

Contents

1	Johdanto: Klassisesta maailmankuvasta kohti nykyaikaista	3
1.1	Mustan kappaleen säteily	4
1.2	Viivaspektrit	8
2	Aaltoilmiöiden ominaisuuksia	18
2.1	Aaltopakettit ja ryhmänopeus	20
3	Valo aaltolina ja hiukkasina	23
3.1	Valon hiukkasluonne	23
3.2	Valon aaltoluonne	23
3.3	Fotonin jaettavuus	24
3.4	Todennäköisyystulkinta	26
4	Materiaalisten hiukkasten aaltoluonne	27
4.1	De Broglie'n aineaallot (1924)	27
4.2	Todennäköisyystulkinta	30
4.3	Mittauksen vaikutus liiketilaan	31
4.4	Hiukkasen paikallistaminen ja Heisenbergin epätarkkuusperiaate	33
5	Schrödingerin yhtälö	36
5.1	Ajasta riippuva Schrödingerin yhtälö (v. 1926)	36
5.2	Ajasta riippumaton Schrödingerin yhtälö	38
5.3	Aaltofunktion fysikaalinen tulkinta ja jatkuvuusyhtälö	39
6	Dynaamisten muuttujien esitys kvanttimekaniikassa	41
6.1	Dynaamisten muuttujien odotusarvot	41
6.2	Operaattoreista	41
6.3	Dynaamiset muuttujat operaattoreina	44
7	Schrödingerin yhtälön ratkaiseminen	46
7.1	Äärettömän syvä potentiaali	46
7.2	Porraspotentiaali	48
7.3	Harmoninen oskillaattori	52
7.4	Liike keskeisvoimakentässä	54
8	Spin ja statistiikka	60
8.1	Bosonit ja fermionit	60
8.2	Degeneroitunut fermikaasu	62
8.3	Alkuaineiden jaksollinen järjestelmä	64
9	Ydinfysiikkaa	68
9.1	Ytimen rakenneosat ja yleiset ominaisuudet	68
9.2	Radioaktiivinen hajoaminen ja ydinreaktiot	70
9.3	Ydinvoimista	73

10 Hiukkasfysiikkaa	77
10.1 Perusvuorovaikutukset	77
10.2 Hiukkasten luokitteluun käytettävät parametrit	80
10.3 Säilymislait	82
10.4 Säilymislait ja avaruuden symmetriat	85
10.5 Hiukkaskiihdyttimistä	87
10.6 Kvarckimalli	90
10.7 Vuorovaikutusten yhtenäistäminen	94

1 Johdanto: Klassisesta maailmankuvasta kohti nykyaikaista

Vuosisadan vaihteessa fysiikka näytti loppuun tutkitulta: kaikkien fysikaalisten ilmiöiden kvantitatiivisten ilmiöiden uskottiin edellyttävän vain peruslakien tarkkaa, suoraviivaista soveltamista.

- Termiset, optiset, akustiset, sähköiset, magneettiset ja kemialliset ilmiöt ymmärrettiin *aineellisten hiukkasten ja niiden välisten kenttien liikeilmiöinä*, joita hallitsevat *Newtonin mekaniikan ja gravitaation sekä Maxwellin sähködynamiikan peruslait*.
- Maxwellin ja Boltzmannin esittämät *tilastolliset menetelmät* mahdollistivat suurten hiukkassysteemien käsittelyn aineen makroskooppisten ominaisuuksien ymmärtämiseksi.

1800 luvun lopussa

- tunnettiin aineen atomi- ja molekyyli rakenne.
- tunnettiin
 - katodisäteet
 - α - ja β -säteily (varauksellisia hiukkasia).
 - γ -säteily (sähkömagneettista säteilyä).
 - röntgensäteily
- aineen silloiset rakenneosat
 - elektronit
 - ionisoituneet atomit
- energian siirtyminen voi tapahtua joko hiukkasten mukana tai kentässä etenevän aaltoliikkeen kuljettamana.

Ilmeni uusia ongelmia:

- aineen termiset ominaisuudet matalissa lämpötiloissa.
- metallien sähkönjohtavuus.
- valon viivaspektriä ei ymmärretty.
- lämpösäteily.
- valosähköinen ilmiö.
- Comptonin sironta.
- elektronisuihkun diffraktio.
- radioaktiivisen säteilyn energiamäärä.
- Rutherfordin sirontakoe (atomien ja molekyylien rakenne).

1.1 Mustan kappaleen säteily

Tarkasteellaan onteloa,

- jonka sisällä oleva säteily on termisessä tasapainossa ontelon seinämien kanssa.
- jonka seinämässä olevasta pienestä aukosta säteily pääsee ulos:
 - säteilyssä esiintyvät kaikki taajuuudet $[0, \infty]$.
 - säteilyn intensiteettijakautuma I_ν on tilavuusyksikön suuruisesta ontelosta emittoituva säteilyenergia taajuusyksikköä kohden:

$$I_\nu = \frac{dU}{d\nu},$$

joten tilavuusyksikön suuruisen ontelon säteilemä energia on

$$U = \int_0^\infty I_\nu d\nu.$$

Tiedetään, että mustan kappaleen säteilyn intensiteettijakautuma

- riippuu seinämien lämpötilasta: $I_\nu(T)$.
- ei riipu seinämien paksuudesta, koosta eikä muodosta.

I_ν tunnettiin kokeellisesti viime vuosisadan lopulla suhteellisen hyvin lämpötiloissa 250–1200K.

Teoreettisin laskelmin oli päädytty *Rayleigh-Jeansin lakiin*, joka ei kuitenkaan pystynyt selittämään koetuloksia koko taajuusalueella.

Rayleigh-Jeansin laki

$$I_\nu = \frac{8\pi kT}{c^3} \nu^2 \xrightarrow{\nu \rightarrow \infty} \infty.$$

(k = Boltzmannin vakio = $1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K)

Tämä laki johtaa n.s. *ultraviolettikatastrofin*.

Wienin säteilylaki

$$I_\nu = C \nu^3 e^{-\beta\nu/T},$$

missä C ja β ovat sovitettavia vakioita.

Tämä on empiirinen lauseke, joka osoittautui virheelliseksi ν :n pienillä arvoilla.

Planckin laki

Lokakuussa 1900 Planck ”arvasi” lain, joka interpoloi alhaisen (R-L) ja korkean (W) taajuusalueen:

$$I_\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

Tässä $h = 6.6262 \cdot 10^{-34} \text{Js}$ = Planckin vakio.

Jo 14.12.1900 Planck pystyi esittämään Berliinissä Deutsche Physikalische Gesellschaftin kokouksessa lakinsa johdon.

Säteilylakien johto

Ontelossa oleva säteily

- voidaan kuvata sähkömagneettisen kentän seisovina aaltoina.
- on termisessä tasapainossa lämpötilassa T olevien seinämien kanssa.
- heijastuu ontelon seinämistä, koska seinämien atomit absorboivat ja nopeasti emittoivat säteilyä värähdellen itse säteilyn frekvenssillä.

Seinämissä

- värähtelevän atomin keskimääräinen kineettinen energia lämpötilassa T on $\frac{1}{2}kT$.
- approksimoidaan värähteleviä atomeja harmonisina oskillaattoreina. Silloin keskimääräinen kineettinen energia on sama kuin keskimääräinen potentiaalienergia, joten frekvenssillä ν värähtelevän atomin keskimääräinen energia $\overline{E}_\nu(T)$ on

$$\overline{E}_\nu(T) = \langle E \rangle = kT.$$

Säteilyn intensiteetti on klassisen elektrodynamiikan mukaan

$$I_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \overline{E}_\nu(T).$$

Tilastollisen fysiikan mukaan (Boltzmannin jakautuma) on todennäköisyys sille, että harmonisella oskillaattorilla on energia E lämpötilassa T , verrannollinen lausekkeeseen

$$e^{-E/kT} = e^{-\beta E}, \quad \beta = \frac{1}{kT}.$$

Rayleigh-Jeansin laki

Jos värähtelijän energialla voi olla kaikki mahdolliset arvot välillä $[0, \infty]$, on keskimääräinen energia

$$\begin{aligned} \overline{E}_\nu(T) &= \frac{\int_0^\infty E e^{-\beta E} dE}{\int_0^\infty e^{-\beta E} dE} \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int_0^\infty e^{-\beta E} dE \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int_0^\infty -\frac{1}{\beta} e^{-\beta E} \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \frac{1}{\beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \beta \\ &= \frac{1}{\beta} = kT. \end{aligned}$$

Intensiteetiksi saadaan

$$I_\nu(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT.$$

Planckin kvanttihypoteesi

Harmonioiden värähtelijä, jonka frekvenssi on ν , voi emittoida tai absorboida energiaa vain energiakvantteina:

$$E_n = n\epsilon, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots,$$

missä $\epsilon = h\nu$ ja n on kvanttien lukumäärä.

Keskimääräinen energia on nyt

$$\begin{aligned} \bar{E}_\nu(T) &= \frac{\sum_n E_n e^{-E_n/kT}}{\sum_n e^{-E_n/kT}} = \frac{\sum_n n\epsilon e^{-n\beta\epsilon}}{\sum_n e^{-n\beta\epsilon}} \\ &= -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta\epsilon} \right] = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \left[\sum_{n=0}^{\infty} (e^{-\beta\epsilon})^n \right] \\ &= -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \frac{1}{1 - e^{-\beta\epsilon}} = \frac{\partial}{\partial\beta} \ln(1 - e^{-\beta\epsilon}) \\ &= \frac{-\epsilon(-e^{-\beta\epsilon})}{1 - e^{-\beta\epsilon}} = h\nu \frac{1}{e^{\beta\epsilon} - 1}, \end{aligned}$$

jolloin intensiteetiksi saadaan

$$I_\nu(T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

Mustan kappaleen säteilyn energia tilavuusyksikköä kohden

$$U(T) = \int_0^\infty I_\nu(T) d\nu = aT^4,$$

missä $a = 7.56 \cdot 10^{-16} \frac{\text{J}}{\text{m}^3\text{K}^4}$.

Säteilyn kokonaisintensiteetti (emissioteho) on

$$I(T) = \frac{cU(T)}{4} = \sigma T^4,$$

missä $\sigma = 5.42 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{K}^4}$ on Stefan-Boltzmannin vakio.

Tähtien säteily on approksimatiivisesti mustan kappaleen säteilyä.

Esim. Auringon pintalämpötila

- Auringon säde $R_\odot = 0.7 \cdot 10^9 \text{m}$
- Auringon etäisyys $S = 1.5 \cdot 10^{11} \text{m}$.
- Aurinkovakio (neliömetrille sekunnissa tuleva säteily) on $1.36 \cdot 10^3 \frac{\text{W}}{\text{m}^2}$.

Auringon emittoima säteily/s on

$$4\pi R_{\odot}^2 I(T) = 4\pi R_{\odot}^2 \sigma T^4 = 3.34 \cdot 10^{11} T^4 \frac{\text{W}}{\text{K}^4}.$$

Maan pinnalle neliömetrille sekunnissa tuleva säteily on

$$\frac{4\pi R_{\odot}^2 I(T)}{4\pi S^2} = 0.96 \cdot 10^{-12} T^4 \frac{\text{W}}{\text{m}^2} = 1.36 \cdot 10^3 \frac{\text{W}}{\text{m}^2},$$

joten

$$T \approx 6000\text{K}.$$

Valosähköinen ilmiö

Kokeellisesti on todettu, että valo irrottaa puhtaalta metallipinnalta elektroneja, joiden energia

- ei riipu intensiteetistä I_{ν} . (Fotoelektronien lukumäärä riippuu intensiteetistä)
- riippuu lineaarisesti valon frekvenssistä ν .

Klassisen sähkömagnetismin mukaan elektronien kineettisen energian

- tulisi olla verrannollinen valolähteen intensiteettiin.
- ei pitäisi riippua lainkaan valon frekvenssistä.

Einsteinin fotoniteoria

Tuleva säteily koostuu valokvanteista eli fotoneista. Fotonin energia on $h\nu$.

Perusprosessissa yksityinen elektroni absorboi energiakvantin $h\nu$.

Jotta elektroni vapautuisi metallista, on tehtävä (aineesta riippuva) minimityö W metallin positiivisten ionien vetovoiman voittamiseksi. Vapautuneiden elektronien maksimi kineettinen energia on silloin

$$K_{\max} = h\nu - W = h(\nu - \nu_0).$$

Kokeessa annetaan irronneiden elektronien kulkea sähköisen potentiaalin V läpi, t.s. niiden menettämä energia on eV . Kun potentiaali asetetaan kynnysarvoonsa V_0 , t.s. $K_{\max} = eV_0$, voidaan määrätä Planckin vakion arvo (edellyttäen, että W tunnetaan):

$$h = \frac{eV_0 + W}{\nu} = \frac{\lambda}{c}(eV_0 + W).$$

Comptonin ilmiö

Comptonin ilmiö (1919–1923) osoittaa, että törmäysprosessissa fotonit käyttäytyvät kuten yksittäiset hiukkaset:

- energia $E = h\nu$
- massa $m = h\nu/c^2$
- liikemäärä $p = mc = E/c = h\nu/c = h/\lambda$

Fotonin törmätessä elektroniin sen aallonpituus muuttuu:

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta).$$

1.2 Viivaspektrit

Jokainen alkuaine säteilee sille tunnusomaisilla diskreeteillä aallonpituuksilla. Spektrit antavat tietoa niitä tuottavista atomeista.

- Aallonpituuden suhteen spektrit ovat monimutkaisia ja vailla säännönmukaisuuksia.
- *Aaltoluvun* $1/\lambda$ suhteen spektrit sitävastoin käyttäytyvät säännönmukaisemmin.
- Aaltoluku havaittiin (Balmer 1885) hyväksi luokittelusuureeksi.
- Useat spektriviivoja vastaavat aaltoluvut voidaan esittää toistensa summina tai erotuksina (Rydberg-Ritz kombinaatioperiaate: 1900, 1908).

Balmer havaitsi, että eräät vedyn spektriviivoista voidaan sovittaa lausekkeeseen

$$\lambda_n = 3646 \frac{n^2}{n^2 - 4} \text{Å}, \quad n = 3, 4, 5, \dots,$$

eli

$$\frac{1}{\lambda_n} = R_H \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right), \quad R_H = 1.097 \cdot 10^7 \text{m}^{-1}.$$

Spektriviivojen säännönmukaisuus frekvenssin $\nu = c/\lambda$ suhteen voidaan ymmärtää kvanttihypoteesin avulla:

- säteily tapahtuu energiakvantteina $h\nu$.
- säteillessään atomi luovuttaa energiaa fotonille. Jos atomin energia ennen emissiota on E_i ja emission jälkeen E_f , niin

$$h\nu = E_i - E_f.$$

Lauseke $h\nu = E_i - E_f$ voidaan tulkita myös kääntäen:

Viivaspektrien havaitseminen osoittaa, että atomi voi olla vain eräissä sille tyypillisissä diskreeteissä energiatiloissa.

Thompsonin atomimalli

Atomin massa ja positiivinen varaus ovat tasaisesti jakautuneina palloon, jossa elektronit ovat levossa (muuten ne säteelisivät energiaa).

Rutherfordin atomimalli (1911)

Rutherford tutki α -hiukkasten (kahdesti ionisoituneiden helium-atomien) sirontaa ohuista kultalevyistä:

- suurkulmasirontaa oli huomattavasti enemmän, kuin Thompsonin malli ennusti.
- esim. Thompsonin mallin mukainen todennäköisyys 90° -sirontaan on 10^{-3500} , kokeellisesti se oli $1/8000$.

Selitys: Atomin massa ja positiivinen varaus ovat atomia paljon pienemmässä ytimessä.

Myöhemmät mittaukset ovat osoittaneet, että ytimen säde r on

$$r = r_0 A^{1/3}, \quad r_0 = 1.2 \cdot 10^{-15} \text{ m.}$$

Atomin säde R on suuruusluokkaa

$$R \approx 10^{-10} \text{ m.}$$

Rutherfordin atomimallin heikkouksia:

- Ei ennusta viivaspektriä.
- Ei selitä, miksi tietyn alkuaineen kaikki atomit ovat samanlaisia.
- On epästabiili. Koska atomin elektronit ovat kiihtyvässä liikkeessä, niiden tulisi klassisen fysiikan mukaan säteillä energiaansa ja spiraalirataa seuraten törmätä lopulta ytimeen.

Bohrin atomimalli (1913)

Lähtökohdat

- Rutherfordin atomimalli ja sen epästabiilisuus.
- Viivaspektrenä ilmenevä atomin energiatilojen diskreettisyys.
- Planckin kvanttihypoteesi ja Einsteinin fotoniteoria.
- Klassinen fysiikka.

Oletukset

1. Atomin elektronit voivat liikkua vain määrättyjä ratoja pitkin säteilemättä energiaa. Atomin energian eri arvot vastaavat elektronien erilaisia sijoittumisia sallituille radoille.

2. Sallitut radat ovat klassisen dynamiikan liikelain $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ ja impulssimomentin kvanttiehdon

$$L = n\hbar = \frac{nh}{2\pi}$$

määrittämät.

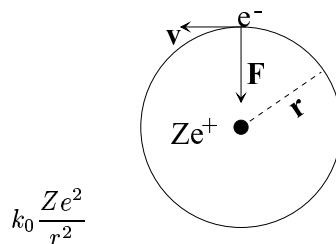
3. Atomi voi siirtyä sallitulta (stationääriseltä) radalta toiselle emittoimalla tai absorboimalla säteilykvantin, jonka frekvenssi on

$$\nu = \frac{1}{h} |E_i - E_f|,$$

missä E_i ja E_f ovat alku- ja lopputilan energiat.

Vedyn kaltainen atomi

- Elektronin ja Z -varauksisen ytimen välinen Coulombin vetovoima



SI-järjestelmässä $k_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ ja cgs-järjestelmässä $k_0 = 1$.

- Keskipakoisvoima

$$ma = m \frac{v^2}{r}.$$

- Coulombin voima ja keskipakoisvoima ovat tasapainossa:

$$F = k_0 \frac{Ze^2}{r^2} = ma = m \frac{v^2}{r}.$$

- Impulssimomentti $L = mvr$, joten

$$k_0 Ze^2 = mv^2 r = Lv.$$

- Nopeus ja ympyräradan säde on lausuttavissa impulssimomentin avulla:

$$v = \frac{k_0 Ze^2}{L}; \quad r = \frac{L}{mv} = \frac{L^2}{mk_0 Ze^2}.$$

- Kineettinen energia on

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m \left(\frac{k_0Ze^2}{L} \right)^2.$$

- Potentiaalienergia on

$$\begin{aligned} E_{\text{pot}} &= -k_0 \frac{Ze^2}{r} = -k_0Ze^2 \frac{mk_0Ze^2}{L^2} \\ &= -m \left(\frac{k_0Ze^2}{L} \right)^2. \end{aligned}$$

- Kokonaisenergia on

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = -\frac{m}{2} \left(\frac{k_0Ze^2}{L} \right)^2.$$

Tämä on energia, joka tarvitaan elektronin irrottamiseksi ytimen läheisyydestä.

- Bohrin kvanttiehto:

$$L = n\hbar; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Bohrin atomimallin mukaan on siis

$$\begin{aligned} v_n &= \frac{k_0Ze^2}{n\hbar} \\ r_n &= \frac{n^2\hbar^2}{mk_0Ze^2} \\ E_n &= -\frac{m}{2} \left(\frac{k_0Ze^2}{n\hbar} \right)^2 \\ n &= 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

Tässä $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

Määritellään n.s. *hienorakennevakio*

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{k_0e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \\ \frac{1}{\alpha} &= 137.035982 \pm 0.000032. \end{aligned}$$

Nyt

$$\begin{aligned} v_n &= \frac{Z\alpha c}{n} \\ r_n &= \frac{n^2}{Z\alpha} \frac{\hbar}{mc} = \frac{n^2}{2\pi Z\alpha} \frac{h}{mc} \\ E_n &= -\frac{1}{2} \frac{Z^2\alpha^2 mc^2}{n^2}. \end{aligned}$$

Tässä $h/mc = 2.4262 \cdot 10^{-12} \text{ m}$ on elektronin Comptonin aallonpituus ja $mc^2 = 0.511 \text{ MeV}$ elektronin lepoenergia.

Vetyatomissa ($Z = 1$) alimmalla radalla ($n = 1$) on

$$\begin{aligned} r_1 &= a_0 = 0.5292 \text{ \AA} = 0.5292 \cdot 10^{-10} \text{ m} \\ &= \text{Bohrin radan säde} \\ |E_1| &= \frac{m(\alpha c)^2}{2} = 13.606 \text{ eV} = 1 \text{ Ry}. \end{aligned}$$

Vedyn kaltaisen atomin energiatilat ovat siis

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \text{ Ry} = -13.606 \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV}.$$

Perustila on tila, jossa energia on minimissään ($n = 1$).

Viritystila on mikä tahansa muu tila ($n \neq 1$).

Viritysendergia on viritystilan ja perustilan energioiden erotus ($E_n - E_1$).

Kvanttiluvun n kasvaessa on voimassa

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} E_n &= 0 \\ \lim_{n \rightarrow \infty} r_n &\rightarrow \infty \\ \lim_{n \rightarrow \infty} v_n &= 0. \end{aligned}$$

Siirrettäessä elektroni äärettömyydestä tilaan n vapautetaan energiaa määrää

E_n . Poistettaessa elektroni radalta n äärettömän kauas tarvitaan energiaa määrää E_n . Energia E_n on tilan n *sidosenergia*.

Siirtyessään tilalta n_1 tilalle n_2 elektroni emittoi (tai absorboi, jos $E_{n_1} < E_{n_2}$) fotonin, jonka frekvenssi on ($Z = 1$)

$$\nu = \frac{m(\alpha c)^2}{2h} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

ja energia

$$h\nu = \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \text{ Ry} = 13.606 \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \text{ eV}.$$

Vastaava aallonpituus on

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{c}{\nu} \\ &= \frac{2h}{m\alpha^2 c} / \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \\ &= \frac{1}{R_\infty} / \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right), \end{aligned}$$

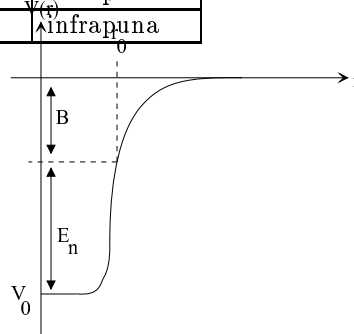
missä $R_\infty = 1.0973731 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ on *Rydbergin vakio*.

Huom. $1\text{Ry} = 13.606\text{eV} = hcR_\infty$

Eräitä vedyn spektrisarjoja:

n_1	E_{n_1} (eV)	Sarja	Aaltoalue
1	-13.6	Lyman	ultravioletti
2	-3.3	Balmer	näkyvä
3	-1.5	Paschen	infrapuna
4	-0.85	Brachett	infrapuna
5	-0.54	Pfund	infrapuna

Ytimen myötäliike



Kahden kappaleen —massat m ja M — redusoituu yhden μ -massaisen kappaleen ongelmaksi, joten tilan n energia on

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{\mu(Z\alpha c)^2}{n^2}.$$

Redusoitu massa μ on määritelty siten, että

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M},$$

eli

$$\mu = \frac{mM}{m+M} = \frac{m}{1+m/M}.$$

Vetyatomille on $m/M \approx 1/2000$.

