi ensimmäistä voidaan helposti osoittaa.

Todistus 1. Oletetaan, että \hat{A} on lineaarinen (40) ja hermiittinen (41) ja että ψ on normittuva ($\int \psi^* \psi d^3r$ äärellinen) A :n ominaisarvoon a kuuluva ominaisfunktio.

Hermiittisyyden perusteella on $\int \psi^* \hat{A} \psi d^3r = \int (\hat{A} \psi)^* \psi d^3r$. Olettamuksen mukaan on $\hat{A} \psi = a \psi$, joten tämä yhtälö voidaan kirjoittaa $a \int \psi^* \psi d^3r = a^* \int \psi^* \psi d^3r \Rightarrow a = a^*$ eli a on reaalinen.

Ominaisarvojen reaalisuus on luonnollisesti välttämätöntä, jotta olisi mielekästä tulkita hermiittisten operaattoreiden ominaisarvot fyysikaalisten suureiden mahdollisiksi arvoiksi.

Todistus 2. Olkoon jälleen \hat{A} lineaarinen ja hermiittinen sekä ψ_1 ja ψ_2 sen kahteen eri ominaisarvoon a_1 ja a_2 kuuluvia ominaisfunktioita.

Hermiittisyyden perusteella on nyt $\int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 d^3r = \int (\hat{A} \psi_1)^* \psi_2 d^3r$ eli oletuksen ja edellisen todistuksen mukaan $a_2 \int \psi_1^* \psi_2 d^3r = a_1 \int \psi_1^* \psi_2 d^3r$, josta $(a_2 - a_1) \int \psi_1^* \psi_2 d^3r = 0$. Koska $a_2 \neq a_1$, tämä merkitsee

$$\int \psi_1^* \psi_2 d^3r = 0. \quad (45)$$

Yhtälö (45) määrittelee funktioiden ψ_1 ja ψ_2 ortogonaalisuuden.

Näissä todistuksissa käytetty integraalimerkintä on käsitettävä integroinniksi kaikkien systeemin koordinaattien suhteen niiden kaikkien mahdollisten arvojen yli (yli koko käytettävissä olevan avaruuden).

Jos A :n kaikki ominaisarvot ovat degeneroitumattomia, on toinen ominaisuus täysin todistettu. Degeneroituneisiin ominaisarvoihin nähden on todettava, että niihin kuuluvat eri ratkaisut voidaan aina valita ortogonaalisiksi. Jos esimerkiksi ψ_1 ja ψ_2 kuuluvat samaan ominaisarvoon, mutta eivät ole ortogonaaliset voidaan niiden tilalle valita esim. ψ_1 ja $\psi_3 = \psi_2 - C\psi_1$, missä C on valittu siten,

$$\text{että } \int \psi_1^* \psi_3 d^3r = 0 \text{ eli } C = \frac{\int \psi_1^* \psi_2 d^3r}{\int \psi_1^* \psi_1 d^3r}.$$

Ominaisfunktioiden joukon täydellisyydellä tarkoitetaan,

että mielivaltainen aaltofunktio ψ voidaan lausua suuren A ominaistilojen kehittelmänä

$$\psi = \sum_j c_j \psi_j. \quad (46)$$

Eräisiin suureisiin nähden tämä voidaan todistaa verrattain helposti. Yleisesti sitä on pidettävä yhtenä kvanttimekaniikan postulaattina.

Jos funktiot ovat ortogonaalisia ja normitettuja, saadaan kertoimille c_i lauseke

$$\int \psi_i^* \psi d^3r = \sum_j c_j \int \psi_i^* \psi_j d^3r = c_i. \quad (47)$$

Tilan normitusintegraalille saadaan samoin

$$\int \psi^* \psi d^3r = \sum_{ij} c_i^* c_j \int \psi_i^* \psi_j d^3r = \sum_j |c_j|^2. \quad (48)$$

Yhtälöt (47) ja (48) antavat aiheen tulkita kehittelmän (46) tilan (vektorin) komponenttiesitykseksi koordinaatistossa, jonka muodostavat ortogonaaliset yksikkötilat (yksikkövektorit) ψ_j . Tällöin (47) esittää tilojen ψ_i ja ψ skalaarituloa eli c_j on tilan ψ komponentti ψ_j :n suunnassa. Normitusintegraali (48) voidaan vastaavasti käsittää tilan (vektorin) ψ normin neliöksi, jolloin yhtälö (48) on

Pythagoraan teoreeman yleistys.

Tämä konkretisointi (ψ :n kuvi ttelemineen vektoriksi) ehkä auttaa ymmärtämään, että ortogonaaliset tilat ovat tietyssä mielessä täysin erillisiä tiloja. On hyvin luontevaa ajatella, että "suunta.", jota "yksikkövektori" ψ_j edustaa, merkitsee suureen A arvoa a_j siten, että vain sellaisissa tiloissa ψ , joilla on nollasta eroava komponentti (c_j) tässä suunnassa, tämä suureen A arvo on edustettuna tietyllä todennäköisyydellä. Tilassa ψ , joka on kohtisuorassa kaikkia A :n arvoon a_j kuuluvia ominais-tiloja ψ_j vastaan, ei tämä A :n arvo lainkaan esiinny.

Kvanttimekaniikan yleinen todennäköisyystulkinta lausuu juuri tämän. Sen mukaan

$$\begin{cases} P\{A = a_j | \psi\} = |c_j|^2, & \text{jos } a_j \text{ on degeneroitumaton} \\ P\{A = a | \psi\} = \sum_{a_j=a} |c_j|^2, & \text{jos } a_j \text{ on degeneroitunut.} \end{cases} \quad (49)$$

Yleisesti tässä on kysymys suhteellisista todennäköisyyksistä. Yhtälöstä (48) nähdään, että varman tapahtuman (A :lla on tilassa ψ jokin arvo) suhteellinen todennäköisyys on sama kuin tilan normitusintegraali, joten, jos tila ψ on normitettu, (49) ilmaisee absoluuttisen todennäköisyyden.

Esitetyssä muodossa tämä yleinen formalismi soveltuu vain suureisiin, joilla on täysin diskreetti (erillisistä arvoista koostuva) ominaisarvospektri, sillä vain tällaisissa tapauksissa on olemassa täydellinen joukko normittuvia ominaistiloja. Formalismia voidaan yleistää ja sitä on pakkokin yleistää jo esim. paikan ja impulssin kohdalla. Tällöin summa (46) joudutaan korvaamaan integraalilla (mahdollisesti vain osittain). Esim. impulssin tapauksessa yhtälö (21) on suoraan lauseketta (46) vastaava tilan lauseke ominaisfunktioiden kehittämänä. Yhtälö (22) vastaa täysin kertoimien lauseketta (47). Jos yhtälössä (24) asetetaan $\psi_2 = \psi_1$, se vastaa täysin yhtälöä (48). Yhtälöstä (24) voidaan myös lukea suoraan se edellä esitetyn mukainen toteamus, että myös impulssista puhuttaessa tilat ovat ortogonaalisia, jos niissä ei esiinny yhteisiä mahdollisia impulssin arvoja.

Impulssimomentti L_z

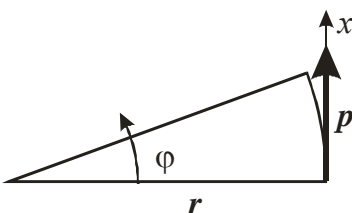
Tarkastellaan ensin systeemiä, jonka ainoa vapausaste on kierto z -akselin ympäri. Sillä on yksi ainoa koordinaatti, kiertokulma φ , jota vastaava impulssi on impulssimomentti L_z . Klassisesta fysiikasta tunnetun, suureparien (x, p) ja (φ, L_z) täydellisen analogian avulla voidaan päätellä seuraavasti:

Tilaa, jossa impulssin p arvo on täysin määrätty, oli de Broglien ensimmäisen ehdon mukaan esitetävä aaltofunktiolla $\psi_p = \exp(ipx/\hbar)$.

Tämä systeemin tila on täysin homogeeninen yli koko avaruuden (x -akselin). Erityisesti on koordinaatin x todennäköisyysjakautuma vakio $|\psi_p|^2 = 1$, eli se saa samalla todennäköisyydellä mikä tahansa arvon väliltä $-\infty < x < \infty$. Tarkemmin sanottuna tämä tila on translaatioinvariantti: mielivaltaisessa siirroksessa $x \rightarrow x - x_0$, se tulee vain kerrotuksi vakiolla eli pysyy samana tilana.

Suureen L_z ominaistiloilla ψ_{L_z} on ilmeisestikin oltava vastaavat ominaisuudet. Koordinaatin φ todennäköisyysjakautuman tulee olla vakio $|\psi(\varphi)|^2 = \text{vakio}$. Tarkemmin sanoen tilan tulee olla kiertoinvariantti, kierrossa $\varphi \rightarrow \varphi - \varphi_0$ se ei saa muuttua toiseksi tilaksi eli se saa tulla enintään kerrotuksi vakiolla. Tällä perusteella saamme suureen L_z ominaisfunktiolle yleisen muodon $\psi_{L_z} = \exp(i\lambda\varphi)$.

Vaadimme kuitenkin, että aaltofunktion tulee olla yksikäsitteinen koordinaattien funktio. Tässä tapauksessa siis $\psi(\varphi+2\pi) = \psi(\varphi)$. Tämä merkitsee, että parametrin λ on oltava kokonaisluku. Siten siis vain funktiot $\psi_n = \exp(in\varphi)$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ voivat tulla kysymykseen suureen L_z ominaistiloina.