Deuteriumin ($Z = 1, A = 2$) löytö (1932) perustui siihen, että sen spektriviivat ovat siirtyneet puolen promillen verran vedyn spektriviivojen suhteen:

$$\mu_D = \frac{m}{1+m/(2M)} \approx m \left(1 - \frac{m}{2M}\right).$$

Sommerfeldin kvanttiehto; ellipsiradat

- Yleistetyt koordinaatit:

$$q_1, q_2, \dots, q_f$$

- Yleistetyt impulssit:

$$p_1, p_2, \dots, p_f$$

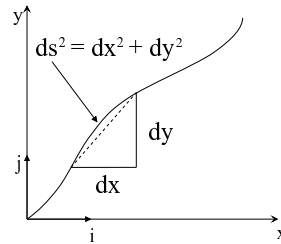
Esim. Karteesinen koordinaatisto

$$\begin{cases} q_1 = x, & q_2 = y \\ p_1 = m\dot{x}, & p_2 = m\dot{y} \end{cases}$$

$$ds^2 = dx^2 + dy^2$$

$$v^2 = \left(\frac{ds}{dt}\right)^2 = \dot{x}^2 + \dot{y}^2$$

$$\vec{v} = \dot{x}\hat{i} + \dot{y}\hat{j}$$



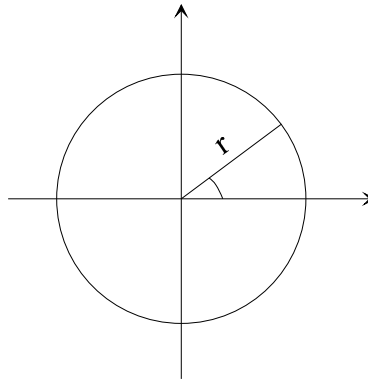
Esim. Napakoordinaatisto

$$\begin{cases} q_1 = r, & q_2 = \theta \\ p_1 = m\dot{r}, & p_2 = mr^2\dot{\theta} \end{cases}$$

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2$$

$$v^2 = \left(\frac{ds}{dt}\right)^2 = \dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2$$

$$\vec{v} = \dot{r}\hat{e}_r + r\dot{\theta}\hat{e}_\theta$$



Faasiavaruus on yleistettyjen koordinaattien ja yleistettyjen impulssien virittämä lineaarinen avaruus.

Sommerfeldin kvanttiehto

$$\oint p_k dq_k = n_k h, \quad n_k = (0, 1, 2, 3, \dots) \text{ ja } k = 1, 2, 3, \dots$$

Esim 1. Ympyrärata

$$\begin{aligned} r &= \text{vakio} \\ q &= \theta \\ p_\theta &= mr^2\dot{\theta} = mr(r\dot{\theta}) = mrv = L \end{aligned}$$

Tällöin

$$\oint p_\theta dq = \int_0^{2\pi} mrv d\theta = \underbrace{\int_0^{2\pi} L d\theta}_{2\pi L} = nh,$$

joten Sommerfeldin kvanttiehdon mukaan

$$L_n = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Sommerfeldin kvanttiehto antaa ympyräradan tapauksessa Bohrin kvanttiehdon.

Esim. 2. Harmoninen oskillaattori

- Periodi: $T = 1/\nu = 2\pi/\omega$.
- Jousivakio: $k = m\omega^2$.
- Newtonin liikeyhtälö: $\ddot{x} + \omega^2 x = 0$.
- Liikeyhtälön ratkaisu: $x = A \sin \omega t$.
- Vastaava impulssi: $p_x = mA\omega \cos \omega t = m\dot{x}$.
- Kokonaisenergia:

$$\begin{aligned} E &= E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}kx^2 \\ &= \frac{1}{2}mA^2\omega^2 \cos^2 \omega t + \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 \sin^2 \omega t \\ &= \frac{1}{2}mA^2\omega^2. \end{aligned}$$

Tällöin

$$\begin{aligned} \oint p_x dx &= \int_0^T mA\omega \cos \omega t \cdot A\omega \cos \omega t dt \\ &= mA^2\omega^2 \int_0^T \cos^2 \omega t dt \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \stackrel{y=\omega t}{=} mA^2\omega \int_0^{2\pi} \cos^2 y \, dy \\
&= mA^2\omega \int_0^{2\pi} \frac{1}{2}(\cos(2y) + 1) \, dy \\
&= mA^2\omega \int_0^{2\pi} \frac{1}{4}(\sin 2y + \frac{1}{2}y) \\
&= mA^2\omega\pi = E \frac{2\pi}{\omega} = ET = \frac{E}{\nu},
\end{aligned}$$

joten Sommerfeldin kvanttiehdon mukaan

$$\oint p_x dx = \frac{E}{\nu} = nh,$$

eli saadaan Planckin kvanttiehto

$$E_n = nh\nu, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Ellipsiradat

Massapisteen, jonka kokonaisenergia on $E < 0$, rata $1/r$ -tyyppisessä potentiaalissa on ellipsi. Sommerfeld yleisti Bohrin atomimallia ottamalla käyttöön ellipsiradat.

- Yleistetyt koordinaatit: $q_1 = r$ ja $q_2 = \theta$.
- Yleistetyt impulssit: p_r ja p_θ .
- Sommerfeldin kvanttiehto ($k = 1 ; r$):

$$\oint p_r dr = n_r h, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots$$

- Sommerfeldin kvanttiehto ($k = 2 ; \theta$):

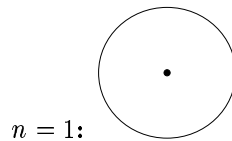
$$\oint p_\theta d\theta = n_\theta h, \quad n_\theta = 1, 2, 3, \dots$$

Tässä $n_\theta = 0$ ei kelpaa, sillä silloin rata kulkisi ytimen läpi.

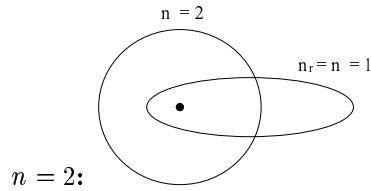
Merkitään

$$n = n_r + n_\theta.$$

Ellipsiradoilla, joilla on sama n , on sama isoakseli, mutta eri pikkuakseli. Toisaalta energia riippuu ainoastaan kvanttiluvusta n . Kyseessä on n.s. *degeneraatio*: samaan energiaan liittyy eri ratoja.



$n_r = 0$ ja $n_\theta = 1$, ympyrärata.



$$\begin{cases} n_r = 0 \\ n_\theta = 2 \end{cases} \text{ tai } \begin{cases} n_r = 1 \\ n_\theta = 1 \end{cases}$$

Suhteellisuusteoreettinen korjaus

$$m \rightarrow \frac{m_0}{\sqrt{1 - \beta^2}} \text{ ja } E \rightarrow \frac{E_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}.$$

Esim. vedyn perustilassa on $\beta = v/c = \alpha = 1/137$.

Rata ei ole enää suljettu käyrä, vaan prekessoiva ellipsi.

Huomioimalla suhteellisuusteoreettiset korjaukset eri eksentrisyyksiä vastaa eri energia, t.s. relativistiset korjaukset poistavat degeneraation.

Bohrin atomimallin heikkouksia

1. Atomin stabiilisuus on vain oletus. Samoin oletetaan, että klassisen fysiikan lait eivät sellaisinaan riitä atomeille.
2. Suppea sovellutusalue
 - vain vedyn kaltaiset atomit
 - mallin avulla ei voida laskea esim. spektriviivojen intensiteettiä eikä aikaa, jossa viritys laukeaa.

2 Aaltoilmiöiden ominaisuuksia

Käsitteitä

Aaltofunktio

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= A \sin(\omega t - k(\pm x)) \text{ tai} \\ &A \cos(\omega t - k(\pm x)) \text{ tai} \\ &A e^{-i(\omega t - k(\pm x))}\end{aligned}$$

kuvaa x -akselin positiiviseen tai negatiiviseen suuntaan etenevää harmonista aaltoa, jonka

kulmataajuus on $\omega = 2\pi\nu$

amplitudi on A

aaltoluku on k

aallonpituus on $\lambda = 2\pi/k$.

Vaihenopeus saadaan asettamalla vaihe vakioksi:

$$\omega t - k(\pm x) = \text{vakio},$$

josta

$$u = \frac{d(\pm x)}{dt} = \frac{\omega}{k} = \text{vaihenopeus},$$

eli

$$u = \frac{\omega}{k} = \frac{2\pi\nu}{2\pi/\lambda} = \nu\lambda.$$

Aaltofunktion aika- ja paikkariippuvuus saadaan **aaltoyhtälöstä**.

Aaltoliikkeen dynamiikkaa kuvaa kulmataajuuden ja aaltoluvun välinen relaatio, **dispersio**:

$$\omega = \omega(k).$$

Yksinkertaisissa tapauksissa riippuvuus on lineaarinen:

$$\omega = ak,$$

missä a on vakio.

Esim. Värähtelevä kieli

Värähtelevä kieli toteuttaa klassisen aaltoyhtälön

$$\frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial t^2} = \frac{\tau}{\rho} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2},$$

missä τ on kielen jännitys (voima/pituusyksikkö) ja ρ pitkittäistiheys (massa/pituusyksikkö). Aaltofunktio $\psi(x, t)$ kuvaa kielen poikkeamaa lepoasennosta.

Usein sovellettava ratkaisuteknikka on n.s. *muuttujien erottaminen*; kokeillaan *gritteellä*:

$$\psi(x, t) = X(x)T(t).$$

Nyt

$$\frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial t^2} = X \frac{d^2 T}{dt^2} \text{ ja } \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{d^2 X}{dx^2} T,$$

joten

$$X \frac{d^2 T}{dt^2} = \frac{\tau}{\rho} \frac{d^2 X}{dx^2} T.$$

Jakamalla tämä puolittain XT :llä saadaan

$$\frac{1}{T} \frac{d^2 T}{dt^2} = \frac{\tau}{\rho X} \frac{d^2 X}{dx^2}.$$

Koska yhtälön oikea puoli riippuu ainoastaan muuttujasta x on yhtälön vasemmalla puolella oltava muuttujasta t riippumaton vakioarvo ja kääntäen. Täytyy siis olla voimassa

$$\frac{1}{T} \frac{d^2 T}{dt^2} = \frac{\tau}{\rho X} \frac{d^2 X}{dx^2} = -\omega^2 = \text{vakio},$$

eli

$$\begin{aligned} \frac{d^2 T}{dt^2} + \omega^2 T &= 0 \\ \frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{\rho}{\tau} \omega^2 X &= 0. \end{aligned}$$

Näiden yhtälöiden ratkaisut ovat

$$\begin{aligned} T &= Ae^{i\omega t} + Be^{-i\omega t} \\ X &= Ce^{ikx} + De^{-ikx}. \end{aligned}$$

Tässä $k^2 = \frac{\rho}{\tau} \omega^2$, eli

$$\omega = \sqrt{\frac{\tau}{\rho}} k \quad (\text{dispersiolaki}).$$

Oletetaan, että kielen päät ovat kiinnitetyt, jolloin yhtälön *reunaehdot* ovat

$$\psi(0, t) = \psi(L, t) = 0,$$

kun L on kielen pituus. Aaltofunktio

$$\psi(x, t) = X(x)T(t)$$

toteuttaa k.o. reunaehdot, jos

1. $X(0) = 0$, joten $C = -D$ eli $X(x) = C' \sin kx$,
2. $X(L) = 0$, eli $\sin kL = 0$, joten $kL = n\pi$, $n = 0, 1, 2, \dots$

Aallonpituus on

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi}{n\pi/L} = \frac{2L}{n}$$

ja kulmataajuus

$$\omega = \sqrt{\frac{\tau}{\rho}} k = \sqrt{\frac{\tau}{\rho}} \frac{n\pi}{L}.$$

Jos lisäksi vaaditaan, että kielen poikkeama hetkellä $t = 0$ on 0, on reunaehdot toteuttava aaltoyhtälön ratkaisu

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= A' \sin \omega t \sin kx \\ &= A' \sin \left(\sqrt{\frac{\tau}{\rho}} \frac{n\pi}{L} t \right) \sin \left(\frac{n\pi}{L} x \right). \end{aligned}$$

Kun

- $n = 0$, kieli on levossa,
- $n = 1$, perustaaajuus, eli $\nu = \frac{2\pi}{\omega} = 2\sqrt{\frac{\rho}{\tau}} L$,
- $n > 1$, harmoniset ylitaajuudet.

Muita esimerkkejä aaltoliikkeestä:

- sähkömagneettinen säteily
- ääniaallot
- kiinteän tangon tai kidehilan värähtelyt
- nesteen pinta-aallot
- ...

2.1 Aaltopaketit ja ryhmänopeus

Erilaisia ilmiöitä kuvaavat aaltoyhtälöt ovat lineaarisia ja homogeenisia aaltofunktion ja sen derivaattojen suhteen. Siten myös ratkaisujen lineaarikombinaatio on ratkaisu.

Superpositioperiaate: Aaltojen, joita kuvaavat aaltofunktiot $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$, yhteisvaikutus on summa-aalto, jota kuvaa aaltofunktio

$$\psi = \sum_{i=1}^n \psi_i.$$

tasoaalto jatkuu samanlaisena rajatta.



aaltopaketissa aaltoliike on lokalisoitunut; esim. häiriö vedenpinnassa.



Aaltopaketti saadaan aikaan esim. muodostamalla kahden lähes samantaajuisten aallon summa-aalto. Olkoot näiden aaltojen kulmataajuuudet ω_1 ja ω_2 ja aaltoluvut vastaavasti k_1 ja k_2 . Tarkastellaan aaltoja

$$\begin{aligned}\psi_1(x, t) &= \cos(\omega_1 t - k_1 x) \\ \psi_2(x, t) &= \cos(\omega_2 t - k_2 x).\end{aligned}$$

Merkitään

$$\begin{aligned}\omega_1 &= A\omega + \Delta\omega \\ \omega_2 &= A\omega - \Delta\omega\end{aligned}$$

ja

$$\begin{aligned}k_1 &= k + \Delta k \\ k_2 &= k - \Delta k.\end{aligned}$$

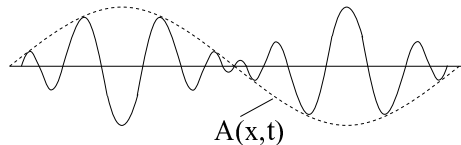
Summa-aalto on nyt

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \psi_1(x, t) + \psi_2(x, t) \\ &= A \cos(\omega_1 t - k_1 x) + A \cos(\omega_2 t - k_2 x) \\ &= 2A \cos \frac{1}{2} [(\omega_1 + \omega_2)t - (k_1 + k_2)x] \\ &\quad \times \cos \frac{1}{2} [(\omega_1 - \omega_2)t - (k_1 - k_2)x] \\ &= 2A \cos(\Delta\omega t - \Delta k x) \cos(\omega t - kx) \\ &= A(x, t) \cos(\omega t - kx),\end{aligned}$$

missä

$$A(x, t) = 2A \cos(\Delta\omega t - \Delta k x)$$

on amplitudi, joka itsekin on aalto. Moduloiden alkuperäistä aaltoa se saa aikaan aaltoryhmiä.



Amplitudiaallon saman vaiheen etenemisnopeus on

- aaltopakettin nopeus
- *ryhmänopeus* v_g
- signaalin etenemisnopeus.

Asetetaan

$$\Delta\omega t - \Delta k x = \text{vakio},$$

joten

$$v_g = \frac{dx}{dt} = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} \rightarrow \frac{d\omega}{dk}.$$

Ryhmänopeus määräytyy dispersiosta $\omega = \omega(k)$. Mikäli dispersiota ei ole, eli $\omega = \text{vakio} \times k$, niin ryhmänopeus on sama kuin vaihenopeus. Yleisemmin

$$\begin{aligned} v_g &= \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(ku)}{dk} = u + k \frac{du}{dk} \\ &= u + k \frac{du}{d\lambda} \frac{d\lambda}{dk} \stackrel{\lambda = \frac{2\pi}{k}}{=} u - k \frac{2\pi}{k^2} \frac{du}{d\lambda} \\ &= u - \lambda \frac{du}{d\lambda}. \end{aligned}$$

Huom. Aaltoliikkeessä ei etene aine, vaan liiketilan muutos s.o. energia ja impulssi. Puhutaan myös signaalin etenemisestä.

3 Valo aaltolina ja hiukkasina

3.1 Valon hiukkasluonne

Energia ja impulssi

Koska yleisesti on voimassa

$$E^2 - p^2 c^2 = m_0^2 c^4$$

ja valolle on lisäksi

$$\begin{aligned} E &= h\nu = \hbar\omega \\ m_0 &= 0, \end{aligned}$$

on fotonin liikemäärä

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}.$$

Ei ole olemassa inertiaalikoordinaatistoa, jossa fotonin on levossa. Yleisen käytännön mukaan objektia, joka ei koskaan ole levossa ja jolla ei ole lepomassaa, ei nimitetä hiukkasiksi.

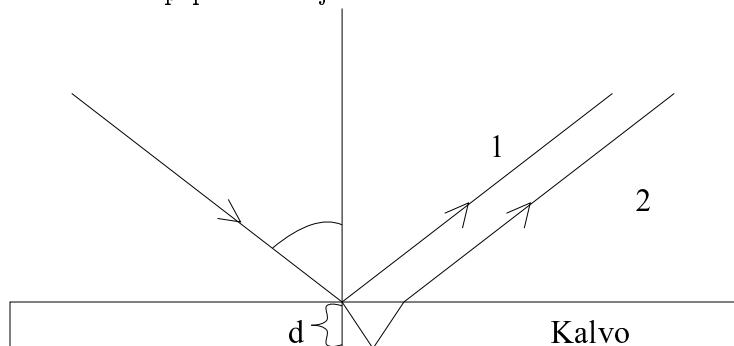
Fotonin liikemäärä —hiukkasluonteeseen liittyvä suure— voidaan todeta m.m. *Comptonin sironnassa, parisyntyssä ja valosähköisessä ilmiössä.*

3.2 Valon aaltoluonne

Valon heijastuminen ohuista valoa läpäisevistä kalvoista

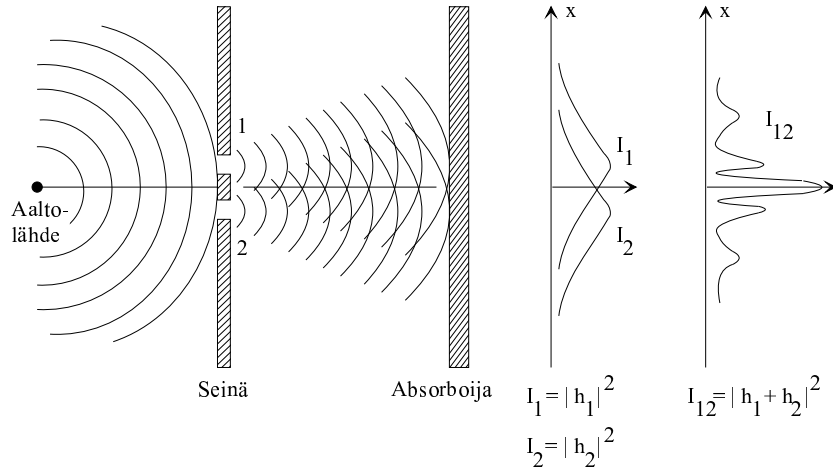
Aaltojen ψ_1 ja ψ_2 vaihe-ero riippuu kulmasta α , kalvon taitekertoimesta ja saapuvan valon aallonpituudesta.

Esim. Veden pinnalla oleva öljykalvo jakaa valkoisen valon spektriin. Spektrin syntymisen syynä on valon tulosuunnan epämääräisyys, kalvon paksuuden vaihtelu sekä veden epäpuhtaudet ja mahdollinen aaltoilu.



Interferenssi

Tasoaaltorintama kohtaa kaksi etäisyydellä d toisistaan olevaa Δ :n levyistä rakoa. Kun $\Delta/d \ll 1$ ja $\lambda \gg \Delta$, voidaan rakoa approksimoida viivamaisena lähteenä.



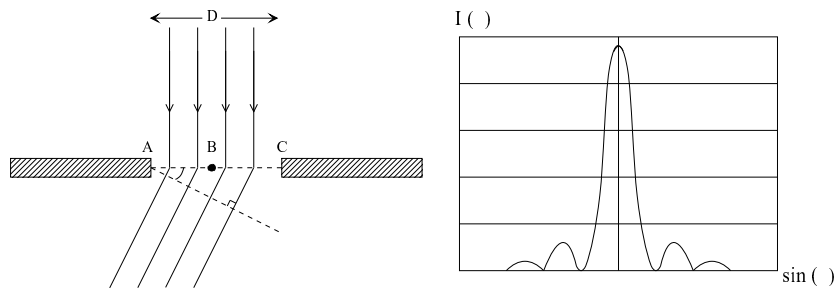
Diffraktio

Aaltoliike kohtaa aukkoja tai esteitä, joiden dimensio on aallonpituuden suuruusluokkaa. Tapahtuvaa taipumisilmiötä nimitetään *diffraktioksi*. Valonsäteet pisteistä A ja C vastakkaisissa vaiheissa, kun

$$D \sin \theta = \frac{1}{2} \lambda.$$

Täydellinen destruktiivinen interferenssi syntyy, kun äärimmäisten aaltojen matkaero on λ . Tällöin välin AB eri pisteistä lähtevät aallot kumoavat välin BC pisteistä lähtevät aallot. Intensiiteettiminimit havaitaan, kun

$$D \sin \theta = n \lambda, \quad n = 1, 2, \dots$$



3.3 Fotonin jaettavuus

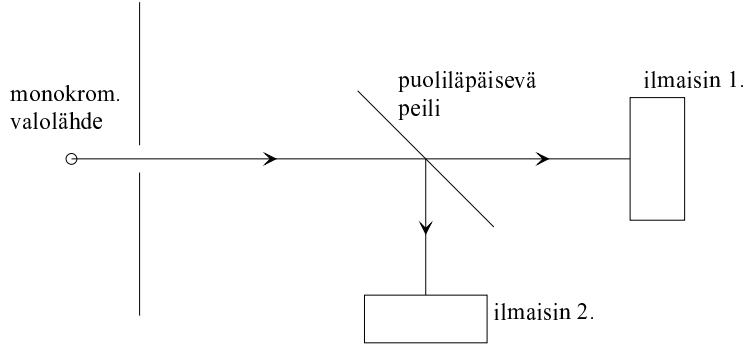
hiukkanen: jakamaton.

aalto: voidaan jakaa osiin ja yhdistää.

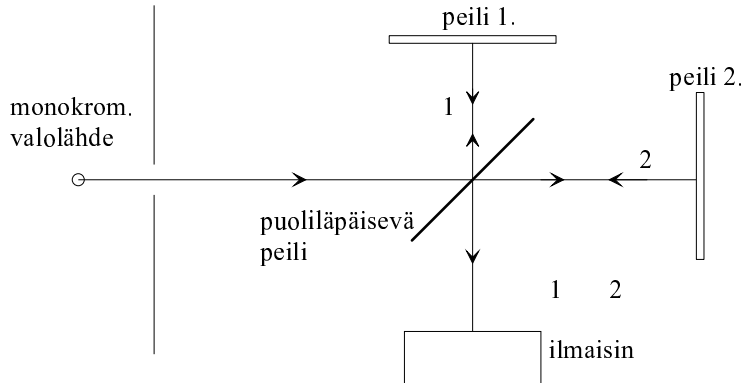
Esim. kahden raon interferenssin hiukkasmalliin perustuva selitys vaatisi, että fotonit jakautuu kahteen osaan.

Tarkastellaan monokromaattisesta lähteestä peilien kautta ilmaisimina toimivaan valokennoon saapuvia fotoneja. Valokennot rekisteröivät vain ne fotonit, joiden energia on tiettyä kynnyksenergiaa suurempi. Mikäli fotonit jakautuisi, eivät valokennot reagoisi.

Koejärjestely (a). Havaitaan, että valokennojen 1 ja 2 mittaamien intensiteettien summa = kokonaisintensiteetti $I = I_1 + I_2$. Tässä järjestelyssä fotonit eivät siis jakaannu eli fotoneilla on hiukkasominaisuus.



Koejärjestely (b): Heijastunut aalto ψ_1 ja läpäissyt aalto ψ_2 saatetaan yhteen heijastamalla ne peileistä 1 ja 2. Säätelemällä matkaeroa havaitaan intensiteetin vaihtelevan aallonpituuden jaksoilla, joten ψ_1 ja ψ_2 interferoivat. Fotoneilla on siis aalto-ominaisuus.



- Koejärjestely 1 osoittaa fotonit jakamattomiksi.
- Koejärjestelyssä 2 havaitun interferenssin on siis tapahduttava kahden tai useamman fotonin kesken.
- Mikäli interferenssiin osallistuisi useampia fotoneja, täytyisi sen voimakkuuden riippua fotonitiheydestä, t.s. valon intensiteetistä.

- Äärimmäisen pienillä intensiteeteillä (eräässä kokeessa valotusaika 3 kuukautta) tehdyt kokeet osoittavat, että interferenssikuvio on yhtä terävä kuin suurilla intensiteeteillä. Oletus erillisten fotonien keskinäisestä interferenssistä on siis virheellinen.

Dilemma

Valon hiukkasominaisuutta, fotonin energiaa, koskevissa havainnoissa fotoni esiintyy aina jakamattomana kokonaisuutena, mutta valon aalto-ominaisuutta, interferenssiä, koskevissa havainnoissa fotoni aina jakaantuu aallon mahdollisia kulkureittejä vastaaviin osiin.

Valolla on *aalto-hiukkasdualismi*.

3.4 Todennäköisyystulkinta

Valonsädetä kuvaava aaltofunktio on yksittäisten fotonien aaltofunktioiden summa.

Sähkömagneettisen säteilykentän tapauksessa aaltofunktiolla tarkoitetaan sähkö- ja magneettikenttien, \vec{E} ja \vec{B} , muodostamaa paria.

Klassisesti aaltofunktio tulkitaan siten, että

$$\mathcal{E} = \frac{\vec{E}^2 + \vec{B}^2}{2} = \text{energiatiheys.}$$

Klassinen tapaus: energiamäärät $\gg 1 \cdot h\nu$, joten tulkinta on OK.

Yksityinen fotoni: tulkinta on mieletön. Koska $h\nu$ on pienin havaittava jakamaton energiamäärä, ovat kvanttihypoteesi ja energiatiheystulkinta keskenään ristiriidassa.

Todennäköisyystulkinta

Sopivasti normitettu aaltofunktion itseisarvon neliö on todennäköisyystiheys fotonin tai fotonien havaitsemiselle.

Energioiden ja havaittavien fotonimäärien ollessa suuria ovat energiatiheystulkinta ja todennäköisyystulkinta ekvivalentteja.

Ajatellaan e.o. kokeessa (a) fotonit lähetetyiksi 10^{10} fotonin kimppuina puoliläpäisevälle peilille:

- Klassisen ennusteen mukaan kumpaankin valokennoon tuleva energia on $\frac{1}{2}h\nu \cdot 10^{10}$.
- Todennäköisyysennusteen mukaan energiat vaihtelevat ryhmästä toiseen, mutta ovat keskimäärin $\frac{1}{2}h\nu \cdot 10^{10}$. Vaihtelujen suuruus on todennäköisyyslaskennan mukaan $h\nu\sqrt{10^{10}} = h\nu 10^5$ eli noin $10^{-5} \times$ havaittu energia. Näin pieniä eroja ei voida kokeellisesti havaita.

4 Materiaalisten hiukkasten aaltoluonne

4.1 De Broglie'n aineallot (1924)

Optiikan yhtälöiden ja materiaihiukkasten liikettä kuvaavien yhtälöiden (Hamilton-Jacobin yhtälö) välillä on läheinen analogia. Koska säteilyyn oli todettu liittyvän duaalinen käyttäytyminen, oletti de Broglie myös materiaihiukkasiin liittyvän sekä hiukkasten että aaltojen ominaisuuksia. Planck-Einsteinin ehdon mukaan fotonin energia on

$$E = h\nu.$$

Suhteellisuusteorian mukainen kokonaisenergia on

$$E = mc^2 = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}.$$

Fotonille ($m_0 = 0$)

$$E = pc = h\nu = \frac{hc}{\lambda},$$

joten

$$p = \frac{h}{\lambda}.$$

De Broglie'n mukaan samat hiukkassuureita, energiaa E ja liikemäärää p sekä aaltosuureita, aallonpituutta λ ja frekvenssiä ν , toisiinsa sitovat relaatiot ovat voimassa myös materiaalisille hiukkasille. Kaikille hiukkasille on siis

$$\begin{aligned} E &= h\nu \\ p &= \frac{h}{\lambda}. \end{aligned}$$

Energiankuljettajien jako hiukkasiin ja aaltoihin on hylättävä:

- klassisesti aaltoliikkeenä pidetyllä valolla on hiukkasominaisuuksia.
- kaikilla tunnetuilla hiukkasilla on myös aalto-ominaisuuksia.

Esimerkkejä

1. Bohrin radalla olevan elektronin de Broglie-aallonpituus
Perustilassa $K = 13.6\text{eV}$ =vedyn ionisaatioenergia. Nyt

$$K = \frac{1}{2}m_e v^2 = \frac{p^2}{2m_e}; \quad p = \sqrt{2m_e K},$$

joten

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{\sqrt{2m_e c^2 K}}.$$

Sijoittamalla $m_e c^2 = 511 \text{ keV}$ ja $\hbar = h/2\pi = 6.582 \cdot 10^{-22} \text{ MeVs}$ saadaan

$$\lambda \approx 3.28 \text{ \AA}.$$

Ensimmäisen Bohrin radan säde on $r_1 = a_0 = 0.528 \text{ \AA}$ ja kehä vastaavasti $2\pi a_0 \approx 3.3 \text{ \AA} \approx \lambda$.

Yleisesti on n :lle radalle voimassa

$$n\lambda_n = 2\pi r_n.$$

Tämä ehto selittää Bohrin kvanttiehdon. Jos elektroniin liittyy de Broglie'n aallonpituuden omaava Bohrin radan läheisyyteen lokalisoitunut aalto, voi kyseessä olla stationääristä tilannetta vastaava seisova aalto vain silloin, kun radan pituus on aallonpituuden monikerta.

2. Elektroni, jonka kineettinen energia = lepoenergia

Nyt

$$\begin{aligned} E &= 2m_e c^2 \\ p^2 &= \frac{1}{c^2}(E^2 - m_e^2 c^4) = 3m_e^2 c^2, \end{aligned}$$

joten

$$p = \sqrt{3} m_e c$$

ja

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{h}{m_e c} = \frac{1}{\sqrt{3}} \lambda_e = \frac{0.024}{\sqrt{3}} \text{ \AA}.$$

Tässä λ_e on elektronin Comptonin aallonpituus.

Vastaavasti fotonin, jonka energia on $2m_e c^2$ ja liikemäärä siis $p = 2m_e c$, aallonpituus on

$$\lambda_f = \frac{h}{2m_e c} = \frac{\lambda_e}{2} = 0.012 \text{ \AA}.$$

3. Makroskooppinen kappale $m = 1 \text{ g}$, $v = 1 \text{ m/s}$

de Broglie-aallonpituus on

$$\lambda = \frac{h}{mv} = 6.6 \cdot 10^{-29} \text{ m},$$

joka on mahdoton havaita.

Aaltojen ryhmä- ja vaihenopeudet

Osoitetaan, että hiukkaseen liittyvien de Broglie-aaltojen ryhmänopeus on sama kuin hiukkasen mekaaninen nopeus.

Ryhmänopeus on

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(2\pi\nu)}{d(2\pi/\lambda)} = \frac{d(h\nu)}{d(h/\lambda)} = \frac{dE}{dp}.$$

Koska $E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$ on $2E dE = 2c^2p dp$, joten

$$v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{c^2p}{E} = \frac{c^2mv}{mc^2} = v,$$

t.s. $v_g = v$. On helppo nähdä, että epärelativistinen käsittely ($E = p^2/2m$) johtaa samaan tulokseen

$$v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{2p}{2m} = \frac{mv}{m} = v.$$

Vaihenopeudelle klassinen ja relativistinen käsittely antavat eri tulokset:

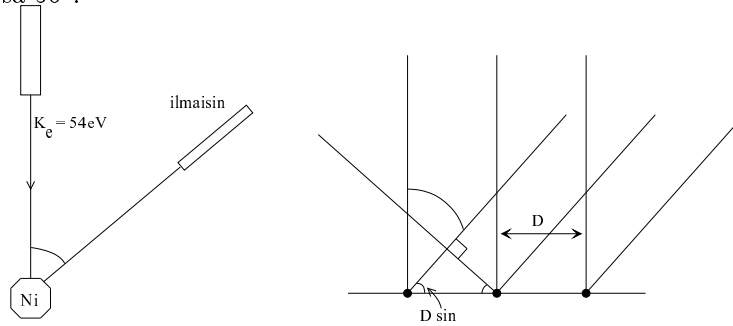
$$u_k = \nu\lambda = \frac{h\nu}{h/\lambda} = \frac{E}{p} = \frac{\frac{1}{2}mv^2}{mv} = \frac{1}{2}v$$

$$u_r = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v}.$$

Vaihenopeudelle on siis voimassa $u_r v = c^2$. Koska $v \leq c$, on $u_r \geq c$, joten vaihenopeus ei ole fysikaalisesti mitattavissa oleva suure.

Davissonin ja Germerin koe

Tutkittiin elektronien sirontaa Ni-kiteen pinnasta. Käytettäessä elektronitykissä kiihdytysjännitettä 54V todettiin voimakas intensiteetti kulmassa 50° .



Röntgensädekokeiden perusteella tiedettiin atomirivistöjen sijaitsevan Ni-kiteessä 2.15 \AA :n etäisyydellä toisistaan, $D = 2.15$. Ehto interferenssimaksimille on

$$\lambda = D \sin \phi = 2.15 \text{ \AA} \sin 50^\circ = 1.65 \text{ \AA}.$$

Elektronien kineettisen energian ollessa $K = e \cdot V$ on niiden de Broglie aallonpituus

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e V e}}.$$

Sijoittamalla lukuarvot saadaan

$$\lambda = \left(\frac{150}{V} \right)^{\frac{1}{2}} \text{ \AA} \quad (V \text{ voltteina})$$

$$= \left(\frac{150}{54}\right)^{\frac{1}{2}} \text{ \AA} = 1.66 \text{ \AA}.$$

Tämä erinomainen yhteensopivuus vahvistaa aineaaltojen olemassaolon. Aineaaltojen olemassaoloon perustuvia sovellutuksia ovat m.m.

- elektronimikroskooppi
- kiteiden ja nesteiden rakennetutkimus termisillä neutroneilla

4.2 Todennäköisyystulkinta

Hiukkasmekaniikan ja aaltoilmiöiden välisiä eroavuuksia:

	Aaltoliike	Hiukkaset
Intensiteetti	jatkuva	epäjatkua (hiukkasten lukumäärä)
Paikka	avaruuden alue	avaruuden piste

Aineaaltojen havaitseminen (Davisson & Germer) osoittaa, että hiukkaseen liittyy tavalla tai toisella aaltoluonne.

Aalto- ja mikroilmiöiden kuvaamiseksi tarvitaan sekä hiukkas- että aaltokuva. Aaltoliikkeen paikan ulottuvuudesta johtuen ei hiukkasen ratakäsite ole tarkasti määritelty. Otetaan käyttöön *todennäköisyystulkinta*:

- todennäköisyystiheys hiukkasen havaitsemiselle pisteessä x hetkellä t

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \psi^* \psi.$$

- todennäköisyys hiukkasen esiintymiselle välillä $(x, x + \Delta x)$ hetkellä t

$$dP = |\psi(x, t)|^2 \Delta x.$$

- todennäköisyys sille, että hiukkanen on välillä (a, b) hetkellä t

$$P_{a,b} = \int_a^b |\psi(x, t)|^2 dx.$$

Koska hiukkanen on jossakin, niin on voimassa

- aaltofunktion normitus

$$P_{-\infty, \infty} = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1.$$

Tasoaallolle on $\rho = \psi^* \psi = |C|^2 = \text{vakio}$, joten $P_{-\infty, \infty} \rightarrow \infty$, eikä normitusta voida suorittaa. Tällöinkin todennäköisyystulkinta pätee ja tiheysfunktion $\rho(x, t)$ arvoja eri alueilla voidaan verrata keskenään.

Hiukkasen paikallistettavuuden perusteella jaetaan sen liiketilat kahteen ryhmään:

sidottu tila: Vuorovaikutukset sitovat hiukkasen äärelliseen alueeseen. Aaltofunktio on tällöin normitettavissa.

sirontatila: Hiukkasen liikkuma-alue ei ole rajoitettu. Tavanomainen normitus ei ole mahdollista.

4.3 Mittauksen vaikutus liiketilaan

Mitattaessa atomaarisia systeemejä havaintosignaalin energian ja liikemäärän vaikutusta mittaustuloksiin ei voi jättää huomiotta.

Kaksoisrakokoe elektroneilla

Raon 2 (1) ollessa suljettuna saadaan intensiteettijakautuma I_1 (I_2). Molempien rakojen ollessa avoinna interferenssiä vastaava jakauma on $I_{12} \neq I_1 + I_2$. Tällöin kokonaisaaltofunktio on superpositioperiaatteen mukaan

$$\psi(x, t) = \psi_1(x, t) + \psi_2(x, t).$$

Merkitään $S_i(x, t)$:llä aaltofunktion ψ_i vaihetta ja $R_i(x, t)$:llä sen modulia, t.s.

$$\psi_i = R_i e^{iS_i}, \quad i = 1, 2,$$

jolle

$$\operatorname{Re} \psi_i = R_i \cos S_i, \quad \operatorname{Im} \psi_i = R_i \sin S_i.$$

Todennäköisyystulkinnan mukaan intensiteetti on

$$\begin{aligned} I_{12} &\propto \psi^* \psi \\ &= (\psi_1 + \psi_2)^* (\psi_1 + \psi_2) \\ &= (R_1 e^{-iS_1} + R_2 e^{-iS_2}) (R_1 e^{iS_1} + R_2 e^{iS_2}) \\ &= R_1^2 + R_2^2 + R_1 R_2 [e^{i(S_1 - S_2)} + e^{-i(S_1 - S_2)}] \\ &= R_1^2 + R_2^2 + 2R_1 R_2 \cos(S_1 - S_2). \end{aligned}$$

Jos ainoastaan rako i on avoinna, on vastaava intensiteetti

$$I_i \propto \psi_i^* \psi_i = R_i^2.$$

Intensiteetti I_{12} voidaan kirjoittaa muotoon

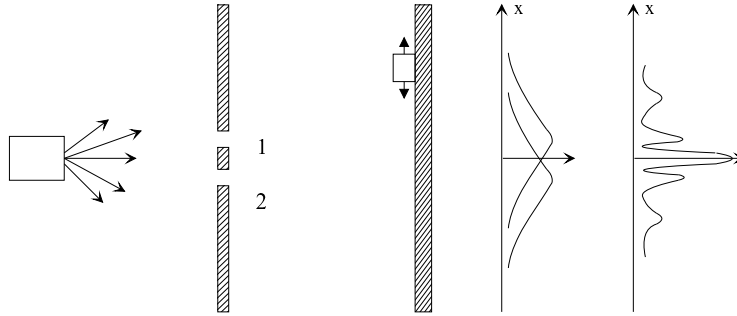
$$\begin{aligned} I_{12} &\propto I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(S_1 - S_2) \\ &\neq I_1 + I_2. \end{aligned}$$

Kulkureitin rekisteröinti

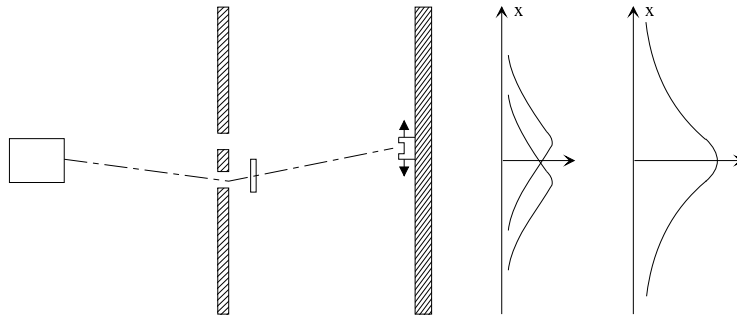
Mikäli mittauksella selvitetään, kumman raon kautta elektroni kulkee, menetetään interferenssi. Tällöin

$$I'_{12} \propto |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 = I_1 + I_2.$$

KOE ELEKTRONEILLA



REITIT REKISTERIIN



Elektronin kulkureitistä kaksoisrakokokeessa

- Mikäli käytettävissä on laite, jonka avulla reitti 1 (2) rekisteröidään, niin voidaan sanoa elektronin kulkeneen raon 1 (2) kautta. Tällöin menetetään interferenssi.
- Mikäli ei yritetä selvittää, mitä reittiä elektroni kulkee, ei voida sanoa yksityisen elektronin kulkeneen raosta 1 (2). Tällöin havaitaan interferenssi.

Tässä kaikki ja siihen on tyydyttävä.

4.4 Hiukkasen paikallistaminen ja Heisenbergin epätarkkuusperiaate

Tarkastellaan tasoaaltoa

$$\psi(x, t) = C e^{i(kx - \omega t)},$$

jolloin todennäköisyystiheys on vakio $\rho(x, t) = |\psi|^2 = C^2$. Superponoidaan hetkellä $t = 0$ kaikki tasoaalot, joille $-a \leq k \leq a$:

$$\begin{aligned} \Psi(x, 0) &= \int_{-a}^a \psi(x, 0) dk = C \int_{-a}^a e^{ikx} dk \\ &= \frac{C}{ix} \int_{-a}^a e^{ikx} = 2C \frac{\sin ax}{x}. \end{aligned}$$

Normitusehdon mukaan on

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx = 4C^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 ax}{x^2} dx \\ &\stackrel{y=ax}{=} 4C^2 a \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 y}{y^2} dy}_{\pi} = 4C^2 a \pi, \end{aligned}$$

joten

$$C^2 = \frac{1}{4a\pi}.$$

Superponoitu aaltofunktio on siis

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{a\pi}} \frac{\sin ax}{x}$$

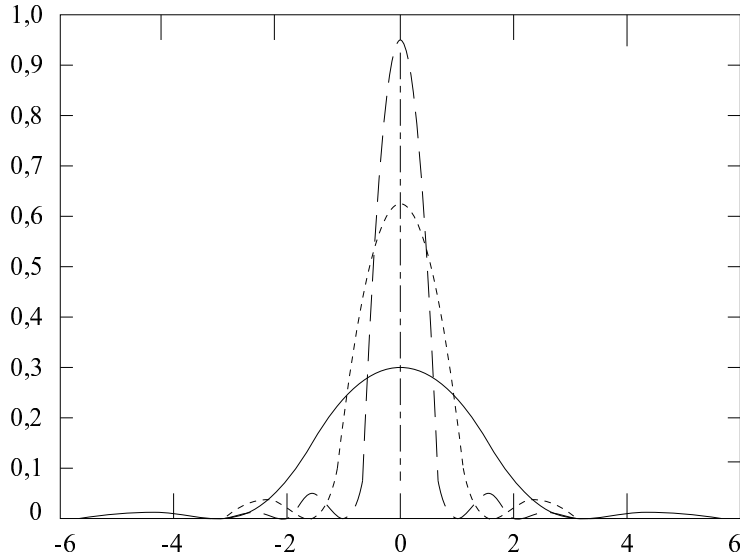
ja vastaava todennäköisyystiheys

$$\rho(x, 0) = \frac{a}{\pi} \frac{\sin^2 ax}{(ax)^2}.$$

Tästä voidaan nähdä, että aaltofunktio $\Psi(x, 0)$ vastaa välille $-\pi/a \leq x \leq \pi/a$ lokalisoituvaa hiukkasta. Kasvattamalla a :n arvoa eli k :n superponointialuetta tulee hiukkanen entistä paremmin paikallistetuksi. Koska $k = p/\hbar$, niin tällöin vastaava liikemäärän p alue myös kasvaa.

Merkitään Δx :llä aluetta, johon hiukkanen on paikallistettavissa (paikan epämääräisyyttä) ja Δp :llä vastaavaa liikemäärän aluetta (liikemäärän epämääräisyyttä). Nyt

$$\begin{aligned} \Delta x &\approx \frac{2\pi}{a} \\ \Delta p &= \hbar \Delta k \approx 2a\hbar. \end{aligned}$$



Hiukkaselle, jota kuvaa aaltofunktio Ψ , on siis voimassa

$$\Delta x \Delta p \approx \frac{2\pi}{a} 2a\hbar = 2h.$$

Yleisesti voidaan osoittaa, että kaikissa tapauksissa on voimassa *Heisenbergin epämääräisyysperiaate*

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar.$$

Mitä tarkempi on paikan määrittäminen, sitä epätarkempi on samanaikainen liikemäärän määrittäminen ja epätarkkuuksien tulo on $\geq \hbar$. Koska $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}$ Js, tämä ei aiheuta rajoituksia klassisella alueella.

Sovellutus: Epätarkkuusrelaatio ja atomin stabiilisuus

Tarkastellaan vetyatomia ($Z = 1$). Merkitään keskimääräisiä suureita symbolilla $\langle \rangle$; esim. elektronin etäisyys ytimestä on keskimäärin $\langle r \rangle$. Tällöin paikan epämääräisyys on

$$\Delta r \approx \langle r \rangle.$$

Heisenbergin epämääräisyysperiaatteen mukaan liikemäärän epämääräisyys on

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{\langle r \rangle}.$$

Liikemäärän neliön keskiarvo on suuruusluokkaa

$$\langle p^2 \rangle \gtrsim (\Delta p)^2$$

ja energia keskimäärin

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &\approx \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} - \frac{k_0 e^2}{\langle r \rangle} \approx \frac{(\Delta p)^2}{2m} - \frac{k_0 e^2}{\langle r \rangle} \\ &\approx \frac{\hbar^2}{2m \langle r \rangle^2} - \frac{k_0 e^2}{\langle r \rangle}. \end{aligned}$$

Suurilla etäisyyksillä Coulombin voima $k_0 e^2 / \langle r \rangle$ on hallitseva. Klassisesti elektroni voisi säteillä kaiken potentiaalienergiansa ja törmätä ytimeen. Heisenbergin epätarkkuusperiaatteesta taas seuraa, että liike-energia kasvaa, kun $\langle r \rangle$ pienenee. Lopulta termi $1 / \langle r \rangle^2$ voittaa termin $1 / \langle r \rangle$ ja atomi säilyy stabiilina. Etsitään energian minimi E_{\min} :

$$\left(\frac{\partial E}{\partial \langle r \rangle} \right)_{\langle r \rangle = \langle r_0 \rangle} = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{\langle r_0 \rangle^3} + \frac{k_0 e^2}{\langle r_0 \rangle^2} = 0.$$

Tämä ehto toteutuu, kun

$$\langle r_0 \rangle = \frac{\hbar^2}{k_0 m e^2} = a_0 = \text{Bohrin radan säde.}$$

Ionisaatioenergia on silloin

$$\begin{aligned} |E(\langle r_0 \rangle)| &= \left| \frac{\hbar^2}{2m} \frac{k_0^2 m^2 e^4}{\hbar^4} - \frac{k_0^2 e^2 m e^2}{\hbar^2} \right| \\ &= \frac{k_0^2}{2} \frac{m e^4}{\hbar^2} = 13.6 \text{ eV.} \end{aligned}$$

Koska lasku perustui suuruusluokka-arvioihin, on lukuarvojen yhtäsuuruus sattuma.

Epätarkkuusrelaatio voidaan johtaa myös muiden suureiden välille. Esim. energian ja ajan epätarkkuuksille on voimassa relaatio

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar.$$

Jos hiukkasen energian epätarkkuus on ΔE , niin aikaväli, jonka kuluessa hiukkasen liiketilan voidaan havaita muuttuvan, on suuruusluokkaa $\Delta t \approx \hbar / \Delta E$. Erityisesti, jos $\Delta E = 0$, niin $\Delta t \rightarrow \infty$, eli tila ei muutu. Tällaista tilaa sanotaan stationääriseksi.

5 Schrödingerin yhtälö

5.1 Ajasta riippuva Schrödingerin yhtälö (v. 1926)

Etsitään aaltoyhtälöä, jonka ratkaisuna saadaan materiahiukkasten aaltofunktio.

Aaltoyhtälölle asetettavat vaatimukset:

1. lineaarinen ja homogeeninen aaltofunktion ja sen derivaattojen suhteen, jotta superpositioperiaate toteutuisi.
2. yhtälön kertoimet eivät saa sisältää dynaamisia muuttujia E ja \vec{p} , koska aaltopakettien konstruointi vaatii eri E :n ja \vec{p} :n arvoihin kuuluvien ratkaisujen superponointia.
3. silloin kun aaltosuureet voidaan lausua hiukkassuureiden avulla, tulee hiukkassuureiden toteuttaa hiukkasmekaniikan mukaiset relaatiot.
4. yksinkertaisuus.