Jos ajatellaan, että kyseessä on ympyräradalla kiertävä hiukkanen, voidaan tilannetta paikallisesti approksimoida impulssin ominaistilalla $\exp(ipx/h)$. Suureiden välinen klassinen yhteys osoittaa, että tällöin on oltava $p_x = L_z\varphi$, joten tilassa ψ_n suureen L_z arvo ilmeisestikin on $n\hbar$.

* Kirjoitettu ja monistettu ensimmäisen kerran kevään 1971 kurssille

Systeemin mielivaltainen aaltofunktio $\psi(\varphi)$ on luonnollisesti tulkittava koordinaatin φ suhteelliseksi todennäköisyysamplitudiksi, jolloin siis suhteellinen todennäköisyys

$$P\{\varphi_1 \leq \varphi \leq \varphi_2\} = \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} |\psi|^2 d\varphi. \quad (50)$$

Koska koko käytettävissä oleva avaruus on nyt alue $0 < \varphi \leq 2\pi$, edellyttää absoluuttisten todennäköisyyksien lausuminen yhtälön (50) muodossa normitusta

$$\int_0^{2\pi} |\psi|^2 d\varphi = 1. \quad (51)$$

Kaikkiaan saadaan näin suureen L_z normitetuiksi ominaisfunktioiksi ja ominaisarvoiksi

$$\psi_n(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi} \Leftrightarrow L_z = n\hbar; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (52)$$

Voidaan välittömästi todeta, että nämä ovat myös ortogonaalisia

$$\int_0^{2\pi} \psi_m^* \psi_n d\varphi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(n-m)\varphi} d\varphi = \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases}. \quad (53)$$

Fourier-sarjojen teorian mukaan mielivaltainen aaltofunktio $\psi(\varphi)$ voidaan lausua muodossa

$$\psi = \sum_{-\infty}^{\infty} c_n \psi_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{-\infty}^{\infty} c_n e^{in\varphi}; \quad c_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} \psi(\varphi) e^{-in\varphi} d\varphi. \quad (54)$$

Tämä matemaattinen tulos vastaa täysin yleisiä yhtälöitä (46) ja (47) ja osoittaa tässä tapauksessa ominaisfunktioiden joukon täydellisyyden. Tämä on kvanttimekaniikan ehkä yksinkertaisin esimerkki yleisen formalismin mukaisesta tilan jakamisesta tietyn suureen eri arvoja vastaaviksi komponenteiksi. Yleisen formalismin mukaisesti on siis normitetussa tilassa $\psi(\varphi)$

$$P\{L_z = n\hbar | \psi\} = |c_n|^2, \quad (55)$$

missä c_n on jälkimmäisen yhtälön (54) mukainen.

Tästä seuraa odotusarvolle $\langle L_z \rangle$ lauseke

$$\langle L_z \rangle = \sum_n n\hbar |c_n|^2 = \sum_n c_n^* n\hbar c_n, \quad (56)$$

joka edelleen on kirjoitettavissa muotoon

$$\langle L_z \rangle = \int_0^{2\pi} \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{d\varphi} d\varphi. \quad (57)$$

(vrt. vastaava impulssin yhteydessä esitetty tarkastelu).

Tällä tavoin voidaan osoittaa, että suuretta L_z vastaa operaattori

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\varphi}. \quad (58)$$

Tämän olisi luonnollisesti voinut päätellä analogian $x, p \Leftrightarrow \varphi, L_z$ perusteellakin. Lukijan on syytä todeta, että nytkin operaattoria käyttäen kirjoitettu ominaisarvoyhtälö antaa ominaisarvot ja -tilat (52), jotka oli muulla tavalla päätelty.

Tämä tarkastelu ei ole millään tavalla siitä riippuvainen, onko \sim systeemin ainoa koordinaatti vai eikö. Siksi tuloksia voidaan välittömästi soveltaa myös kolmiulotteiseen yhden hiukkasen probleemaan, jossa r, θ, φ määrittelevät hiukkasen paikan pallokoordinaateissa. Tällöin operaattorin lausekkeessa (58) on tietenkin käytettävä osittaisderivointia. Yhteys suorakulmaisiin koordinaatteihin x, y, z antaa nyt mahdollisuuden kirjoittaa myös

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x. \quad (59)$$

joka osoittaa, että korvauseriaate (38) pätee myös tässä tapauksessa (lukija todetkoon yhtälön (59) oikeaksi).

Tilan riippuvuus ajasta

Samastus $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ johti edellä toteamukseen, että tilaa, jossa impulssin arvo on määrätty, tulee kuvata aallolla, jonka aaltoluku \mathbf{k} on määrätty. Tämä tarkastelu ja koko siitä kehitetty edellä oleva käsittely on ajasta täysin riippumaton vastaten tilannetta kiinteällä ajan hetkellä.