Vapaan hiukkasen aaltofunktio on yleisesti muotoa

$$\psi(x, t) = C e^{i(kx - \omega t)}.$$

Huomioiden relaatiot $E = \hbar\omega$ ja $p = \hbar k$ saadaan

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega\psi = \frac{1}{i} \frac{E}{\hbar} \psi$$

ja

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2\psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi.$$

Voidaan siis kirjoittaa

$$\begin{aligned} p^2\psi &= -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \\ E\psi &= i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \end{aligned}$$

Epärelativistisen mekaniikan mukaan vapaalle hiukkaselle on voimassa $E = p^2/2m$, joten

$$0 = \left(E - \frac{p^2}{2m} \right) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}.$$

Vapaan hiukkasen (epärelativistinen) aaltoyhtälö on siis

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}.$$

Jos hiukkaseen vaikuttaa ulkoisia voimia, on $E = p^2/2m + V(x)$, ja saadaan epärelativistisen aaltomekaniikan perusyhtälö, eli *ajasta riippuva Schrödingerin yhtälö*

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}.$$

Periaatteessa (joskaan ei käytännössä) Schrödingerin yhtälö antaa mahdollisuuden kaikkien atomaaristen ilmiöiden (lukuunottamatta magnetismia ja suhteellisuusteoriaa) selittämiseen.

Yleistys kolmeen ulottuvuuteen on suoraviivainen. Tehdään sijoitukset

$$\begin{aligned} p^2 &\rightarrow p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 = \vec{p}^2 \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} &\rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \nabla^2. \end{aligned}$$

Ajasta riippuva Schrödingerin yhtälö on siis

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}.$$

Jos merkitään

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}),$$

voidaan Schrödingerin yhtälö kirjoittaa lyhyesti

$$H\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}.$$

Tässä H on n.s. *Hamiltonin operaattori*

Eräs relativistinen vapaan hiukkasen aaltoyhtälö, n.s. *Klein-Gordonin yhtälö* voidaan "johtaa" analogisesti. Suhteellisuusteorian mukaan on voimassa $E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$. Koska

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = E^2 \psi,$$

voidaan siis kirjoittaa

$$(c^2 \hbar^2 \nabla^2 - m_0^2 c^4) \phi = \hbar^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}.$$

Merkitään symbolilla \square operaattoria

$$\square = -\nabla^2 + \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2}$$

ja symbolilla χ vakiota $m_0 c / \hbar$. Klein-Gordonin yhtälö on tällöin

$$(\square + \chi^2) \phi = 0.$$

Tätä yhtälöä ei ole onnistuttu yleistämään vuorovaikuttavan hiukkasen tapaukseen. Lisäksi Klein-Gordonin yhtälö on sovellettavissa vain spin-0-hiukkasiin (bosoneihin), mutta ei esimerkiksi elektroneihin.

5.2 Ajasta riippumaton Schrödingerin yhtälö

Oletetaan, että hiukkaseen vaikuttava potentiaali V ei riipu ajasta. Tällöin myös Hamiltonin operaattori H on ajasta riippumaton. Olkoon $\Psi(\vec{r}, t)$ ajasta riippuvan Schrödingerin yhtälön ratkaisu, t.s.

$$H\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}.$$

Sijoitetaan tähän yrite

$$\Psi(\vec{r}, t) = T(t)\psi(\vec{r}),$$

jolloin Schrödingerin yhtälö saadaan muotoon

$$\frac{i\hbar}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = \frac{1}{\psi(\vec{r})} H\psi(\vec{r}).$$

Tavanmukainen muuttujien erottamismenettelyssä käytettävä päättely osoittaa, että yhtälön molemmat puolet ovat vakioita, ja että yhteisen vakion arvo on hiukkasen energia E . Saadaan yhtälöpari

$$\begin{aligned} \frac{d(\ln T)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} E \\ \frac{1}{\psi(\vec{r})} H\psi(\vec{r}) &= E. \end{aligned}$$

Ajasta riippuvan osan ratkaisu on

$$T(t) = C e^{-\frac{i}{\hbar} E t} = C e^{-i\omega t},$$

missä ω on aaltoliikkeen kulmataajuus ja $E = \hbar\omega$ ratkaisua vastaava energia. Paikasta riippuvalle osalle $\psi(\vec{r})$ saadaan yhtälö

$$H\psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}).$$

Tämä on *ajasta riippumaton Schrödingerin yhtälö*.

Suuri osa luonnon atomaarisista systeemeistä on stationäärisissä tiloissa, s.o. toteuttaa ajasta riippumattoman Schrödingerin yhtälön. Tämä yhtälö on siten perusta näiden systeemien rakenteen ja siinä tapahtuvien muutosten tutkimiseen.

Hamiltonin operaattorin (potentiaalin V) ominaisuuksista riippuen Schrödingerin yhtälöllä on ratkaisu olemassa vain määrättyillä energian arvoilla. Systemin energia ei siis voi saada mielivaltaisia arvoja. Esim. vetyatomin tapauksessa saadaan Bohrin mallia vastaava energiaspektri.

5.3 Aaltofunktion fysikaalinen tulkinta ja jatkuvuusyhtälö

Jatkuvuus- eli kontinuiteetti yhtälö

Todennäköisyystiheys $\rho = |\psi|^2$ yleensä muuttuu ajan mukana, t.s. $\rho = \rho(\vec{r}, t)$. Vaikka aaltofunktion normitus

$$\int_{\text{kokoa avaruus}} dV |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \int dV \rho(\vec{r}, t) = 1$$

onkin vakio, mielivaltaisessa tilavuudessa V oleva kokonaistodennäköisyys, eli todennäköisyys hiukkasen havaitsemiselle tilavuudessa V ,

$$P_V(t) = \int_V dV \rho(\vec{r}, t),$$

riippuu ajasta. Tässä $dV = d^3r \equiv d\vec{r}$ on kolmiulotteinen tilavuuselementti. Tarkastellaan todennäköisyyden P_V muutosta. Merkitään symbolilla \vec{j} *todennäköisyysvirtaa*, t.s. $\vec{j} \cdot d\vec{a}$ on pinta-alkion $d\vec{a}$ läpi aikayksikössä virtaava todennäköisyys. Tämän virtauksen johdosta hiukkasen havaitsemistodennäköisyys muuttuu aikavälillä dt määrällä

$$dP_{d\vec{a}} = -\vec{j} \cdot d\vec{a} dt.$$

Olkoon S tilavuutta V rajoittava pinta. Todennäköisyyden muutosnopeus koko tilavuudessa V on siis

$$\frac{dP_V(t)}{dt} = - \int_S \vec{j} \cdot d\vec{a} = - \int_V \nabla \cdot \vec{j} dV,$$

missä viimeinen muoto on saatu soveltamalla Gaussin divergenssilauseetta. Sijoittamalla tähän todennäköisyyden P_V eksplisiittinen lauseke saadaan ehto

$$\int_V \left(\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) \right) dV = 0.$$

Koska tämä on voimassa mielivaltaiselle tilavuudelle V , päädytään *kontinuiteetti yhtälöön*

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0.$$

Vastaava yhtälö on voimassa myös klassisessa hydrodynamiikassa (ρ on nesteen tiheys ja \vec{j} materian virtatiheys) ja elektrodynamiikassa (ρ on varaustiheys ja \vec{j} varauksen virtatiheys).

Aaltofunktion fysikaalinen tulkinta

Muodostetaan ajasta riippuvasta Schrödingerin yhtälöstä ja sen kompleksikonjugaatista pari

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi \\ -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V\psi^*. \end{aligned}$$

Kertomalla ylempi yhtälö funktiolla ψ^* ja alempi funktiolla $-\psi$ sekä laskemalla yhtälöt puolittain yhteen saadaan

$$\begin{aligned} i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*). \end{aligned}$$

Tämä voidaan edelleen kirjoittaa muotoon

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) = \nabla \cdot \left[\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right].$$

Vertaamalla kontinueettiyhtälöön $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$ voidaan identifoida:

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}, t) &= \psi^* \psi = \text{todennäköisyystiheys} \\ \vec{j}(\vec{r}, t) &= -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \\ &= \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) \\ &= \text{todennäköisyysvirtatiheys}. \end{aligned}$$

Toisin sanoen $\rho dV = \psi^* \psi d^3r$ on todennäköisyys hiukkasen löytymiselle hetkellä t tilavuuselementistä dV . Todennäköisyysvirtatiheydestä saadaan yksinkertaisella tavalla hiukkasvuo, joka ilmaisee aikayksikössä tietyn pinnan läpäisevien hiukkasten lukumäärän. Hiukkasvuota puolestaan käytetään hiukkasten törmäyprobleemia käsiteltäessä.

6 Dynaamisten muuttujien esitys kvanttimekaniikassa

6.1 Dynaamisten muuttujien odotusarvot

Olkoon x satunnaismuuttuja, joka voi saada jatkuvia arvoja ja $\rho(x)$ muuttujan x normitettu todennäköisyystiheysjakautuma, t.s.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1.$$

Satunnaismuuttujan x odotusarvo eli keskiarvo on

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \rho(x) dx.$$

Jos $f(x)$ on jokin x :n funktio, myös se on satunnaismuuttuja. Funktion $f(x)$ odotusarvo määritellään vastaavasti:

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \rho(x) dx.$$

Kvanttimekaniikassa todennäköisyystiheysjakautuma on $\rho = \psi^* \psi$. Olkoon $F(\vec{r})$ jokin hiukkasen paikasta riippuva dynaaminen suure. Todennäköisyystulkinnan mukaan $F(\vec{r})$ on satunnaismuuttuja. Sen odotusarvo on

$$\begin{aligned} \langle F(\vec{r}) \rangle &= \int F(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d^3r \\ &= \int \psi^*(\vec{r}) F(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3r. \end{aligned}$$

Suure $\langle F(\vec{r}) \rangle$ on siis funktion $F(\vec{r})$ mahdollisten arvojen painotettu keskiarvo painon ollessa todennäköisyys hiukkasen esiintymiselle paikassa \vec{r} , jossa funktiolla on arvo $F(\vec{r})$. Tämä voidaan myös sanoa niin, että $\langle F(\vec{r}) \rangle$ on suunnilleen sama kuin useiden suureen F mittausten keskiarvo.

6.2 Operaattoreista

Suuretta A , joka tietyllä tavalla liittää annettuun funktioon $f(x)$ määrätyn uuden funktion $g(x)$, sanotaan operaattoriksi. Tätä merkitään seuraavasti:

$$Af(x) = g(x).$$

Esim. $A = \frac{d}{dx}$. Kun A :lla operoidaan funktioon $f(x)$, saadaan tulokseksi derivaatta $g(x) = f'(x)$.

Esim. $Af(x) = \int_0^x f(y) dy$. A :n operoidessa funktioon f saadaan tulokseksi f :n integraalifunktio.

Huom. Koska operaattorien määritelmä on erittäin yleinen, operaattoreita koskevat laskusäännöt ovat monimutkaisempia kuin tavallisiin lukuihin liittyvät säännöt.

Kahden operaattorin A ja B välinen *kommutaattori* on

$$[A, B] \equiv AB - BA.$$

Esim. $A = x$ ja $B = d/dx$. Olkoon $\psi(x)$ mielivaltainen (differentioituva) funktio. Nyt

$$\begin{aligned} AB\psi(x) &= A(B\psi(x)) = x \left(\frac{d}{dx} \psi(x) \right) \\ &= x\psi'(x) \end{aligned}$$

ja

$$\begin{aligned} BA\psi(x) &= B(A\psi(x)) = \frac{d}{dx} (x\psi(x)) \\ &= x\psi'(x) + \psi(x). \end{aligned}$$

Vähentämällä nämä puolittain toisistaan saamme

$$\begin{aligned} \left(x \frac{d}{dx} - \frac{d}{dx} x \right) \psi(x) &= AB\psi(x) - BA\psi(x) \\ &= -\psi(x). \end{aligned}$$

Tämä on voimassa kaikille funktioille (ψ oli mielivaltainen). Voimme siis kirjoittaa

$$\left[x, \frac{d}{dx} \right] = -1.$$

Operaattori A on *lineaarinen*, jos kahdelle mielivaltaiselle funktiolle, ψ_1 ja ψ_2 , sekä kahdelle (kompleksi)luvulle, c_1 ja c_2 , on voimassa

$$A(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1A\psi_1 + c_2A\psi_2.$$

Ellei toisin mainita, oletamme jatkossa operaattoreiden olevan lineaarisia. Funktio ψ_a , joka toteuttaa A :n *ominaisarvoyhtälön*

$$A\psi_a = a\psi_a$$

ja normitusehdon

$$\int \psi_a^* \psi_a d^3r = 1,$$

on operaattorin A normitettu *ominaisfunktio* ja a on ominaisfunktion ψ_a liittyvä *ominaisarvo* (tai kääntäen: funktio ψ_a on operaattorin A

ominaisarvoon a liittyvä ominaisfunktio). Hyväksyttävän ratkaisun ψ_a on oltava äärellinen, jatkuva ja yksikäsitteinen.

Esim. 1. Funktio $f(x) = e^{2x}$ toteuttaa yhtälön

$$\frac{\partial}{\partial x} e^{2x} = 2e^{2x}.$$

Funktio e^{2x} on siis operaattorin $\partial/\partial x$ ominaisarvoon 2 liittyvä ominaisfunktio.

Esim. 2. Olkoon ϕ napakoordinaatistoon liittyvä kulmamuuttuja. Määritetään operaattorin $\partial/\partial\phi$ ominaisarvot ja ominaisfunktiot. Näiden on toteutettava yhtälö

$$\frac{\partial\psi(\phi)}{\partial\phi} = \lambda\psi(\phi).$$

Tämän differentiaaliyhtälön ratkaisuna ovat funktiot

$$\psi = Ce^{\lambda\phi}.$$

Koska ratkaisun tulee olla yksikäsitteinen, täytyy ψ :n toteuttaa ehto

$$\psi(\phi) = \psi(\phi + 2\pi),$$

eli

$$Ce^{\lambda\phi} = Ce^{\lambda\phi + \lambda 2\pi}.$$

Täytyy siis olla voimassa

$$e^{\lambda 2\pi} = 1,$$

joten $\lambda = im$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Ominaisfunktiot ovat siis

$$\psi_m(\phi) = Ce^{im\phi},$$

ja vastaavat ominaisarvot $\lambda_m = im$. Ominaisfunktio voidaan myös normittaa:

$$1 = \int_{\text{määr. alue}} \psi^*(\phi)\psi(\phi) d\phi = |C|^2 \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi|C|^2.$$

Normitetut ominaisfunktiot ovat siten

$$\psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}.$$

Useimmiten ominaisarvot määräytyvät reunaehtosovituksista (kuten tavallaan edellisessä esimerkissäkin).

Yleensä ominaisarvoyhtälöllä on suuri joukko ratkaisuja. Jos samaan ominaisarvoon a liittyy k toisistaan riippumatonta ominaisfunktiota, on a k -kertaisesti *degeneroitunut ominaisarvo*.

Olkoon ψ jokin funktio ja A jokin operaattori. Operaattorin A *odotusarvo tilassa* ψ on

$$\langle A \rangle \equiv \int \psi^* A \psi d^3r.$$

Operaattori A on *Hermite'n operaattori*, jos sen odotusarvo kaikille neliöllisesti integroituvilla funktioilla, t.s. funktioilla ψ , joille

$$\left| \int \psi^* \psi d^3r \right| < \infty,$$

on reaalinen. Hermite'n operaattori A toteuttaa siis ehdon

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \int \psi^* A \psi d^3r \\ &= \int (A\psi)^* \psi d^3r \\ &= \langle A \rangle^* \end{aligned}$$

kun ψ on mielivaltainen aaltofunktio.

Nähdään, että *hermiittisen operaattorin ominaisarvot ovat reaalisia*. Olkoon a operaattorin A jokin ominaisarvo ja ψ_a vastaava normitettu ominaisfunktio.

Nyt

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \int \psi_a^* A \psi_a d^3r = \int \psi_a^* a \psi_a d^3r \\ &= a \int \psi_a^* \psi_a d^3r = a, \end{aligned}$$

joten *operaattorin odotusarvo operaattorin ominaistilassa on vastaava ominaisarvo*. Jos lisäksi A on hermiittinen, eli

$$a = \langle A \rangle = \langle A \rangle^* = a^*,$$

on ominaisarvo a reaalinen.

6.3 Dynaamiset muuttujat operaattoreina

Kvanttimekaniikassa dynaamisia muuttujia vastaavat operaattorit. Koska dynaamisten muuttujien odotusarvot ovat mitattavia suureita ja siten reaalisia, täytyy niitä vastaavien operaattoreiden olla hermiittisiä. Hiukkasen dynaamisia muuttujia \vec{r} ja \vec{p} sekä kokonaisenergiaa E vastaavat kvanttimekaniikassa operaattorit \vec{r} , $-i\hbar\nabla$ ja $i\hbar\partial/\partial t$. Muut dynaamiset suureet saadaan sijoittamalla \vec{r} :n ja \vec{p} :n operaattoriesitys vastaaviin klassisiin lausekkeisiin.

Suure	Klassinen lauseke	Kvanttimekaniikan operaattori
energia	E	$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
paikka	\vec{r}	$\hat{\vec{r}} = \vec{r}$
liikemäärä	\vec{p}	$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla$
potentiaalienergia	$V(\vec{r})$	$\hat{V}(\vec{r}) = V(\vec{r})$
kineettinen energia	$T = \frac{p^2}{2m}$	$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$
kokonaisenergia	$T + V = E$	$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$ = Hamiltonin oper.
impulssimomentti	$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ $L_x = yp_z - zp_y$	$\hat{\vec{L}} = -i\hbar \vec{r} \times \nabla$ $\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$
yleisesti	$f(\vec{r}, \vec{p})$	$\hat{f} = f(\vec{r}, -i\hbar \nabla)$

7 Schrödingerin yhtälön ratkaiseminen

Schrödingerin yhtälön ratkaisun tulee olla

1. äärellinen, yksikäsitteinen ja jatkuva paikan funktio.
2. paikallisesti rajoitetuille systeemeille kvadraattisesti integroitava; s.o. jos ψ on ratkaisu, täytyy olla

$$\int_{\text{avaruus}} \psi^* \psi dV < \infty.$$

3. Mikäli potentiaalin mahdolliset epäjatkuvuuskohdat ovat äärellisiä, on aaltofunktion 1. derivaatta jatkuva. Koska derivaatan jatkuvuus implikoi funktion jatkuvuuden, tästä ehdosta seuraa ensimmäinen ehto. Jos potentiaalilla on äärettömän suuri epäjatkuvuus, on aaltofunktion edelleen oltava jatkuva, mutta derivaatalla voi olla äärellinen epäjatkuvuus.

Osittaisdifferentiaaliyhtälöiden teoriasta tiedetään, että ehtoja 1–3 täyttäviä ratkaisuja ei ole olemassa kaikilla energian E arvoilla. Schrödingerin yhtälö on siis itseasiassa ominaisarvoyhtälö. Sen ratkaiseminen on ominaisarvo-, ominaisfunktioparien (E_a, ψ_a) etsintää.

7.1 Äärettömän syvä potentiaaliuoppa

Tarkastellaan m massaista hiukkasta potentiaalissa

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -a \leq x \leq a \\ \infty, & \text{muulloin.} \end{cases}$$

Ajasta riippumaton Schrödingerin yhtälö on

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

Alueessa $-a \leq x \leq a$ on $V(x) = 0$, jolloin

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

missä $k^2 = 2mE/\hbar^2$.

Alueen $-a \leq x \leq a$ ulkopuolella täytyy olla $\psi(x) = 0$, sillä muutoin E olisi ääretön.

Koska aaltofunktion on oltava jatkuva, on sen toteutettava ehdot

$$\psi(a) = \psi(-a) = 0. \tag{1}$$

Differentiaaliyhtälön $\psi'' + k^2\psi = 0$ yleinen ratkaisu on

$$\psi = A \cos kx + B \sin kx.$$

Jatkuvuusehdot (1) toteutuvat, mikäli

a) $B = 0$ ja $\cos ka = 0$

tai

b) $A = 0$ ja $\sin ka = 0$.

Tapaus a)

Nyt $\cos ka = 0$, joten

$$ka = \frac{n\pi}{2}, \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

Vastaavat energiat ovat

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{4a^2} \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8ma^2} \end{aligned}$$

ja ominaisfunktiot

$$\psi_n(x) = A \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

Normitusehdesta

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-a}^a \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx \\ &= \frac{1}{k} \int_{-ka}^{ka} A^2 \left(\frac{1}{2} y + \frac{1}{4} \sin 2y \right) dy \\ &= A^2 a \end{aligned}$$

seuraa, että $A = 1/\sqrt{a}$. Normitetut ominaisfunktiot ovat siis

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right); \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

Nämä aaltofunktiot ovat symmetrisiä, t.s.

$$\psi_n(-x) = \psi_n(x).$$

Tapaus b)

Nyt $\sin ka = 0$, joten

$$ka = \frac{n\pi}{2}, \quad n = 2, 4, 6, \dots$$

Energian ominaisarvot ovat

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8ma^2}$$

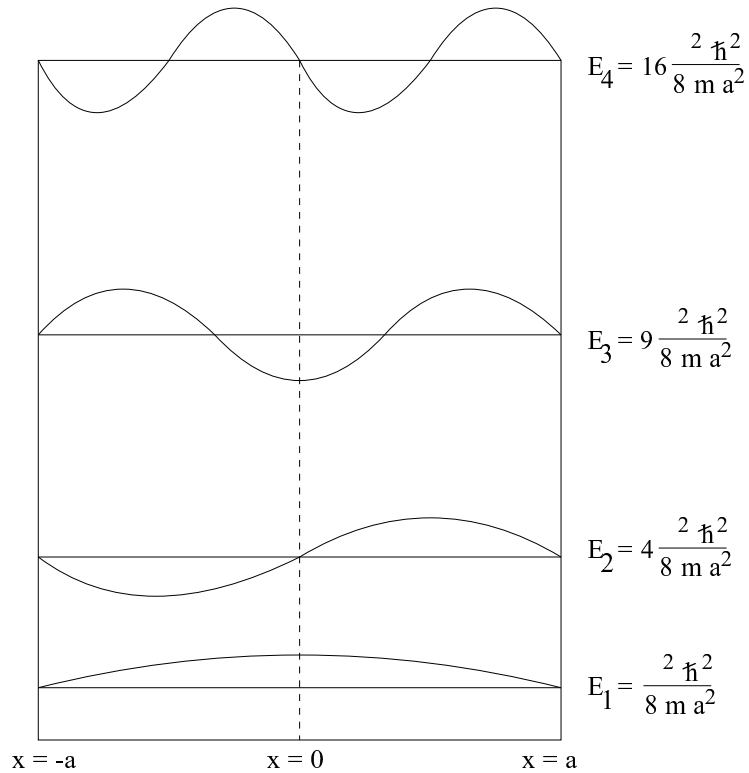
ja ominaisfunktiot

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= B \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), \quad n = 2, 4, 6, \dots \end{aligned}$$

Nämä aaltofunktiot ovat antisymmetrisiä, t.s.

$$\psi_n(-x) = -\psi_n(x).$$

Huom. $n = 0$ ei tule kysymykseen, sillä silloin olisi $k = 0$ eli $\psi = 0$ ja edelleen $\rho(x) = 0$.



7.2 Porraspotentiaali

Tutkitaan, mitä tapahtuu, kun vapaasti etenevä hiukkanen kohtaa porraspotentiaalin

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ E_0, & x > 0. \end{cases}$$

Esimerkiksi metallin johde-elektroni kokee metallin pinnan pyöristettynä porraspotentiaalina.

Ratkaistaan Schrödingerin yhtälö

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

erikseen tapauksissa $E < E_0$ ja $E > E_0$.

1. $E < E_0$

Alue $x \leq 0$

Nyt $V(x) = 0$ ja Schrödingerin yhtälö

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1 = 0,$$

eli

$$\psi_1'' + k^2\psi_1 = 0, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \in \mathcal{R}.$$

Tämän yleinen ratkaisu on muotoa

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

Alue $x > 0$

Nyt $V(x) = E_0$ ja Schrödingerin yhtälö

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m(E - E_0)}{\hbar^2}\psi_2 = 0$$

eli

$$\psi_2'' - \alpha^2\psi_2 = 0, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m(E_0 - E)}{\hbar^2}} \in \mathcal{R}.$$

Tämän ratkaisufunktiot ovat $e^{\pm\alpha x}$, joista voidaan hyväksyä vain x :n vähenevä funktio (aaltofunktion äärellisysehto)

$$\psi_2(x) = Ce^{-\alpha x}.$$

Aaltofunktio kokonaisuudessaan on

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \begin{cases} \psi_1(x), & x \leq 0 \\ \psi_2(x), & x > 0 \end{cases} \\ &= \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x \leq 0 \\ Ce^{-\alpha x}, & x > 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Vakiot A , B ja C määräytyvät ψ :n ja ψ' :n jatkuvuudesta:

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= \psi_2(0) \\ \psi_1'(0) &= \psi_2'(0) \end{aligned}$$

eli

$$\begin{aligned}A + B &= C \\ ik(A - B) &= -\alpha C\end{aligned}$$

Kertomalla ylempi yhtälö α :lla ja laskemalla yhtälöt puolittain yhteen saadaan

$$(\alpha + ik)A = (ik - \alpha)B,$$

josta

$$B = \frac{ik + \alpha}{ik - \alpha}A = -\frac{(ik + \alpha)^2}{k^2 + \alpha^2}A.$$

Vastaavasti voidaan kerroin C lausua A :n avulla

$$\begin{aligned}C &= A + B = \frac{ik - \alpha + ik + \alpha}{ik - \alpha}A = \frac{2ik}{ik - \alpha}A \\ &= -\frac{2ik(ik + \alpha)}{k^2 + \alpha^2}A.\end{aligned}$$

Aaltofunktio on nyt

$$\psi(x) = \begin{cases} A \left(e^{ikx} - \frac{(ik + \alpha)^2}{k^2 + \alpha^2} e^{-ikx} \right), & x \leq 0 \\ -A \frac{2ik(ik + \alpha)}{k^2 + \alpha^2} e^{-\alpha x}, & x > 0. \end{cases}$$

Vasemmalta tulevan aallon intensiteetin suhde vasemmalle lähtevän heijastuneen aallon intensiteettiin on

$$\begin{aligned}\frac{|A|^2}{|B|^2} &= \left| \frac{ik - \alpha}{ik + \alpha} \right|^2 = \left(\frac{ik - \alpha}{ik + \alpha} \right) \left(\frac{-ik - \alpha}{-ik + \alpha} \right) \\ &= 1,\end{aligned}$$

t.s. heijastuminen on täydellistä.

Suhteellinen (normittamaton) todennäköisyysstiheys on

$$\rho(x) = \begin{cases} 2 \left(1 + \frac{k^2 - \alpha^2}{k^2 + \alpha^2} \cos 2kx + \frac{2\alpha k}{k^2 + \alpha^2} \sin 2kx \right), & x \leq 0 \\ \frac{4k^2}{k^2 + \alpha^2} e^{-2\alpha x}, & x > 0. \end{cases}$$

2. $E > E_0$

Alueessa $x \leq 0$ ratkaisu on kuten edellä:

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

Alueessa $x > 0$ saamme Schrödingerin yhtälön muotoon

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \kappa^2\psi_2 = 0,$$

missä

$$\kappa^2 = \frac{2m(E - E_0)}{\hbar^2} > 0.$$

Tässä alueessa ei voi olla vasemmalle liikkuvia hiukkasia, joten

$$\psi_2(x) = C e^{i\kappa x}.$$

Jatkuvuusehdot ovat nyt

$$\begin{aligned}\psi_1(0) &= \psi_2(0) \\ \psi_1'(0) &= \psi_2'(0)\end{aligned}$$

eli

$$\begin{aligned}A + B &= C \\ k(A - B) &= \kappa C.\end{aligned}$$

Kertoimet B ja C voidaan lausua A :n avulla:

$$\begin{aligned}B &= \frac{k - \kappa}{k + \kappa} A \\ C &= \frac{2k}{k + \kappa} A.\end{aligned}$$

Aaltofunktiot ovat siis

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A \left(e^{ikx} + \frac{k - \kappa}{k + \kappa} e^{-ikx} \right) \\ \psi_2(x) &= \frac{2k}{k + \kappa} A e^{i\kappa x}.\end{aligned}$$

Hiukkasvuo Φ on pinta-alayksikön läpi aikayksikössä kulkeneiden hiukkasten lukumäärä, t.s.

$$\Phi = \frac{\rho \Delta V}{\Delta t \mathcal{A}} = \frac{\rho \Delta t v \mathcal{A}}{\Delta t \mathcal{A}} = v\rho.$$

Nopeus v voidaan lausua aaltovektorin avulla

$$v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m},$$

ja tiheys on verrannollinen aaltofunktion itseisarvon neliöön.

Vasemmalta porraspotentiaalia lähestyvän hiukkasvuon tiheys on siten verrannollinen suureeseen $\frac{\hbar k}{m} |A|^2$, pisteestä heijastuneen vuon tiheys $\propto \frac{\hbar k}{m} |B|^2$ ja sen läpäisseen vuon tiheys $\propto \frac{\hbar \kappa}{m} |C|^2$. Heijastuskerroin R on niin ollen

$$R = \frac{v_1 |B|^2}{v_1 |A|^2} = \left| \frac{k - \kappa}{k + \kappa} \right|^2$$

ja läpäisykerroin

$$T = \frac{v_2|C|^2}{v_1|A|^2} = \frac{\kappa}{k} \left(\frac{2k}{k + \kappa} \right)^2 = \frac{4k\kappa}{(k + \kappa)^2}.$$

Nämä kertoimet toteuttavat ehdon

$$R + T = 1,$$

t.s. hiukkanen joko heijastuu tai läpäisee potentiaaliportaan.

Huom. Klassisen mekaniikan mukaan kaikki hiukkaset etenevät alueeseen $x > 0$ vauhtiaan hidastaen.

Huom. Tässä probleemassa hiukkasen energia ei ole kvantittunut, koska hiukkasen liikkuma-alue ei ole rajoitettu.

7.3 Harmoninen oskillaattori

Harmonisen oskillaattorin klassinen liikeyhtälö on

$$m\ddot{x} + kx = 0.$$

Tämän ratkaisut ovat muotoa

$$x = A \sin(\omega t + \delta),$$

missä $\omega = \sqrt{k/m}$ ja A on värähtelyn amplitudi. Klassinen kokonaisenergia on

$$E_{\text{kl}} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}kA^2.$$

Potentiaalienergia on

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2.$$

Klassisesti hiukkasen maksimipoikkeama $|x|_{\text{max}} = A$ tasapainoasemasta $x = 0$ toteuttaa siis yhtälön

$$\frac{1}{2}kx_{\text{max}}^2 = E_{\text{kl}}.$$

Harmonisen oskillaattorin Schrödingerin yhtälö on

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right) \psi.$$

Osoitetaan, että funktio

$$\psi(x) = e^{-ax^2}$$

on tämän yhtälön ratkaisu. Nyt

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dx} &= -2axe^{-ax^2} \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} &= (4a^2x^2 - 2a)e^{-ax^2}. \end{aligned}$$

Sijoitetaan toisen derivaatan lauseke Schrödingerin yhtälöön, jolloin saadaan

$$(-2a + 4a^2x^2)e^{-ax^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right) e^{-ax^2}.$$

Kirjoitetaan tämä muotoon

$$\left(4a^2 - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} \right) x^2 + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - 2a \right) = 0.$$

Jotta tämä olisi voimassa kaikilla x :n arvoilla, täytyy olla

$$\begin{aligned} 4a^2 &= \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} \\ 2a &= \frac{2mE}{\hbar^2} \end{aligned}$$

eli

$$\begin{aligned} a &= \frac{m\omega}{2\hbar} \\ a &= \frac{mE}{\hbar^2}. \end{aligned}$$

Energialle saadaan nyt lauseke

$$E = \frac{\hbar^2 a}{m} = \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right) = \frac{1}{2}\hbar\omega.$$

Voidaan osoittaa, että tämä on harmonisen oskillaattorin alin mahdollinen energia, n.s. *nollapiste-energia*. Perustilassa on siis

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\ E_0 &= \frac{1}{2}\hbar\omega. \end{aligned}$$

Seuraavan viritystilän aaltofunktio ja vastaava energia osoittautuvat olevan

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= xe^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\ E_1 &= \frac{3}{2}\hbar\omega. \end{aligned}$$

Yleisesti harmoniselle oskillaattorille on voimassa

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= f_n(x)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\ E_n &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned}$$

missä $f_n(x)$ on polynomi, jossa x :n korkein potenssi on n . Kahden vierekkäisen energiatilan erotus on siis $\hbar\omega$. Siirtyessään tietyltä energiatilalta

lähinnä alemmalle energiatilalle harmoninen oskillaattori emittoi fotoneita, joiden frekvenssi on oskillaattorin klassinen frekvenssi.

Huom. Harmonisen oskillaattorin todennäköisyysjakautuma ulottuu aina klassisesti kielletylle alueelle. Todennäköisyysjakautuma lähestyy nollaa kuten e^{-2ax^2} rajapisteiden ulkopuolella ja sillä on $n + 1$ maksimia klassisesti sallitulla intervallilla.

Harmoninen oskillaattori on moniin tilanteisiin soveltuva hyvä approksimaatio. Olkoon $V(x)$ hiukkaseen vaikuttava potentiaali ja x_c hiukkasen klassinen tasapainoasema tässä potentiaalissa. Kehitetään $V(x)$ potenssisarjaksi tasapainoaseman läheisyydessä:

$$\begin{aligned} V(x) &= V(x_c) + \left(\frac{dV(x)}{dx} \Big|_{x=x_c} \right) (x - x_c) \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2V(x)}{dx^2} \Big|_{x=x_c} \right) (x - x_c)^2 + \dots \\ &= V(x_c) + \frac{1}{2}k(x - x_c)^2 + \dots \end{aligned}$$

Tässä

$$\frac{dV(x)}{dx} \Big|_{x=x_c} = 0 \text{ (tasapainoasema)}$$

ja

$$k = \frac{d^2V(x)}{dx^2} \Big|_{x=x_c} \text{ (jousivakio).}$$

Esim. Kahden vuorovaikuttavan atomin potentiaalienergia.

- Suurilla etäisyyksillä sähköstaattiset voimat aiheuttavat atraktion.
- Kun atomit tulevat lähemmäksi toisiaan, niin elektronit järjestäytyvät siten, että elektronien ja ytimien välinen Coulombin voima maksimoituu.
- Lyhyillä etäisyyksillä esiintyy voimakas repulsio. Tämä on puhtaasti kvanttimekaaninen ilmiö, joka estää elektroniverhojen suuren päällekkäisyyden.

Seurauksena on ensimmäisessä approksimaatiossa harmonisen oskillaattorin potentiaali tasapainoetäisyyden lähistöllä.

7.4 Liike keskeisvoimkentässä

Tarkastellaan hiukkasta pallosymmetrisessä potentiaalissa

$$V(\vec{r}) = V(r).$$

Hiukkasen Schrödingerin yhtälö on

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(r)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (1)$$

Koska potentiaali on pallosymmetrinen, on syytä siirtyä pallokoordinaatteihin:

$$\begin{aligned} x &= r \sin \vartheta \cos \varphi \\ y &= r \sin \vartheta \sin \varphi \\ z &= r \cos \vartheta. \end{aligned}$$

Operaattorin ∇^2 esitys tässä koordinaatistossa on

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \\ &\quad \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \end{aligned}$$

Merkitään

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

missä

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

on impulssimomenttioperaattori. Operaattori ∇^2 on nyt

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \vec{L}^2.$$

Sijoittamalla tämä yhtälöön (1) ja kertomalla se puolittain termillä $-\frac{2m}{\hbar^2}r^2$ saadaan Schrödingerin yhtälö muotoon

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) \right] \psi(r, \vartheta, \varphi) &= \\ \frac{1}{\hbar^2} \vec{L}^2 \psi(r, \vartheta, \varphi). \end{aligned}$$

Tässä yhtälössä saadaan muuttujat erotettua yritteellä

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi).$$

Schrödingerin yhtälö on tällöin

$$\begin{aligned} \frac{1}{R(r)} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) \right] R(r) &= \\ \frac{1}{\hbar^2 Y(\vartheta, \varphi)} \vec{L}^2 Y(\vartheta, \varphi) = \lambda. \end{aligned}$$

Tavanmukainen päättely osoittaa, että λ ei riipu muuttujista r , ϑ ja φ .

Tarkastellaan ensin kulmaosaa $Y(\vartheta, \varphi)$. Tämä toteuttaa yhtälön

$$\vec{L}^2 Y(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 \lambda Y(\vartheta, \varphi). \quad (2)$$

Tässä yhtälössä voidaan edelleen kulmamuuuttujat erottaa yritteellä

$$Y(\vartheta, \varphi) = \Theta(\vartheta)\Phi(\varphi).$$

Käyttämällä operaattorin \vec{L}^2 eksplisiittistä esitystä yhtälö (2) saadaan muotoon

$$\frac{1}{\Theta(\vartheta)} \left[\sin \vartheta \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d}{d\vartheta} \right) + \lambda \sin^2 \vartheta \right] \Theta(\vartheta) = -\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{d^2}{d\varphi^2} \Phi(\varphi) = m^2,$$

missä m^2 on vakio (riippumaton kulmista ϑ ja φ).

Funktion $\Phi(\varphi)$ on siis toteutettava yhtälö

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + m^2 \Phi = 0.$$

Tämän ratkaisut ovat

$$\Phi_m = e^{\pm im\varphi}.$$

Aaltofunktion $\psi(r, \vartheta, \varphi)$ on oltava yksikäsitteinen. Täytyy siis olla voimassa $\psi(r, \vartheta, \varphi) = \psi(r, \vartheta, \varphi + 2\pi)$, eli

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

Parametri m voi siten saada vain kokonaislukuarvoja:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Kulmaosaa $\Theta(\vartheta)$ hallitseva yhtälö saadaan muotoon

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) + \left[\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right] \Theta = 0.$$

Tämä on n.s. *Legendren differentiaaliyhtälö*. Osoittautuu, että fysikaalisesti hyväksyttäviä (äärellisiä) ratkaisuja saadaan vain jos

$$\lambda = l(l+1)$$

ja

$$l = |m|, |m| + 1, |m| + 2, \dots,$$

t.s. l on kokonaisluku. Muilla parametrin λ arvoilla ratkaisulla on äärettömyyskohdat kun $\vartheta = 0$ ja/tai $\vartheta = \pi$. Fysikaalisesti hyväksyttävät

ratkaisut ovat muuttujan $z = \cos \vartheta$ l -asteisia polynomeja, n.s. Legendren liittopolynomeja P_l^m :

$$P_l^m(z) = (1-z^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m P_l(z)}{dz^m}$$

$$P_l(z) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dz^l} (z^2-1)^l.$$

Tässä funktiot $P_l(z)$ ovat Legendren polynomeja. Schrödingerin yhtälön kulmaosan (2) ratkaisu Y riippuu siis kahdesta kokonaisluvusta, l ja m . Jos l on kiinnitetty, voi m saada arvot $0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$, sillä l :n minimiarvo oli m . Näitä ratkaisuja, joita merkitään symbolilla Y_l^m ,

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = P_l^{|m|}(\cos \vartheta) e^{im\varphi}$$

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

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

sanotaan *pallofunktioiksi*.

Fysikaalisesti pallofunktiot Y_l^m ovat siis

- operaattorin \vec{L}^2 , eli impulssimomentin neliön, ominaisarvoon $\hbar^2 l(l+1)$, missä $l = 0, 1, 2, \dots$, kuuluvia ominaistiloja.
- Voidaan osoittaa (harj.), että ne ovat myös impulssimomentin z -komponentin $L_z = -i\hbar(\vec{r} \times \nabla)_z$ ominaisarvoon $m\hbar$, missä $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$, kuuluvia ominaistiloja.

Schrödingerin yhtälön r :stä riippuva osa on

$$\frac{1}{R(r)} \left[\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) \right] R(r) = \lambda = l(l+1).$$

Sijoittamalla tähän $R(r) = u(r)/r$ saadaan radiaalinen yhtälö (kanoniseen) muotoon

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[(E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u(r) = 0.$$

Tarkastellaan atraktiivista atomiytimen aiheuttamaa Coulombin kenttää, t.s.

$$V(r) = -\frac{k_0 Z e^2}{r},$$

jolloin radiaalinen yhtälö on (jatkossa $k_0 = 1$)

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\left(E + \frac{Z e^2}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u(r) = 0. \quad (3)$$

Tarkastellaan tämän asymptoottisia, $r \rightarrow \infty$, ratkaisuja. Yhtälö tulee rajalla $r \rightarrow \infty$ muotoon

$$\frac{d^2u}{dr^2} - \kappa^2 u = 0,$$

missä

$$\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Asymptoottisen yhtälön ratkaisut ovat

$$u(r) = e^{\pm\kappa r}.$$

$E > 0$ κ on imaginaarinen, joten $u(r)$ on vaimenematon oskilloiva funktio.

$E < 0$ κ on reaalinen. Aaltofunktion äärellisyysehdestä johtuen vain ratkaisu $e^{-\kappa r}$ on hyväksyttävä, jolloin $u(r) \rightarrow 0$, kun $r \rightarrow \infty$. Elektroni havaitaan siis aina ytimen läheisyydessä. Elektroni ja ydin muodostavat sidotun tilan.

Klassisesti

$E > 0$ Elektroni voi liikkua kaikkialla, sillä $T = E - V(r) = E + Ze^2/r > 0$ kaikkialla.

$E < 0$ Elektroni ei voi loitota etäisyyttä a , missä a toteuttaa yhtälön $E + Ze^2/a = 0$, kauemmaksi, sillä arvoilla $r > a$ olisi $T < 0$.

Yhtälö (3) voidaan ratkaista eksaktisti. Osoittautuu, että fysikaalisesti hyväksyttävä ratkaisu saadaan vain, jos

- $u(r)$ on muuttujan r n -asteinen polynomi, jonka
- korkeimman potenssin n on toteutettava ehto $n \geq l + 1$. Tämä voidaan myös tulkita siten, että jos $n = 1, 2, 3, \dots$ on annettu, on kvanttiluvun l toteutettava ehto $l = 0, 1, \dots, n - 1$.
- kokonaisluku n toteuttaa ehdon $n = \frac{Ze^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2|E|}}$, t.s.

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2} = -\frac{mc^2}{2} \left(\frac{Z\alpha}{n} \right)^2.$$

Radiaalinen aaltofunktio tulee olemaan

$$u_{n,l}(r) = C_{n,l} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^{l+1} e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0} \right),$$

missä $C_{n,l}$ on normitustekijä ja $a_0 = \hbar^2/(Zme^2)$ Bohrin radan säde. Funktio L_{n-l-1}^{2l+1} on n.s. *Laguerren liittopolynomi*:

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

$$A_{k+1} = \frac{l+k+1-n}{k(k+2l+1)} A_k.$$

Vedyn kaltaisen atomin aaltofunktio on siten kokonaisuudessaan

$$\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r} u_{n,l}(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi),$$

missä kvanttiluvut n , l ja m voivat saada arvoja

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots \\ l &= 0, 1, \dots, n-1 \\ m &= -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l. \end{aligned}$$

Näistä n määrää energian, l impulssimomentin ja m impulssimomentin z -komponentin.

Vetyatomissa ($Z = 1$) elektronin alimman tilan todennäköisyysjakautuma on

$$\rho_{1,0} = u_{1,0}^2 \propto r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}}.$$

Tämä on maksimissaan, kun $r = a_0$. Toisaalta elektronin keskimääräinen etäisyys ytimestä on

$$\langle r \rangle = \frac{3}{2} a_0.$$

Bohrin säde a_0 ilmaisee siis hyvin atomin koon myös kvanttimekaanisessa kuvauksessa.

Energiaspektri

Kvanttiluku n , eli n.s. *energiakvanttiluku*, ilmaisee energian:

$$E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}.$$

Energiaspektri on siis täsmälleen sama kuin Bohrin mallissa.

Jokaiseen energian arvoon (lukuunottamatta tapausta $n = 1$) liittyy useita kvanttilukujen l ja m mahdollisia arvoja vastaavia tiloja. Energian ominaisarvot ovat siten degeneroituneita. Koska l voi saada arvot $0, 1, \dots, n-1$ ja kutakin l :n arvoa kohden m voi saada $2l+1$ erilaista arvoa $-l, -l+1, \dots, l-1, l$, on energiaan E_n liittyvien tilojen lukumäärä

$$1 + 3 + 5 + \dots + 2(n-1) + 1 = n^2.$$

Energiatila E_n on siis n^2 -kertaisesti degeneroitunut.

8 Spin ja statistiikka

8.1 Bosonit ja fermionit

Jokaiseen alkeishiukkaseen liittyy sisäinen impulssimomentti, n.s. *spin*.

- Hiukkasten spinit tunnetaan kokeellisten havaintojen perusteella.
- Spinin mahdolliset arvot ovat

$$(0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3, \dots) \cdot \hbar.$$

- Sanotaan, että hiukkasen spin on *puolikaslukuinen*, jos se on muotoa $\frac{2n+1}{2}\hbar$, missä n on kokonaisluku $0, 1, 2, \dots$
- Sanotaan, että spin on *kokonaislukuinen*, jos se on $n\hbar$.

Tarkasteltaessa useamman samanlaisen, identtisen, hiukkasen muodostamaa systeemiä osoittautuu, että sen ominaisuudet riippuvat oleellisesti siitä, onko systeemin hiukkasten spin kokonais- vai puolikaslukuinen. Jaetaan hiukkaset kahteen ryhmään:

bosonit Spin kokonaislukuinen, $(0, 1, 2, \dots) \cdot \hbar$.

fermionit Spin puolikaslukuinen, $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots) \cdot \hbar$.

Identtisten hiukkasten muodostaman systeemin kuvaus on oleellisesti erilainen klassisessa fysiikassa ja kvanttimekaniikassa.

Klassinen fysiikka

Identtiset hiukkaset voidaan yksilöidä.

Tarkastellaan esim. kahden identtisen hiukkasen systeemiä. Sovitaan jollakin hetkellä, että nimitämme toista hiukkasta 1:ksi ja toista 2:ksi. Klassisen fysiikan mukaan voimme (ainakin periaatteessa) seurata niiden liikeratoja ja tiedämme aina kumpi hiukkanen on 1 ja kumpi 2, t.s. hiukkaset ovat yksilöitävissä.

Kvanttimekaniikka

Samaan fysikaaliseen systeemiin kuuluvat identtiset hiukkaset esiintyvät systeemin määrittelemässä alueessa tietyn todennäköisyysjakautuman mukaan. Havaittaessa hiukkanen paikassa \vec{r} ei voida sanoa, mikä hiukkasista oli kyseessä, sillä kaikilla hiukkasilla on tietty esiintymistodennäköisyys kohdassa \vec{r} .

Identtisiä hiukkasia ei voida yksilöidä.

Tarkastellaan kahta identtistä hiukkasta. Olkoon tätä systeemiä kuvaava aaltofunktio $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$. Todennäköisyystiheys hiukkasten löytymiselle pisteistä \vec{r}_1 ja \vec{r}_2 on $|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2$. Vaihdetaan nyt hiukkaset keskenään, jolloin uusi

aaltofunktio on $\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$. Todennäköisyyssiheyden on kuitenkin säilyttävä ennallaan, joten

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = |\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)|^2.$$

Täytyy siis olla voimassa

$$\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = e^{i\delta} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2).$$

Hiukkasten vaihto aiheuttaa siis aaltofunktioon vaihesiirron δ . Vaihdetaan hiukkaset vielä kerran keskenään:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^{i\delta} \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = e^{2i\delta} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2),$$

joten $e^{2i\delta} = 1$ eli $e^{i\delta} = \pm 1$. Kahden identtisen hiukkasen systeemin aaltofunktiolle on siis voimassa

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \pm \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1).$$

Sanotaan, että aaltofunktio on *symmetrinen* (+-merkki) tai *antisymmetrinen* (-merkki).