Täysin vastaavalla tavalla voidaan todeta samastuksen $E = \hbar \omega$ perusteella, että tilaa, jossa systeemin kokonaisenergia E on määrätty tulee kuvata aallolla, jonka värähtelyn kulmataajuus mielivaltaisessa kiinteässä pisteessä on $\omega = E/\hbar$, ts. aaltofunktiolla, jonka aikariippuvuus on muotoa $\exp(-i\omega t)$. Toisaalta edellä suoritettu ajasta riippumaton tarkastelu osoitti, että tietyille systeemille sen kokonaisenergian ominaisarvoyhtälö (44) määrää hetkellisen muodon puolesta kaikki ne aaltofunktiot $\psi_j(\mathbf{r})$, joita vastaavissa tiloissa systeemin kokonaisenergialla on määrätty arvo, sekä vastaavat mahdolliset energian arvot E_j . Tällä tavoin on siis tietyn systeemin energian ominaistiloja kuvaamaan valittavien aaltofunktioiden sekä paikallinen että ajallinen käyttäytyminen määrätty

$$\Psi_j(\mathbf{r}, t) = \psi_j(\mathbf{r}) e^{-iE_j t/\hbar} \quad (60)$$

niin pian kuin systeemin ajasta riippumattoman Schrödingerin yhtälön (44) ratkaisut $\psi_j(\mathbf{r})$, E_j tunnetaan.

Jo aikaisemmin on todettu, että de Broglien aaltojen ja siis myös aaltofunktioiden voidaan olettaa noudattavan lineaarista superpositiota. Tämä merkitsee, että aaltofunktio, joka on 0-hetkellä muotoa

$$\psi_j(\mathbf{r}, 0) = \sum_j c_j \psi_j(\mathbf{r}), \quad (61)$$

käyttäytyy ikäänkuin sen jokainen osa-aalto olisi muista riippumaton, ts.

$$\psi_j(\mathbf{r}, t) = \sum_j c_j \psi_j(\mathbf{r}) e^{-iE_j t/\hbar} \quad (62)$$

Tämä toteamus oikeastaan ratkaisee koko aikariippuvuusongelman, sillä yleisen formalismin perusteella, vertaa (46), (47), mielivaltainen alkutila $\psi(\mathbf{r})$ voidaan lausua muodossa (61).

Tällä tavoin voidaan määrittää systeemin tila hetkellä t , kun se tunnetaan alkuhetkellä $t = 0$. Huomattakoon, että yleisen formalismin edellyttämällä tavalla summat (61) ja (62) on tarvittaessa käsiteltävä integraaleiksi. Esimerkiksi voidaan todeta, että aaltofunktion Fourier-integraaliesitys (21) voidaan käsitellä vapaata hiukkasesta vastaavaksi kehitelmäksi (61) koska impulssin ominaistilat ovat samalla liike-energian ja vapaan hiukkasen kokonaisenergian ominaistiloja. (Lukijan on syytä selvittää itselleen, miten tämän perusteella vapaan hiukkasen tilan aikariippuvuus määräytyy.)

Voidaan todeta, että lauseke (62) on yhtälön

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad 63$$

yleinen ratkaisu. Sijoittamalla on helppo nähdä, että (62) toteuttaa tämän. Toisaalta siitä, että tämä lauseke voidaan saattaa alkuhetkellä yhtymään mielivaltaiseen alkutilaan, seuraa ratkaisun yleisyys tämän muotoiselle (ajan suhteen ensimmäistä kertalukua) yhtälölle. Yhtälö (63) määrittelee siis yksikäsitteisesti annetun systeemin mielivaltaisen tilan aikariippuvuuden, joten se on systeemin kvanttimekaaninen liikeyhtälö. Sitä kutsutaan myös ajasta riippuvaksi Schrödingerin yhtälöksi.

Koska systeemin perusmäärittely, kuten luvussa 4 esitettiin, on klassisessa ja kvanttimekaanisessa käsittelyssä sama, on mahdollista puhua saman systeemin klassisesta ja kvanttimekaanisesta tilasta ja verrata niiden käyttäytymistä toisiinsa. Tässä yhteydessä vain todettakoon lopuksi ilman todistusta, että yhtälöstä (63) seuraa ns. Ehrenfestin teoreema, jonka mukaan odotusarvot $\langle \mathbf{r} \rangle$ ja $\langle \mathbf{p} \rangle$ tilassa $\psi(\mathbf{r}, t)$ käyttäytyvät kuten \mathbf{r} ja \mathbf{p} käyttäytyvät klassisessa teoriassa. Siten klassinen teoria voidaan käsittää tietyksi kvanttimekaniikan rajatapaukseksi.