Kokeellinen tosiasia (seuraa relativistisesta kvanttimekaniikasta) on, että *identtisten bosonien (fermionien) aaltofunktio on symmetrinen (antisymmetrinen)*

Olkoot systeemin kaksi identtistä hiukasta vuorovaikuttamattomia. Systeemin Hamiltonin operaattori H on tällöin

$$H(1, 2) = H(2, 1) = H(1) + H(2),$$

missä $1(2)$ tarkoittaa kaikkia hiukkaseen $1(2)$ liittyviä muuttujia. Olkoot funktiot $\phi_\alpha(\vec{r})$ operaattorin $H(i)$ ominaisfunktioita alaindeksin edustaessa liiketilaa (tilan kvanttilukuja). Jos toinen hiukkanen on tilassa ϕ_α ja toinen tilassa ϕ_β , niin tulot

$$\phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) \text{ ja } \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1)$$

ovat Hamiltonin $H(1, 2)$ ominaistiloja. Nämä eivät kuitenkaan kelpaa fysikaalista tilaa kuvaaviksi aaltofunktioksi, koska ne eivät ole symmetrisiä eivätkä antisymmetrisiä hiukkasten vaihdon suhteen.

Fysikaaliset aaltofunktiot saadaan tulojen lineaarikombinaatioina:

$$\begin{aligned} \psi_{\alpha\beta}^s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &\propto \phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) + \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1) \\ \psi_{\alpha\beta}^a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &\propto \phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) - \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1). \end{aligned}$$

Jos nyt $\alpha = \beta$, t.s. hiukkaset ovat samassa tilassa, jälkimmäinen yhtälö sanoo, että kahdelle fermionille (antisymmetrinen aaltofunktio) on voimassa

$$\psi_{\alpha\alpha}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0.$$

Tämä ehto tunnetaan *Paulin kieltosääntönä*: *samassa kvanttimekaanisessa tilassa ei voi olla kahta (tai useampaa) identtistä fermionia.*

8.2 Degeneroitunut fermikaasu

Tarkastellaan Paulin kieltoäännön ja Heisenbergin epämääräisyysrelaation sovellutuksena fermikaasua (elektronikaasua) absoluuttisessa nolapisteessä, jolloin kaasun kineettinen energia on minimissään.

Nyt

- kukin elektroni vie kaasun kokonaisvolyymista tilavuuden

$$\Delta \vec{r} = \Delta x \Delta y \Delta z.$$

- kunkin elektronin liikemäärä on paikallistunut impulssiavaruuden elementtiin

$$\Delta \vec{p} = \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z.$$

- Heisenbergin epämääräisyysrelaation mukaan on

$$\Delta \vec{r} \Delta \vec{p} = \Delta x \Delta p_x \Delta y \Delta p_y \Delta z \Delta p_z > \hbar^3.$$

Elektronin kvanttimekaaninen tila:

- elektronin spin $s = 1/2$, joten sen z -komponentti m_s voi olla joko $-1/2$ tai $1/2$.
- elektronin kvanttimekaanisen tilan määrää se avaruuden elementti $\Delta \vec{r}$ ja se liikemääräalue $\Delta \vec{p}$, johon elektroni kuuluu, sekä elektronin spinin z -komponentti.
- Paulin kieltoäännön mukaan samassa kvanttimekaanisessa tilassa voi olla vain yksi elektroni, t.s. *faasiavaruuden* (\vec{r}, \vec{p}) -alkiossa $\Delta \vec{r} \Delta \vec{p}$ voi olla vain kaksi elektronia; spin \uparrow tai \downarrow .

Näin ollen N elektronia vie faasiavaruudesta tilavuuden

$$\frac{N}{2} \hbar^3.$$

Energian ollessa minimissä täytyy impulssiavaruudessa p -säteinen pallo:

$$\frac{N}{2} \hbar^3 = V \cdot \frac{4}{3} \pi p^3.$$

Hiukkastiheydeksi ρ_N saadaan

$$\rho_N = \frac{N}{V} = \frac{8\pi}{3\hbar^3} p^3.$$

Tiheysintervallin $[\rho_N, \rho_N + d\rho_N]$ sisältämä kineettinen energia dT on siten

$$dT = \frac{p^2}{2m} d\rho_N = \frac{8\pi}{2m\hbar^3} p^4 dp,$$

joten kineettinen energia tilavuusyksikköä kohti on

$$\begin{aligned} T &= \int_0^{\rho_N} \frac{p^2}{2m} d\rho_N = \int_0^P \frac{4\pi}{m\hbar^3} p^4 dp \\ &= \frac{4\pi}{5m\hbar^3} p^5. \end{aligned}$$

Sijoittamalla tähän liikemäärä lausuttuna tiheyden avulla, eli

$$p = \left(\frac{3\hbar^3}{8\pi} \rho_N \right)^{\frac{1}{3}},$$

saadaan täydellisesti degeneroituneelle fermikaasulle

$$T = \frac{3\hbar^2}{40m} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \rho_N^{\frac{5}{3}}.$$

Koska paine P on

$$P = - \left(\frac{\partial T_{\text{tot}}}{\partial V} \right)_N = - \left(\frac{\partial(VT)}{\partial V} \right)_N = \rho_N \frac{\partial T}{\partial \rho_N} - T,$$

aiheuttaa degeneroitunut fermikaasu paineen

$$P = \frac{2}{3}T.$$

Esim. valkoisissa kääpiöissä tämä elektronien degeneraatiopaine johtaa stabiiliin tilaan: se estää gravitaatiota luhistamasta tähteä.

Jos tähden massa on kyllin suuri, gravitaatiopaine ylittää degeneroituneen elektronikaasun paineen. Tällöin tähti

- joko luhistuu (mustaksi aukoksi),
- tai muuttuu neutronitähdeksi. Tiheyden ollessa kyllin suuri tapahtuu reaktio $e^- + p \rightarrow n + \nu$, t.s. protonit muuttuvat neutroneiksi. Nämä ovat elektronien tavoin fermioneja, joiden degeneraatiopaine voi stabiloida neutronitähden.

Esim. n.s. Sommerfeldin metallien teoriassa johde-elektronit käyttäytyvät kuten vapaat hiukkaset. V -tilavuuksisen kappaleen kompressibiliteetti K on määritelmänsä mukaan

$$K = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P},$$

ja inkompressibiliteetti B tämän käänteisarvo, t.s.

$$B = -V \frac{\partial P}{\partial V}.$$

Olettaen, että johde-elektronit ovat vastuussa metallin kompressibiliteetistä, ja että tämä elektronisysteemi on likimain absoluuttisessa nollassa, saadaan metallin inkompressibiliteetiksi

$$B = \frac{5}{3}P = \frac{10}{9}T = \frac{\hbar^2}{12m} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{2}{3}} \rho_N^{\frac{5}{3}}.$$

Seuraavassa taulukossa on verrattu y.o. kaavasta laskettuja ja kokeellisia inkompressibiliteetin arvoja (yksikkönä 10^9N/m^2).

Metalli	Laskettu	Mitattu
Li	23.9	11.5
Na	9.23	6.42
K	3.19	2.81
Rb	2.28	1.92
Cs	1.54	1.43
Cu	63.8	134.3
Ag	34.5	99.9
Al	228	76.0

Suurin syy mittausten ja mallin väliseen eroon on, että elektronit eivät ole vapaita: ne vuorovaikuttavat sekä toistensa että metallin ionien kanssa.

Oletus nolalämpötilasta sen sijaan on hyvä. Osoittautuu, että degeneroituneen fermikaasun elektroneista ainoastaan ne, joiden liikemäärä on lähellä maksimia ($\propto \rho_N^{1/3}$) voivat olla vuorovaikutuksessa ympäristönsä kanssa, t.s. edustavat koko elektronisysteemiä. Metallien johde-elektronien tiheydellä näiden elektronien kineettinen energia vastaa kertalukua 10^5K olevaa lämpötilaa. Huoneen lämpötila on tähän verrattuna lähes 0K .

8.3 Alkuaineiden jaksollinen järjestelmä

Monielektronisten atomien käsittelyä helpottaa se, että

- positiivinen varaus ja lähes koko massa on keskittynyt atomin kokoon verrattuna lähes pistemäiseen ytimeen.
- elektronit fermioneina noudattavat Paulin kieltosääntöä.

Atomin elektronikonfiguraatio ilmaisee, kuinka monta elektronia on kussakin pääkvanttiluvun n ja impulssimomenttikvanttiluvun l arvoon liittyvässä tilassa.

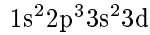
Impulssimomenttitiloista on tapana käyttää nimityksiä:

l	0	1	2	3
tila	s	p	d	f

Tietystä nl -tilasta on tapana käyttää merkintää

$$n\text{tila}^{\text{elektronien lukumäärä}}.$$

Mikäli tilassa on vain yksi elektroni, sitä vastaavaa l :stä ei yleensä merkitä.
 Esim. elektronikonfiguraatio



tarkoittaa, että

n	l	lukumäärä
1	0	2
2	1	3
3	0	2
3	2	1

Kvanttimekaniikka asettaa tiettyjä rajoituksia atomin mahdollisille elektronikonfiguraatioille:

- elektronit asettuvat energeettisesti edullisimpaan konfiguraatioon. Vetyatomissa energia riippuu ainoastaan pääkvanttiluvusta n .
- kun n on kiinnitetty, voi impulssimomentti l saada arvot $0, 1, \dots, n - 1$.
- kuhunkin l :n arvoon voi liittyä $2l + 1$ impulssimomentin z -komponentin m arvoa $-l, -l + 1, \dots, l - 1, l$.
- kussakin (n, l, m) -tilassa voi Paulin kieltoäännöstä johtuen olla korkeintaan 2 elektronia: spin \uparrow ja \downarrow .
- tietyssä (nl) -tilassa voi siten olla korkeintaan $2 \cdot (2l + 1)$ elektronia.

Kaksi ensimmäistä alkuainetta ovat

Atomi	Konfiguraatio	$ B (eV)$
^1H	$1s$	13,6
^2He	$1s^2$	24,6

Seuraava alkuaine on ^3Li . Tämän 3. elektroni ei voi enää sijoittua $1s$ -tilaan, vaan sen on mentävä joko $2s$ - tai $2p$ -tilaan.

Elektronien keskinäiset vuorovaikutukset poistavat samaan n -arvoon liittyvien tilojen degeneraation siten, että eri l :n arvoihin liittyvillä tiloilla on eri energia. Esim. litiumin tapauksessa $2s$ -tilalla on pienempi energia kuin $2p$ -tilalla.

Atomi	Konfiguraatio	$ B (\text{eV})$
${}^3\text{Li}$	$1s^2 2s$	5,4
${}^4\text{Be}$	$1s^2 2s^2$	9,3
${}^5\text{B}$	$1s^2 2s^2 2p$	
${}^6\text{C}$	$1s^2 2s^2 2p^2$	
${}^7\text{N}$	$1s^2 2s^2 2p^3$	
${}^8\text{O}$	$1s^2 2s^2 2p^4$	
${}^9\text{F}$	$1s^2 2s^2 2p^5$	17,4
${}^{10}\text{Ne}$	$1s^2 2s^2 2p^6$	21,6

${}^{11}\text{Na}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s$	5,1
\vdots	täytetään kaikki 3s- ja 3p-tilat (8kpl)	

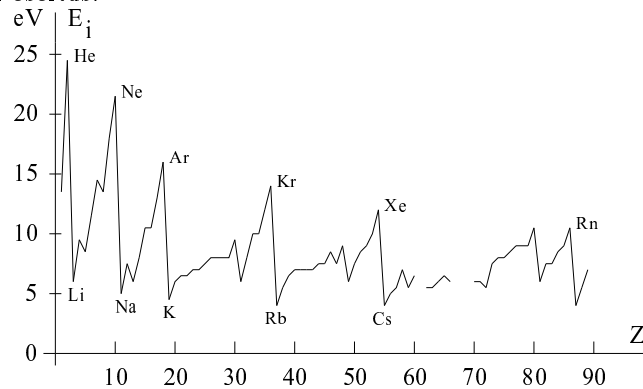
${}^{18}\text{Ar}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
--------------------	----------------------------

Seuraavalla alkuaineella, kaliumilla ${}^{19}\text{K}$, on perustilassa yksi elektroni 4s-tilassa, joka on energialtaan alhaisempi kuin 3d-tila:

Atomi	Konfiguraatio
${}^{19}\text{K}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s$
\vdots	\vdots

Kun lasketaan elektronitiloja vastaava todennäköisyysjakautuma, nähdään, että eri n :n arvoja vastaavat jakutumat ovat pääasiassa nollasta poikkeavia erillisissä alueissa. Tämän vuoksi puhutaan *atomien kuorirakenteesta*.

Atomien ionisaatioenergioiden riippuvuus järjestysluvusta Z on kuorirakenteen kokeellinen osoitus.



Kemiallisissa reaktioissa atomit järjestyvät erilaisiksi molekyyleiksi elektroniverhojensa välisten vuorovaikutusten ansiosta. Koska näiden reaktioiden energiat ovat niin pieniä, että ne eivät vaikuta sisemmillä kuorilla oleviin elektroneihin, määräytyvät alkuaineiden kemialliset ominaisuudet uloimpien vajaan kuorella olevien elektronien liiketilojen perusteella.

Alkuaineiden jaksollinen järjestelmä (Meyer & Mendelejev 1860-luvulla)

- *jalokaasut = D-ryhmä*: suljetut (täydet) kuoret, huono reagointi.
- *alkalimetallit=1A-ryhmä*: ((H), Li, Na, K, Rb, Cs, Fr), yksi s-tilassa oleva elektroni täysien kuorien ulkopuolella; pyrkimys luovuttaa yksi elektroni ja muodostaa positiivinen ioni.
- *halogeenit=7A-ryhmä*: (F, Cl, Br, I, At), täydestä kuoresta puuttuu yksi elektroni; taipumus täyttää uloin kuori ja muodostaa negatiivinen ioni.

Kun ryhmän 1A ja 7A atomit reagoivat keskenään, muodostuu molekyyli, jonka atomien välistä sidosta sanotaan *ionisidokseksi*. Esim. $\text{NaCl}=\text{Na}^+\text{Cl}^-$.

9 Ydinfysiikkaa

9.1 Ytimen rakenneosat ja yleiset ominaisuudet

Merkitään

Z protonien (p) lukumäärä = ytimen järjestysluku.

$A = Z + N$ nukleonien (= protonien+neutronien (n)) lukumäärä = massaluku.

Nukleoneja ytimeen sitovia voimia sanotaan *ydinvoimiksi*. Osoittautuu, että p ja n käyttäytyvät ydinvoimien suhteen samalla tavoin; ne edustavat nukleonin kahta tilaa. Nukleonien massat ovat

$$\begin{aligned}m_n c^2 &= 939.553 \text{MeV} \\m_p c^2 &= 938.259 \text{MeV}.\end{aligned}$$

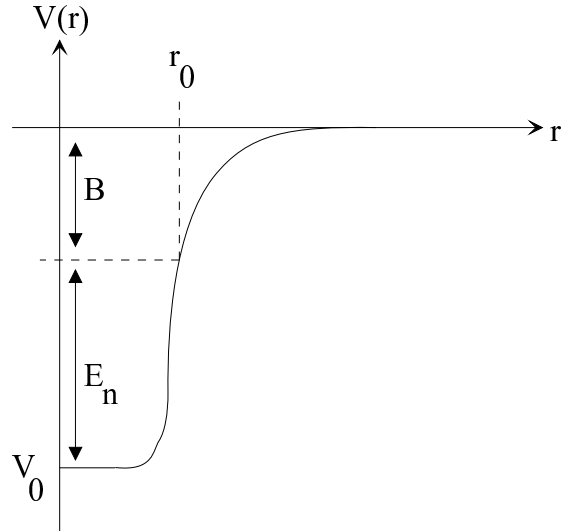
Varausluku Z määrää ydintä vastaavan atomin elektronien lukumäärän, eli sen, mikä alkuaine on kyseessä. Samalla alkuaineella voi olla useita eri *isotooppeja* (sama Z mutta eri N). Esim. vedyn H isotoopit ovat:

rakenne	p+e ⁻	p+n+e ⁻	p+2n+e ⁻
isotooppi	vety	deuterium	tritium
ydin	protoni	deuteroni	tritoni

Epästabiilit ytimet hajoavat emittoiden hiukkasia ja/tai sähkömagneettista säteilyä. Kyseessä on *radioaktiivinen hajoaminen* ja *radioaktiivinen säteily*. Kaikki ytimet, joiden järjestysluku Z on suurempi kuin 83 (vismutti), ovat radioaktiivisia.

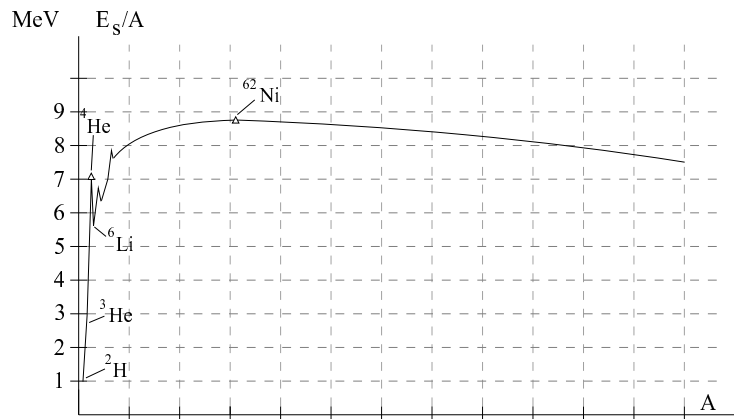
Ydinvoiman ominaisuuksia:

- lyhytkantamainen; kantama $r_0 \approx (1-2)\text{fm}$.
- atraktiivinen, atraktio $|V_0| \approx 30-50\text{MeV}$. Kahden protonin välinen Coulombin repulsio 2fm:n etäisyydellä on 0.7MeV. Tämä on pieni, vaikkakaan ei merkityksetön, ydinvoimaan verrattuna. Coulombin repulsiosta johtuen m.m. raskaissa ytimissä neutroniluku on protonilukua suurempi.



Merkintöjä ja käsitteitä:

- E_n = ytimen potentiaal kentässä olevan nukleonin energia.
- $B = V_0 - E_n$ = nukleonin ytimestä irrottamiseen tarvittava työ eli energia, joka nukleonille on annettava, jotta se voisi irrota ytimestä.
- *Sidosenergia* = energia, joka tarvitaan irrottamaan ytimen kaikki nukleonit ($\approx 8\text{MeV/nukleoni}$).
- *Sidososuus* = (sidosenergia)/(nukleoni).



Ytimen massa on

$$m_{\text{Ydin}} = Zm_p + (A - Z)m_n - |B|/c^2.$$

Koko atomin massa m_A saadaan lisäämällä tähän elektronien massa Zm_e .
Kun vetyatomin massa on

$$m_H \approx m_e + m_p,$$

saadaan irrotustyöksi

$$|B| \equiv c^2 \Delta m = c^2 [Zm_H + (A - Z)m_n - m_A].$$

Suuretta Δm sanotaan *massakadoksi*. Ytimillä, joiden nukleoniluku on $A \approx 100$, on $\Delta m \approx m_p$, ja ytimillä, joilla $A \approx 200$, on $\Delta m \approx 2m_p$.
Ydinenergiaa voi vapautua kahdella tavalla:

- fuusiossa; kahdesta kevyestä ytimestä syntyy yksi raskaampi. Esim. $2D^2 \rightarrow He^4$.
- fissiossa; raskas ydin hajoaa kahdeksi keskiraskaaksi ytimeksi.

9.2 Radioaktiivinen hajoaminen ja ydinreaktiot

Epästabiili ydin voi siirtyä stabiiliin (tai toiseen epästabiiliin) tilaan usealla tavalla:

- *α -hajonnalla*: ytimestä emittoituu He^4 -ydin.
- *β -hajonnalla*: ytimestä emittoituu e^- .
- *spontaanilla fissiolla*: ydin hajoaa kahdeksi kevyemmäksi ytimeksi, ja useimmiten myös muutamaksi neutroniksi.
- *γ -emissiolla*: ydin siirtyy stationääriseltä tilalta toiselle emittoiden γ -kvantin (fotonin), jonka energia on kertalukua keV–MeV.

Kaikkien atomaaristen ja subatomaaristen hajoamisten on todettu noudattavan *hajoamislakia*

$$N = N_0 e^{-\lambda t}.$$

Tässä N ja N_0 ovat epästabiilien ytimien lukumäärät hetkellä t ja 0. Keskimääräinen elinaika on

$$\tau = \frac{1}{\lambda}.$$

Puoliintumisaika $t_{1/2}$ saadaan yhtälöstä

$$\frac{1}{2}N_0 = N_0 e^{-\lambda t_{1/2}},$$

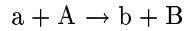
eli

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = 0.62\tau.$$

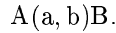
Puoliintumisaika on epästabiilille tilalle ominainen suure, joka tilasta riippuen vaihtelee suuresti:

$$10^{-23}\text{s} \lesssim t_{1/2} \lesssim 10^{31}\text{y}.$$

Tarkastellaan ydinreaktiota, jossa hiukkanen a törmää ytimeen A tuottaen hiukkasen b ja ytimen B . Tätä reaktiota merkitään joko



tai



Jos $m_b + m_B > m_a + m_A$, niin törmäävän hiukkasen energian on oltava n.s. kynnysenergiaa suurempi.

Jos $m_a + m_A > m_b + m_B$, niin reaktiossa vapautuu energiaa. Vapautuva energia eli reaktion Q -arvo on

$$Q = (m_a + m_A - m_b - m_B)c^2.$$

Reaktion tapahtumatodennäköisyyttä kuvaa vaikutusala σ :

$$N_{bB} = N_A \phi_a \sigma_{aA \rightarrow bB}.$$

Tässä

N_{bB} on reaktioiden lukumäärä/aikayksikkö.

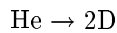
N_A on kohtioytimien lukumäärä.

ϕ_a on ammushiukkasten vuon tiheys eli kohtioon pinta-alayksiköllä aikayksikössä osuvien hiukkasten lukumäärä.

Vaikutusala σ on laadultaan pinta-ala. Tavallisesti käytetty yksikkö on 1 barn = 10^{-28}m^2 . Ydinreaktioiden tyypillinen vaikutusala on kertalukua 1 barn. Ydinenergian vapautuminen perustuu eri ydinten erilaisiin sidososuuksiin.

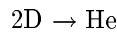
Fuusio

Kaksi kevyttä ydintä yhtyy raskaammaksi ytimeksi. Esim. deutronin sidososuus on 2.5MeV ja heliumin 7MeV. Reaktion



aikaansaamiseksi tarvitaan siis energiaa $4 \cdot (7 - 2.5)\text{MeV} = 22\text{MeV}$.

Vastaavasti reaktio



tuottaa 22MeV energiaa, joka vapautuu suurenergisenä sähkömagneettisena säteilynä, n.s. γ -säteilynä. Jos tällä reaktiolla tuotetaan 1 mooli heliumia (4g), tarvitaan 2 moolia deuteriumia. Vapautuva energia on

$$\begin{aligned} E &= N_0(B_{\text{He}} - 2B_{\text{D}}) \\ &= 6.022 \cdot 10^{23} \cdot 22\text{MeV} \cdot 1.602 \cdot 10^{-13}\text{J/MeV} \\ &= 2.12 \cdot 10^{12}\text{J} \approx 600\text{MWh}. \end{aligned}$$

Fuusiodynivoimala, jonka teho on 600 MW, kuluttaisi 4g deuteriumia tunnissa eli n. 100g vuorokaudessa. Nyt 1 m^3 vettä sisältää 20g deuteriumia, jonka erottaminen ei ole erityisen vaikeaa. Fuusio on siis käytännöllisesti katsoen ehtymätön energialähde. Sen lisäksi syntyvien radioaktiivisten jätteiden määrä on pieni ja näiden puoliintumisaajat lyhyet.

Valitettavasti kontrolloidun fuusioreaktion teknologia on äärimmäisen hankalaa:

- Jotta deuteriumytimistä muodostuisi heliumydin, on nämä saatava ydinvoiman kantaman (n. 2fm) päähän toisistaan eli on voitettava deuteriumien protonien välinen Coulombin repulsio (n. 0.7MeV).
- Tavallisimmin käytetty tekniikka on kuumentaa deuteriumia niin paljon, että lämpöliike riittää voittamaan Coulombin repulsion.
- Jos fuusio saadaan alkuun, se tuottaa itse lämpöenergiaa, jota voidaan käyttää uusien fuusioreaktioiden aikaansaamiseksi. Tämä edellyttää, että reaktioon osallistuva deuteriumplasma on kyllin tiheää ”pyydystääkseen” lämpösäteilyä.
- Tiheän kuuman plasman koossapitäminen on erittäin vaikeaa. Lupaavimmalta näyttävä menetelmä on yrittää pitää plasma koossa voimakkaalla magneetikentällä.
- Tällä hetkellä fuusioteknologiassa on n.s. *break even*-tilanne: reaktio tuottaa yhtä paljon energiaa kuin siihen joudutaan syöttämään.

Fissio

Raskas ydin hajoaa kahdeksi keskiraskaaksi ytimeksi, joiden lisäksi irtoaa aina joukko neutroneja. Vapautuva energia siirtyy osittain ytimien ja neutronien liike-energiaksi ja osittain γ -säteilyksi.

Fission tuloksena syntyvät neutronit voivat sopivissa olosuhteissa saada aikaan uusia fissioita; käynnistyy ketjureaktio. Esim. uraanin isotooppi U^{235} hajoaa spontaanisti puoliintumisaajan ollessa $\approx 10^9$ vuotta. Kun tässä hajonnassa syntyneet neutronit osuvat U^{235} -ytimiin, nämä puolestaan hajoavat ja tuottavat lisää neutroneita (ja γ -säteilyä). Ketjureaktio alkaa, kun polttoaineen massa ylittää sen geometrisestä muodosta riippuvan *kriittisen massan*. Esim. plutoniumilla kriittinen massa on n. (10–20)kg.

Fissioreaktion vaikutusala on hyvin suuri pienillä neutronin energioilla. Ketjureaktiota voidaan ylläpitää kriittistä massaa pienemmillä massoilla lisäämällä sopivaa väliainetta, jonka avulla voidaan säädellä neutronien nopeutta ja siten myös reaktionopeutta. Näin menetellään ydinreaktoreissa.

Jos ydin, jonka massaluku on $A > 200$ ja sidososuus on $B/\text{nukleoni} \approx 7.5\text{MeV}$, hajoaa kahdeksi $A \approx 100$ ytimeksi, joissa sidososuus on $B/\text{nukleoni} \approx 8.5\text{MeV}$, vapautuva energia on $\approx 200 \cdot 1\text{MeV}$. Esim. 1 mooli ($\approx 235\text{g}$) U^{235} isotooppia (nykyisin käytössä oleva uraanin isotooppi) tuottaa hajotessaan energiaa (vrt.

edellinen esimerkki)

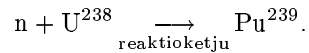
$$E \approx \frac{235}{22} \cdot 600 \text{MWh} \approx 6 \cdot 10^3 \text{MWh}.$$

Fissiovoimala, jonka teho on 600 MW, kuluttaa siten noin $\frac{24}{10} \cdot 235 \text{g} \approx 600 \text{g}$ uraania vuorokaudessa.

Fissiovoiman huomattavimmat haittatekijät ovat:

- uraanin niukkuus. U^{235} isotooppia on vain n. 1% luonnonuraanista. Yleisin isotooppi on U^{238} , joka sellaisenaan ei sovellu reaktorien polttoaineeksi.
- turvallisuus- ja saasteongelmat. Fissioreaktorit synnyttävät radioaktiivisia jätteitä, joita on pystyttävä säilyttämään turvallisesti jopa kymmeniä tuhansia vuosia.

Kun hidas neutroni törmää U^{238} ytimeen, tapahtuu reaktio



Tätä plutoniumin isotooppia voidaan käyttää polttoaineena.

Hyötyreaktoreiden ideana on lisätä Pu^{239} :n joukkoon U^{238} isotooppia. Tällöin reaktori kuluttaessaan polttoainetta valmistaa samalla uutta. Näin menetellen polttoainetta riittäisi vuosituhansiksi.

Hyötyreaktoreiden haittoja ovat:

- turvallisuus- ja saasteongelmat lisääntyvät. Pu^{239} on radioaktiivinen. Sen puoliintumisaika on 24000 vuotta. Sen lisäksi Pu^{239} on myrkyllistä.
- onnettomuusriski.

Ydinvoimiin perustuvan ydinenergian ja Coulombin voimaan perustuvan kemiallisen energian (esim. $\text{H} + \text{H} \rightarrow \text{H}^2$) välinen suuruusluokkaero on karkeasti 10^6 ; elektroniverhoilmiöissä sopiva energiayksikkö on 1eV ja ytimeen liittyvissä ilmiöissä 1MeV.

9.3 Ydinvoimista

Yleiset ominaisuudet

Ydinvoimia voidaan luonnehtia seuraavasti:

1. lyhyt kantamaisia, $\approx 2 \text{fm}$.
2. hyvin voimakkaita.
3. eivät riipu nukleonin varauksesta: pp-, pn- ja nn-vuorovaikutukset ovat ydinvoimien osalta samat.

4. repulsiivinen keskus (*hard core*), $r < 0.8\text{fm}$.
5. riippuvat nukleonien spinin suunnista siten, että ne ovat voimakkaampia spinien ollessa samansuuntaisia kuin vastakkaisuuntaisille spineille.
6. sisältävät nopeudesta riippuvia termejä ja n.s. *tensorivoimia*.

Yukawan mesoniteoria (1935)

Klassisen elektrodynamiikan mukaan sähkömagneettinen potentiaali toteuttaa vapaassa (s.o. varauksettomassa) avaruudessa aaltoyhtälön

$$\left(-\nabla^2 + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) A_\mu = 0,$$

missä $A_\mu = (\vec{A}, \phi)$. Vektoripotentiaali \vec{A} on määritelty siten, että magneettikenttä \vec{B} on

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}.$$

Sähkökenttä \vec{E} puolestaan saadaan skalaaripotentiaalista ϕ :

$$\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}.$$

Stationäärisessä tilanteessa aaltoyhtälö on

$$\nabla^2 A_\mu = 0.$$

Tarkastellaan erityisesti skalaaripotentiaalia, joka nyt toteuttaa yhtälön

$$\nabla^2 \phi = 0.$$

Tämä on sähköstaattisen potentiaalın Poissonin yhtälö avaruuden sellaisessa osassa, jossa ei ole varauksia. Pallosymmetrisessä tapauksessa saadaan

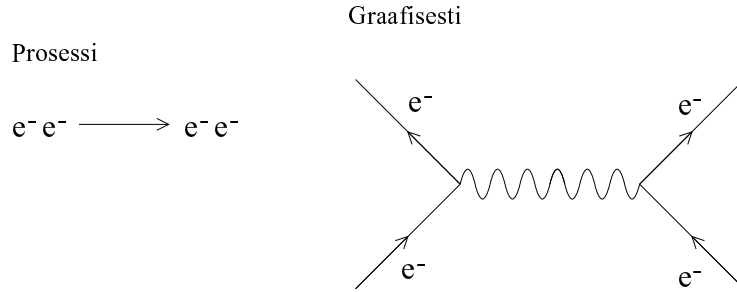
$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\phi) = 0,$$

jonka ratkaisuna on tuttu Coulombin potentiaali

$$\phi = \frac{k}{r}.$$

Voimme tulkita asiat myös kvanttimekaanisesti: aaltoyhtälö kuvaa *massatonta hiukkasta*: fotonia eli γ -kvanttia. Tällöin $\phi(r)$ on todennäköisyysamplitudi, t.s. $|\phi(r)|^2$ on todennäköisyys fotonin löytymiselle etäisyydeltä r siitä varauksesta, joka sen on synnyttänyt. Tämän tulkinnan mukaiset fotonit ovat *virtuaalisia*; ne toteuttavat staattisen aaltoyhtälön eivätkä siten edusta valon nopeudella eteneviä todellisia fotoneja.

Tarkastellaan esimerkkinä kahta etäisyydellä r toisistaan olevaa elektronia. Näiden välillä on Coulombin repulsio $k_0 e^2/r$. Kvanttimekaanisen tulkinnan mukaan kumpikin elektroni toimii virtuaalisten fotonien lähteenä ja näiden virtuaalisten fotonien todennäköisyysamplitudi toisen elektronin kohdalla on $\propto 1/r$. Ilmaistaan tämä sanomalla, että *Coulombin kenttä aiheutuu virtuaalisten fotonien vaihdosta vuorovaikuttavien elektronien kesken*.



Yukawa yleisti vaihtovoimaidean myös massallisiin hiukkasiin. Valitsemalla aaltoyhtälöksi Klein-Gordonin yhtälö

$$\left(-\nabla^2 + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \phi + \kappa^2 \phi = 0,$$

missä $\kappa = m_0 c / \hbar$, päästään kuvaamaan spin 0-hiukkasten välittämää vuorovaikutusta.

Huom. Käytämme relativistisia aaltoyhtälöitä joko siksi, että vuorovaikutuksiin liittyvät energiat edellyttävät suhteellisuusteoreettista käsittelyä, tai että välittäjähiukkaset käyttäytyvät relativistisesti (fotonit). Myös ei-relativistisen Schrödingerin yhtälön aaltofunktiot voivat kuvata vuorovaikutuksia välittäviä kvantteja: esim. kiinteässä aineessa *phononit* (ääniaaltokvantit) toimivat vuorovaikutusten välittäjinä.

Staatin Klein-Gordonin yhtälön pallosymmetrinen ratkaisu on

$$V(r) \equiv \phi(r) = V_0 \frac{e^{-\kappa r}}{r}.$$

Tämä esittää vaihtovoimaa, jonka kantama R on

$$R = \frac{1}{\kappa} = \frac{\hbar}{m_0 c}.$$

Jos elektronit toimisivat ydinvoimien välittäjinä, olisi kantama $R \approx 0.02 \text{ \AA}$, joka on aivan liikaa. Kokeellisesti $R \approx 1.3 \text{ fm}$, josta välittäjähiukkasen massaksi saadaan $m_0 \approx 150 \text{ MeV}/c^2$.

Vuorovaikutuksen kantamaa voidaan arvioida myös Heisenbergin epätarkkuusperiaatteen

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar$$

avulla. Jos vuorovaikuttava hiukkanen emittoi kvantin, jonka massa on m_0 , on energian epämääräisyys $\Delta E \approx m_0 c^2$ ja

$$\Delta t \approx \frac{\hbar}{\Delta E} = \frac{\hbar}{m_0 c^2}.$$

Vuorovaikutuskvantti ehtii ajassa Δt liikkua enintään (valon nopeudella) matkan

$$R \approx c \Delta t = \frac{\hbar}{m_0 c},$$

joka on vuorovaikutuksen kantama.

Vuonna 1947 löydettiin kosmisesta säteilystä hiukkasia, joiden massa oli oikeaa suuruusluokkaa ja joiden vuorovaikutus nukleonien kanssa oli riittävän suuri aikaansaamaan ytimissä todetut ilmiöt. Kyseiset hiukkaset ovat π -mesoneja:

	Massa
π^+, π^-	139.6 MeV/c ²
π^0	135 MeV/c ²

10 Hiukkasfysiikkaa

10.1 Perusvuorovaikutukset

1. Gravitaatio

Gravitaatio on vuorovaikutuksista heikoin, mutta kauimmin tunnettu. Se sitoo tähdet galakseiksi ja galaksit tähtijoukoiksi, mutta aineen mikroskooppisen rakenteen kannalta sitä pidetään yleensä merkityksettömänä. Analogisesti muiden vuorovaikutusten kanssa on esitetty hypoteesi, että gravitaatiota välittää hiukkanen, *gravitoni*. Gravitonia ei kuitenkaan ole vielä havaittu. Teoreettisten tarkastelujen perusteella gravitonin spin on kaksi ja massa 0 (vuorovaikutus on kantamaltaan ääretön).

2. Heikko vuorovaikutus

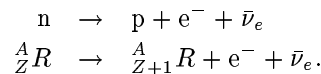
Heikot vuorovaikutukset ilmenevät luonnossa lähinnä siten, että eräät hiukkaset, jotka muutoin olisivat stabiileja, hajoavat.

Esim. vapaan neutronin hajoaminen protoniksi ja elektroniksi tai ytimen β -hajonta, jossa ytimestä emittoituu elektroni, jolloin ytimen protoniluku kasvaa ja neutroniluku pienenee yhdellä.

β -hajonnassa

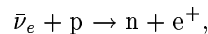
- elektronin energia vaihtelee hajonnasta toiseen saaden *kaikki jatkuvat* arvot tiettyyn maksiarvoon saakka. Selitykseksi ei kelpaa se, että syntyvä tytärjääsi viritettyyn tilaan ja siten veisi ylimääräisen energian, sillä ytimen mahdolliset stationääriset tilat ovat diskreettejä. Myös elektronin energia saisi silloin diskreettejä arvoja.
- kokonaisimpulssimomentti näyttää muuttuvan, vaikka systeemiin ei vaikuta ulkoisia voimia.

W. Paulin neutrinohypoteesi (1931). Emittoidessaan elektronin neutroni emittoi myös lepomassattoman hiukkasen, *neutrinon*, jonka spin on puoli, ja joka vie liike-energiana vaihtelevan osan hajoamisenergiasta. Neutronin hajoamiseen ja β -hajontaan liittyvät reaktion yhtälöt ovat



Vapaan neutronin elinikä on 15min 35s.

Neutrino havaittiin kokeellisesti vasta 1956. Neutrinon havaitseminen perustuu prosessiin



jonka vaikutusala on erittäin pieni.

Hiukkasia, joihin heikko vuorovaikutus vaikuttaa mutta vahva ei, sanotaan *leptoneiksi*. Leptoneita ovat elektronit, myonit ja τ -hiukkaset sekä kuhunkin näihin liittyvät neutrinot: ν_e , ν_μ ja ν_τ . Heikkoja vuorovaikutuksia välittävät massiiviset vektori- (spin 1-) hiukkaset W^\pm ja Z^0 .

3. Sähkömagneettinen vuorovaikutus

Sähkömagneettinen vuorovaikutus on jokapäiväisiä ilmiöitä hallitseva vuorovaikutus, johon perustuvat kaikki kemialliset ja biologiset prosessit. Molekyyl- ja atomitasolla Schrödingerin yhtälöön pohjautuva kvanttimekaniikka on enimmäkseen riittävä. Alkeishiukkasten välisten sähkömagneettisten vuorovaikutusten kuvaamiseksi joudutaan vuorovaikutusta välittävä fotonikenttä kvantisoimaan. Tähän liittyvä teoria tunnetaan *kvanttielektrodynamiikkana*.

Sähkömagneettisen vuorovaikutuksen kantama on ääretön ja sitä välittävät massattomat fotonit.

4. Vahva vuorovaikutus

Kosmisen säteilyn tutkimuksen ja hiukkaskiihdyttimien avulla on saatu aikaan useita satoja erilaisia alkeishiukkasia. Suurin osa niistä on n.s. *vahvasti vuorovaikuttavia* hiukkasia eli *hadroneja*.

Hadronien väliset vuorovaikutukset ovat ydinvoimien suuruusluokkaa. Perusvuorovaikutuksena ydinvoimien sijasta puhutaan yleensä vahvoista vuorovaikutuksista, joista ydinvoima on erikoistapaus. Useimmat vahvojen vuorovaikutusten teoriat perustuvat aikaisemmin käsiteltyyn vaihtovoimaideaan. Täysin tyydyttävää teoriaa ei vielä ole onnistuttu saamaan aikaan.

Vahvoihin vuorovaikutuksiin liittyy läheisesti myös hadroneja koossapitävä n.s. *värivoima*.

Seuraavassa luetellaan vielä perusvuorovaikutukset tärkeimpine ominaisuuksineen. Vuorovaikutuksen nimen perässä on annettu sen suhteellinen voimakkuus, joka on laskettu kahdelle toisistaan 2fm etäisyydellä olevalle ytimen protonille asettamalla Coulombin voiman suuruudeksi 1.

1. Gravitaatio (10^{-42})

- sitoo planeettoja, tähtiä ja galakseja.
- heikko atomistisilla etäisyyksillä mutta hyvin vahva mustissa aukoissa.
- ääretönkantamainen.
- vaikuttaa kaikkeen materiaan ja energiaan.
- hypoteettisen gravitonin välittämä.

2. Heikko vuorovaikutus (10^{-7})

- kosminen merkitys: muuttaa perushiukkasia toisikseen (kosminen alkemia).
- erittäin heikko atomistisessa skaalassa; n. 10^{-11} × sähkömagneettinen vuorovaikutus.
- lyhyt kantama $\approx 0.01\text{fm}$.

- vaikuttaa kaikkiin perushiukkasiin (n.s. kvarkki- ja leptoniperheisiin).
- massivisten vektorihiukkasten W^\pm ja Z^0 välittämä. $m_W = 80.1\text{GeV}/c^2$ ja $m_Z = 91.2\text{GeV}/c^2$.

3. Sähkömagneettinen vuorovaikutus (1)

- kosminen merkitys: sitoo atomeja.
- vahva atomeissa, heikko kosmisilla etäisyyksillä (neutraali materia).
- ääretönkantamainen.
- vaikuttaa kaikkiin varattuihin hiukkasiin.
- fotonien välittämä.

4. Vahva ydinvoima (20)

- kosminen merkitys: sitoo atomiytimiä, tähtien energialähde.
- etäisyydellä 1fm n. 100 kertaa sähkömagneettista vuorovaikutusta voimakkaampi.
- lyhyt kantama $\approx 1\text{fm}$.
- vaikuttaa hadronien välillä.
- mesonien välittämä.

5. Värivoima (väridynaaminen vuorovaikutus)

Hadronit ovat värivoimien koossapitämiä *kvarkkisysteemejä*. Näiden kvantittuneita energiatiloja ovat sadat hadronit. Puhutaan hadronispektroskopiasta.

- kvarkkien sitoja esim. protonissa. Vahva ydinvoima on sivutuote.
- vahva lyhyillä, $\approx 1\text{fm}$, etäisyyksillä. Heikko pitkällä etäisyyksillä, mutta heikko myös erittäin lyhyillä etäisyyksillä: *asymptoottinen vapaus*.
- kantama $\approx 1\text{fm}$.
- gluonien välittämä.

10.2 Hiukkasten luokitteluun käytettävät parametrit

1. Massa m

Hiukkasten massa ei noudata tarkkaa säännönmukaisuutta. Ei ole olemassa teoriaa, joka ennustaisi hiukkasten (lepo)massat.

2. Varaus Q

Kaikki varaukset ovat elektronin varauksen kokonaislukuisia kerrannaisia.

3. Spin S

Spin on hiukkasen impulssimomentti omassa lepokoordinaatistossaan.

Hiukaset jaotellaan spinin mukaan fermioneihin (spin $1/2, 3/2, \dots$) ja bosoneihin (spin $0, 1, \dots$).

Bosonit ja fermionit jaetaan edelleen massan, vuorovaikutustyyppin ja muiden ominaisuuksien mukaan seuraavasti:

bosonit

- massattomat bosonit: ftoni, gluoni, gravitoni.
- mesonit, välibosonit W^+, W^-, Z^0 .

fermioneja

- leptonit: $e^\pm, \mu^\pm, \tau^\pm, \nu_e, \nu_\mu, \nu_\tau$.
- baryonit
 - nukleonit: p,n.
 - hyperonit.

Vahvoin vuorovaikutuksiin osallistuvien massallisten hiukkasten, mesonien ja baryonien, yhteisnimitys on hadronit.

4. Isospin I ja sen z -komponentti I_3

Hiukaset voidaan koota ryhmiksi, joiden jäsenillä on melkein sama massa, mutta eri varaus. Tällaista ryhmää sanotaan *isospinmultipletiksi*. Esim.

- isosingletti $\Lambda^0, \Omega^-, |I| = 0$.
- isodupletti p,n; $\Xi^0, \Xi^-; K^+, K^0, |I| = 1/2$.
- isotripletti $\Sigma^+, \Sigma^0, \Sigma^-, \pi^+, \pi^0, \pi^-, |I| = 1$.

Esim. protonia ja neutronia pidetään saman hiukkasen, nukleonin, kahtena eri varaustilana. Tällöin hiukkasia kuvataan isospin- (varaus-) avaruudessa.

Hiukkasryhmää kuvaa isospin ominaisuuksien osalta isospinvektori I , jonka suunta on kvantittunut siten, että se saa valitun koordinaatiston z -akselilla vain arvot $I_3 = -|I|, -|I| + 1, \dots, |I| - 1, |I|$. Isospin käyttäytyy siis kuten impulssimomentti. Ryhmän multiplisiteetti on $2|I| + 1$.

Tarkastellaan kahta hiukasta, joiden isospinit ovat I_1 ja I_2 . Kokonaisisospin $\vec{I} = \vec{I}_1 + \vec{I}_2$ voi olla pituudeltaan

$$|I| = ||I_1| - |I_2||, ||I_1| - |I_2|| + 1, \dots, |I_1| + |I_2|.$$

5. Outous S , makukvanttiluvut

Outous-kvanttiluku määräytyy isospinmultipliettien varauspainopisteiden avulla.

Baryonimultipletit: Nukleonidupletin varauspainopiste on $1/2$ ja sen outous on $S = 0$. Muiden multipliettien outous määritellään siten, että varauspainopisteen siirtymää $\pm \frac{1}{2}e$ vastaa outouden muutos $\Delta S = \pm 1$. Esim.

Multipletti	S
$\Delta^{++}, \Delta^+, \Delta^0, \Delta^-$	0
Λ^0	-1
$\Sigma^+, \Sigma^0, \Sigma^-$	-1
Ξ^0, Ξ^-	-2
Ω^-	-3

Mesonit: Valitaan π -tripletin outous $S = 0$ vertailupisteeksi. Esim.

Multipletti	S
K^+, K^0	+1
η^0	0

Outouden kaltaisia suureita ovat n.s. *makusuureet*: ylös u , alas d , outous S , lumo c , kauneus b ja totuus t .

6. Baryoni- ja leptoniluku B ja L

Jokaisella hiukkasella on antihiukkasensa. Hiukkanen ja sen antihiukkanen voivat *annihiloitua* jättäen jälkeensä pelkästään energiaa fotonien muodossa. Esim. elektronin e^- antihiukkanen on positroni e^+ , pionin π^+ antihiukkanen on pioni π^- . Hiukkanen voi olla oma antihiukkasensa, esim. π^0 . Antihiukkasta merkitään yläviivalla; esim. $\overline{\pi^0} = \pi^0$ ja $\overline{e^+} = e^-$.

Hiukkasella ja sen antihiukkasella on sama massa, spin ja isospin I , mutta vastakkainen varaus, outous, isospinin z -komponentti I_3 sekä *baryoni-* ja *leptoniluku*.

Jos hiukkanen on baryoni (antibaryoni), sen baryoniluku on $B = 1(-1)$, muutoin $B = 0$.

Jos hiukkanen on leptoni (antileptoni), sen leptoniluku on $L = 1(-1)$, muutoin $L = 0$. Leptoniluku jakuu edelleen elektroniseen, myoniseen ja τ -leptonilukuun.

7. Elinäika τ

Hiukkasten elinajoissa ei ole säännönmukaisuutta. Hajonta noudattaa tilastollista lakia

$$N = N_0 e^{-\lambda t},$$

keskimääräisen elinajan ollessa $\tau = 1/\lambda$ ja puoliintumisaajan ollessa $t_{1/2} = \ln 2/\lambda$.

Ainoa vapaana stabiili hadroni on protoni. Muiden hadronien eliniät riippuvat siitä, hajoavatko ne heikon, sähkömagneettisen vai vahvan vuorovaikutuksen kautta:

Hajottaja vuorovaikutus	Tyypillinen elinikä	Eliniän vaihtelualue
Heikko	$\approx 10^{-10}\text{s}$	15min– 10^{-13}s
Sähkömagn.	$\approx 10^{-16}\text{s}$	10^{-15}s – 10^{-21}s
Vahva	$\approx 10^{-23}\text{s}$	10^{-23}s – 10^{-24}s

Lähes valonnopeudella liikkuvat heikkojen vuorovaikutusten kautta hajoavat hiukkaset kulkevat laboratorossa huomattavan pitkiä matkoja. Jos hiukkasen elinikä on τ_0 , on sen elinikä τ laboratoriossa aikadilataatiosta johtuen $\tau = \tau_0/\sqrt{1-\beta^2}$. Tästä syystä heikkojen vuorovaikutusten kautta hajoavia hiukkasia sanotaan joskus stabiileiksi. Esim. π - ja K -mesoneja voidaan ohjata magneettikenttien avulla pitkiä matkoja ja käyttää ammushiukkasina.

8. Hypervaraus Y

Hypervaraus *ei ole* riippumaton kvanttiluku, vaan sitä käytetään usein outouden sijasta. Se määritellään yhtälöllä

$$Y = S + B \quad (\text{yleisesti: } Y = B + S + C + \mathbf{B} + T).$$

Kvanttilukuja Q , I_3 ja Y sitoo toisiinsa relaatio

$$Q = I_3 + \frac{Y}{2},$$

joka tunnetaan Gell-Mann'in-Nishijama'n yhtälönä. Ytimille vastaava yhtälö on

$$Q = I_3 + \frac{1}{2}A.$$

Esim. ${}^2\text{He}^4$:

$$I_3 = 2 \cdot \frac{1}{2} + 2 \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) = 0; \quad A = 4,$$

joten $Q = 0 + \frac{1}{2} \cdot 4 = 2$.

10.3 Säilymislait

1. *Impulssin (liikemäärän) säilymislaki.*

2. *Energian säilymislaki.*

3. *Impulssimomentin säilymislaki.*

Hiukkasten sisäiset impulssimomentit, spinit, on myös otettava huomioon.

Esim. e^+e^- -pari tilassa, jossa rataimpulssimomentti $l = 0$. Hiukkasten spin-impulssimomentit ovat $J_1 = J_2 = \frac{1}{2}$. Oletetaan, että $J_{1z} = \frac{1}{2}$ ja että $J_{2z} = -\frac{1}{2}$. Parin kokonaisimpulssimomentti J voi saada arvot

$$J = |J_1 - J_2|, |J_1 + J_2| + 1, \dots, J_1 + J_2 = 0, 1.$$

Pari ei voi hajota yhdeksi γ -kvantiksi, sillä tämä veisi lineaarista impulssia (liikemäärää), jota parilla ei ole. Tarvitaan 2 γ -kvanttia. Näiden γ -kvanttien kokonaisimpulssimomentti $J_{2,\gamma}$ voi olla

$$J_{2,\gamma} = |S_\gamma - S_\gamma|, |S_\gamma - S_\gamma| + 1, S_\gamma + S_\gamma = 0, 1, 2,$$

sillä fotonin spin on $S_\gamma = 1$. Impulssimomentti säilyy, eli

$$J = J_{2,\gamma}.$$

Jos e^+e^- -pari oli alunperin spin 0-tilassa ($J = 0$), se siis hajoaa kahdeksi γ -kvantiksi, jotka myös ovat spin 0-tilassa ($J_{2,\gamma} = 0$).

4. Varauksen säilymlaki

Klassinen fysiikka tottelee näitä säilymlakeja (1–4). Hiukkasprosesseihin nämä lait eivät kuitenkaan tuo kovinkaan paljon järjestystä. Kokeellisesti tiedetään, että hiukkasprosessien joukosta puuttuu monia sellaisia, jotka näiden yleisten säilymlakien perusteella olisivat sallittuja. On siis olemassa hiukkasfysiikalle ominaisia säilymlakeja.

5. Baryoniluvun B säilymlaki

Kokonaisbaryoniluku säilyy kaikissa hiukkasprosesseissa. Esim.

$$B = \begin{array}{cccc} p & + & \bar{p} & \rightarrow & \Xi^+ & + & \Xi^- \\ +1 & & -1 & = & -1 & & +1 \end{array}$$

Esim.

$$\begin{array}{cccc} \Omega^- & \rightarrow & \Lambda^0 & + & K^- \\ +1 & = & +1 & + & 0 \end{array}$$

Esim.

$$\begin{array}{ccccccc} K^+ & + & p & \rightarrow & \bar{\Sigma}^+ & + & p & + & n \\ 0 & & +1 & = & -1 & & +1 & & +1 \end{array}$$

6. Leptoniluvun L (L_e, L_μ, L_τ) säilymlaki

Leptonit voidaan jakaa myonisiin, elektronisiin ja τ -leptoneihin. On näet havaittu, että esim. neutrinot, jotka syntyvät hajoamisprosesseissa yhdessä myonien kanssa, eivät sironnassa voi tuottaa elektroneja eivätkä τ -hiukkasia vaan myoneja.

Leptoniluvut L_e, L_μ ja L_τ säilyvät toisistaan riippumatta kaikissa vuorovaikutuksissa.

Esim. Myonin neutrinot. Jos prosessissa

$$L_\mu = \begin{array}{cccc} \pi^+ & \rightarrow & \mu^+ & + & \nu_\mu \\ 0 & = & -1 & & +1 \end{array}$$

syntyvä neutrino törmää edelleen neutroniin, niin reaktio

$$L_\mu = \begin{array}{cccc} \nu_\mu & + & n & \rightarrow & \mu^- & + & p \\ +1 & + & 0 & = & +1 & + & 0 \end{array}$$

on mahdollinen. Sen sijaan reaktio

$$\nu_\mu + n \not\rightarrow e^- + p$$

on kielletty.

Esim.

$$K^0 \rightarrow \pi^\pm + \mu^\mp + \begin{Bmatrix} \bar{\nu}_\mu \\ \nu_\mu \end{Bmatrix}$$

$$L_\mu = 0 = 0 \quad \pm 1 \quad \mp 1$$

Esim. Elektronin neutrinot.

$$\mu^- \rightarrow \nu_\mu + \bar{\nu}_e + e^-$$

$$L_\mu = +1 = +1 + 0 + 0$$

$$L_e = 0 = 0 - 1 + 1$$

Säilymlait 1–6 ovat voimassa kaikissa vuorovaikutuksissa. Sen sijaan seuraavien säilymlakien voimassaolo riippuu vuorovaikutuksesta.

7. Isospinin I säilymlaki

Hiukkassysteemin kokonaisisospin saadaan yhdistämällä hiukkasten isospinit impulssimomentin yhdistämissäntöjen mukaan. Kahden hiukkasen systeemille on

$$|I_1 - I_2| \leq I \leq I_1 + I_2.$$

Kokonaisisospin säilyy vahvoissa vuorovaikutuksissa.

Isospinin z-komponentti I_z säilyy vahvoissa ja sähkömagneettisissa vuorovaikutuksissa.

Kuten aikaisemmin on todettu, on ydinvuorovaikutus, ja yleensä vahva vuorovaikutus, riippumaton varauksesta ja siten myös kvanttiluvusta I_z eli riippuu vain kokonaisisospinistä I .

Alla olevassa taulukossa on lueteltu muutamien hiukkasten isospin- ja outouskvanttiluvut.

Hiukkanen	I	I_z	S	Y
mesonit				
π^+, π^0, π^-	1	1, 0, -1	0	0
K^+, K^0	1/2	1/2, -1/2	1	1
η^0	0	0	0	0
baryonit				
p^+, n	1/2	1/2, -1/2	0	1
Λ^0	0	0	-1	0
$\Sigma^+, \Sigma^0, \Sigma^-$	1	1, 0, -1	-1	0
Ξ^0, Ξ^-	1/2	1/2, -1/2	-2	-1
Ω^-	0	0	-3	-2

Heikot vuorovaikutukset, jotka eivät kunnioita I :n tai I_z :n säilymistä, mahdollistavat monien muuten stabiilien hiukkasten hajoamisen. Esim.

$$K^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^-$$

$$I : 1/2 \rightarrow 0, 1, (2)$$

$$I_z : -1/2 \rightarrow +1 \quad -1$$

8. Outouden säilymlaki (muut makukvanttiluvut samoin)

Koska varaus on

$$Q = I_z + \frac{B+S}{2} = I_z + \frac{Y}{2},$$

säilyy outous S I_z :n tavoin vahvoissa ja sähkömagneettisissa vuorovaikutuksissa. Heikoissa vuorovaikutuksissa voi olla $\Delta S = \pm 1$.

Esim. vahva vuorovaikutus:

$$S: \begin{array}{ccccccc} \pi^+ & + & p & \rightarrow & \pi^+ & + & \Sigma^+ & + & K^0 \\ 0 & + & 0 & \rightarrow & 0 & & -1 & & +1 \end{array}$$

Huom. Vahvoissa vuorovaikutuksissa oudon hiukkasen synty vaatii toisen oudon hiukkasen siten, että $\Delta S = 0$.

Esim. heikko vuorovaikutus:

$$S: \begin{array}{ccccccc} \Omega^- & \rightarrow & \Xi^0 & + & \pi^- & & \Delta S = +1. \\ -3 & \rightarrow & -2 & + & 0 & & \end{array}$$

$$S: \begin{array}{ccccccc} \Sigma^+ & \rightarrow & p & + & \pi^0 & & \Delta S = +1. \\ -1 & \rightarrow & 0 & + & 0 & & \end{array}$$

$$S: \begin{array}{ccccccc} \bar{\nu}_\mu & + & p & \rightarrow & \mu^+ & + & \Lambda^0 & & \Delta S = -1. \\ & & 0 & \rightarrow & & & -1 & & \end{array}$$

10.4 Säilymlait ja avaruuden symmetriat

Jokaisen säilymlain voidaan ajatella olevan seuraus tiettyjen fysikaalisten muuttujien virittämän avaruuden symmetriaominaisuuksista (avaruuden invarianssista joissakin operaatioissa). Matemaattinen koneisto, jolla näitä invarianssiominaisuuksia käsitellään, on nimeltään *ryhmäteoria*. Ryhmäteoria tarjoaa tehokkaan menetelmän ilmiöiden systemaattiselle luokittelulle.

1. Avaruustranslaatio

Suljetun systeemin liikemäärän säilymlaki on seuraus systeemin translaatioinvarianssista, t.s. systeemin kannalta avaruus on homogeeninen.

2. Aikatranslaatio

Suljetun systeemin energian säilymlakia vastaa systeemin invarianssi ajansiirrossa.

3. Avaruusrotaatio

Suljetun systeemin impulssimomentin säilymlakia vastaa systeemin invarianssi avaruuden kierrossa, t.s. systeemin kannalta avaruus on isotrooppinen.

4. Mittamuunnos

Hiukkasten energiat ovat usein relativistisia, joten hiukkasfysiikassa on käytettävä relativistista kvanttimekaniikkaa. Tällöin hiukkasen aaltoyhtälö riippuu sen spinistä. Vapaata spin 0–hiukkasta kuvaa Klein-Gordonin yhtälö

$$(\square + \kappa^2)\phi = 0.$$

Spin 1/2–hiukkasten kuten leptonien ja kvarkkien aaltoyhtälö on Diracin yhtälö ja spin 1–fotoneja kuvaavat Maxwellin yhtälöt. Relativististen aaltoyhtälöiden ratkaisut kuvaavat kaikkialle avaruuteen levittäytyneitä kenttiä, joiden kvantteja kyseiset hiukkaset ovat. Kenttien kvantituksella, joka voidaan tehdä luomis- ja hävitysoperaattoreiden avulla, päästään vastaaviin kvanttikenttäteorioihin. Sähkömagneettisille, vahvoille ja heikoille vuorovaikutuksille on olemassa hyvin toimivat kvanttikenttäteoriat, kun taas gravitaation kvanttiteoriaa ei ole onnistuttu aikaansaamaan. Eri vuorovaikutuksia kuvaavat teoriat toteuttavat mittasymmetrian. Esimerkiksi sähkömagnetismissa varattua hiukkasta (varaus Q) kuvaavalle kentälle voidaan tehdä mittamuunnos

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{iQ\theta} \psi,$$

missä θ on reaalinen parametri. Todennäköisyystiheys $\psi\psi^* \rightarrow \psi'\psi'^*$ säilyy muuttumattoman tässä muunnoksessa. Voidaan osoittaa, että invarianssivaatimus mittamuunnoksessa johtaa sähkövarauksen säilymlakiin, jonka mukaan hiukkasten varauksien Q summa on sama reaktion alku- ja lopputilassa. *Gloaalissa mittamuunnoksessa* parametrilla θ on sama arvo jokaisessa maailmanpisteessä, kun taas *lokaalissa mittamuunnoksessa* θ on paikan ja ajan funktio, $\theta = \theta(\mathbf{r}, ct)$

Lokaali mittasymmetria ei ole voimassa vapaalle varatulle hiukkaselle, sillä liikemäärä- ja energiaoperaattoreiden derivoinnit funktioon $\theta(x)$ rikkoo mittasymmetrian. Symmetrian rikko voidaan korjata sähkömagneettisen kentän avulla. Voidaan osoittaa, että mittasymmetria on voimassa, jos derivaattaoperaattorit korvataan ns. minimikytKentäperiaatteen mukaan seuraavasti

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \nabla \psi'(\vec{r}, t) &\rightarrow \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right) \psi'(\vec{r}, t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(\vec{r}, t) &\rightarrow \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\phi \right) \psi'(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

Tässä \vec{A} ja ϕ ovat sähkömagneettisen kentän vektori- ja skalaaripotentialit. Mittasymmetria edellyttää, että sähkömagneettisen kentän kvantti, QED:n mittabosoni fotoni, on massaton. Kahden mittamuunnoksen tulo on myös mittamuunnos ja mittamuunnokset toteuttavat muutkin ryhmäominaisuudet.

5. Rotaatio isospinavarauudessa

Analogisesti impulssimomentin kanssa systeemin invarianssia isospinavarauuden kierrossa vastaa isospinin ja sen z -komponentin säilyminen.

Leptoniluvun, baryoniluvun ja outouden säilymlakeja ei voida esittää yhtä havainnollisesti symmetriaominaisuuksien avulla kuin ylläolevia.

6. Avaruusinversio \mathcal{P}

Avaruusinversio- eli pariteettioperaattori \mathcal{P} vaihtaa paikkamuuttujien merkit, t.s.

$$\mathcal{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r}).$$

Esim.

$$\begin{aligned}\mathcal{P}\vec{r} &= -\vec{r} \\ \mathcal{P}\vec{p} &= -\vec{p} \\ \mathcal{P}\vec{L} &= \mathcal{P}\vec{r} \times \vec{p} = \vec{r} \times \vec{p} = \vec{L}.\end{aligned}$$

Sanotaan, että \vec{r} ja \vec{p} ovat (*polaarisia*) vektoreita ja että \vec{L} on aksiaalinen eli *pseudovektori*.

Klassisen fysiikan lait ovat invariantteja avaruusinversion suhteen.

Hiukkasilla on oma sisäinen pariteettinsa $\xi_P = \pm 1$. Jos esim. hiukkasen spin S (käytetään myös merkintää J) on 0 ja ξ_P on +1, sanotaan että hiukkanen on *skalaari*; jos $\xi_P = -1$ sanotaan hiukkasen olevan *pseudoskalaari*. Spin-pariteetikombinaatiota on tapana merkitä symbolilla J^P ; esim. $0^+, 0^-$.

Pariteetti säilyy vahvoissa ja sähkömagneettisissa vuorovaikutuksissa.

7. Ajan kääntö \mathcal{T}

Klassisen fysiikan lait ovat tunnetusti invariantteja operaatioissa, joissa vaihdetaan tapahtumien aikajärjestys päinvastaiseksi, t.s. operaatioissa $t \rightarrow -t$. Kvanttimekaniikassa ajankääntöä vastaa operaattori \mathcal{T} , jolla on ominaisuus

$$\mathcal{T}\psi(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, -t).$$

8. Varauksen konjugointi \mathcal{C}

Varauksen konjugointioperaatioissa \mathcal{C} korvataan hiukkaset antihiukkasillaan muuttamatta muita ominaisuuksia.

Vahvat ja sähkömagneettiset vuorovaikutukset ovat invariantteja \mathcal{C} ja \mathcal{T} operaatioissa.

Kaikki fysiikan lait ovat invariantteja yhdistetyssä \mathcal{CPT} operaatioissa.

10.5 Hiukkaskiihdyttimistä

Hiukkaskiihdyttimiä käytetään systeemin rakenteen selvittämiseen.

Rakenneosasten ja niiden ominaisuuksien (vuorovaikutusten) avulla voidaan ymmärtää itse systeemin ominaisuudet. Esim. atomi on koostunut ytimestä ja elektroneista. Ytimen ja elektronin ominaisuuksien (massat, Coulombin vuorovaikutus, elektronin spin, ...) perusteella voidaan selittää atomin ominaisuudet (ionisaatioenergia, spektri, valenssi, ...).

Nykytietämyksen mukaan materian rakenne noudattaa ketjua:

molekyylit → atomit → ydin → nukleonit ja muut alkeishiukkaset → kvarkit → (?)...
 Jos lopulta päästäisiin rakenneseleeseen, joita alkeellisempia ei olisi olemassa ja jos näiden alkeellisimpien hiukkasten ominaisuudet pystyttäisiin päättämään yleisistä periaatteista, ymmärtäisimme pitkälle materiaalin rakenteen.

Nykyisen käsityksen mukaan leptonit (e^- , e^+ , μ^- , μ^+ , ν , ...) ovat rakenteettomia. Muilla alkeishiukkasilla sitä vastoin alirakennetju näyttää jatkuvan. Tähän liittyy n.s. *bootstrap-idea*: alkeishiukkaset muodostuvat toisistaan ja ovat toistensa rakenneseleitä.

Hiukkasten sisäistä rakennetta voidaan tutkia törmäysprosessien avulla. Koska informaatiota etsitään hyvin pieneltä alueelta, täytyy törmäysenergian olla suuri, sillä erotuskyky on törmäävän hiukkasen aallonpituuden suuruusluokkaa. Aallonpituus puolestaan on

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

missä liikemäärä p voidaan laskea kineettisen energian T lausekkeesta

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2.$$

Jos käytettävä hiukkanen on protoni, saamme m.m. seuraavan taulukon

T	p	λ
1 MeV	$\approx 40 \text{ MeV}/c$	$\approx 30 \text{ fm}$
1 GeV	$\approx 1.7 \text{ GeV}/c$	$\approx 1 \text{ fm}$

Nukleonien rakenteen tutkiminen vaatii siten vähintään 1 GeV:n energioita.

Käytettävissä on energialähteet (E_0 on laboratorio- ja E massakeskusenergia):

- kosminen säteily, $E_0 \leq 10^6 \text{ GeV}$.
- kiihdyttimet, joissa hiukkassuihku ohjataan paikoillaan olevaan kohtioon, $E_0 \leq 200 \text{ GeV}$.
- törmäävät suihkut, $E \leq 2 \cdot 500 \text{ GeV}$. Rakenteilla olevassa CERNin LHC-kiihdyttimessä $E \leq 2 \cdot 7 \text{ TeV}$.
- törmäävät e^+e^- -suihkut, $E \leq 2 \cdot 100 \text{ GeV}$.

Vaikka kosmisessa säteilyssä esiintyykin erittäin korkeanaergisiä hiukkasia, on sen tutkimuskäytössä haittoja:

- liian pieni vuo, ≈ 10 hiukkasta/ m^2s energioissa $E_0 \geq 100 \text{ GeV}$.
- ei voida valita tarkasti määrättyä törmäysenergiaa.

Kiihdyttimiä on kahta tyyppiä:

- lineaarisia, joissa hiukkaset kulkevat suoraviivaista rataa.

- syklisiä, joissa hiukkaset palaavat takaisin lähtöpisteeseensä aloittaakseen uuden kierroksen.

Synkrotroni on syklinen kiihdytin, jossa protonit ohjataan magneettikenttien avulla kulkemaan ympyrärataa. Tietyissä radan kohdissa annetaan joka kierroksella sähkökentän avulla pieni energialisäys. Jotta protonit pysyisivät ympyräradalla, on magneettikenttä kasvatettava kiihdytyksen aikana. Esim. n.s. CERN SPS kiihdytinrenkaan säde on $r \approx 1.2\text{km}$ ja protonit kiertävät sen keskimäärin $5 \cdot 10^5$ kertaa.

Ohjainmagneettien rakenteen teknologia sanelee kiihdyttimellä saavutettavan maksimienergian. *Rautasydänmagneeteilla* suurin mahdollinen magneettikenttä on $B_{\text{max}} \approx 2\text{T}$. Magneettikentän nopeudella v liikkuvaan e -varauksiseen hiukkaseen aiheuttama voima on Bev . r -säteistä ympyrärataa liikkuvaan hiukkaseen vaikuttaa keskipakovoima mv^2/r . Kiihdytyksen loppuvaiheessa hiukkasilla on lähes valon nopeus, t.s. $v \approx c$ ja $E = mc^2$. Jotta hiukkaset pysyisivät radallaan, täytyy olla

$$Bev = \frac{mv^2}{r},$$

eli

$$Bec = \frac{mc^2}{r} = \frac{E}{r}.$$

Maksimienergia on siis

$$E_{\text{max}} = ecrB_{\text{max}}.$$

Esim. CERN II:ssa on mahdollista kiihdyttää protonit 720GeV:n energiaan. *Suprajohtavilla magneeteilla* saadaan aikaan n. 5T magneettikenttiä. Vastaavasti CERN II:n renkaalla voidaan protonit kiihdyttää TeV:n energioihin.

Kiihdytin	km	E(GeV)	Tyyppi	Vuosi
LEP1	27	55	$e^+ + e^-$	1989
LEP2	27	95	$e^+ + e^-$	1996
LHC	27	8000	$p + p$	2004

Synkrotronien maksimienergiaa rajoittaa myös hiukkasten säteilyhäviö, joka on

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{\text{säteilyhukka}}{\text{kierros}} = \frac{4\pi}{3} \frac{e^2}{r} \left(\frac{E}{E_0} \right)^4 \\ &\approx 6.0 \cdot 10^{-15} \text{MeV} \frac{\text{m}}{r} \left(\frac{E}{E_0} \right)^4, \end{aligned}$$

missä E_0 on hiukkasen lepoenergia. Jos esim. kiihdytetään protoni energiaan $E = 1\text{TeV} \approx 10^3 E_0$, on säteilyhäviö 1km säteisellä radalla $\Delta E_p \approx 6 \cdot 10^{-6} \text{MeV}$. Koska kiihdytin antaa protonille kertalukua 1MeV (CERN II 3.4MeV) olevan energian joka kierroksella, ei säteilyhukalla ole protonien tapauksessa merkitystä. Sitä vastoin elektronien tapauksessa pienestä massasta johtuen säteilyhukka on merkittävä rajoitus maksimienergioille.

10.6 Kvarkkimalli

Gell-Mann ja Zweig esittivät hypoteesin, jonka mukaan hadronit eli vahvasti vuorovaikuttavat hiukkaset ovat n.s. kvarkkien ja antikvarkkien yhdistelmiä.

Kolmen kvarkin malli

Alkuperäisen kvarkkihypoteesin mukaan erilaisia kvarkkeja on kolme (+näiden antikvarkit): u (=up), d (=down) ja s (=strange). Näiden kvanttiluvut ovat

kvarkki	B	S	q/e
u	1/3	0	2/3
d	1/3	0	-1/3
s	1/3	-1	-1/3

Kaikki kvarkit ja antikvarkit ovat spin 1/2-hiukkasia eli fermioneja.

Mesonit kvarkkijärjestelminä

Mesonien baryoniluku B on nolla ja varaukset kokonaislukuja. Mesonissa on siis oltava sama määrä kvarkkeja ja antikvarkkeja, t.s. mesoni on jokin kombinaatio $q\bar{q}$, $q\bar{q}q\bar{q}$, $q\bar{q}q\bar{q}q\bar{q}$, ..., missä q on mikä tahansa kvarkki.

Mahdolliset kahden kvarkin ($q\bar{q}$) kombinaatiot ovat

	varaus			outous		
$u\bar{u}$ $d\bar{u}$ $s\bar{u}$	0	-1	-1	0	0	-1
$u\bar{d}$ $d\bar{d}$ $s\bar{d}$	1	0	0	0	0	-1
$u\bar{s}$ $d\bar{s}$ $s\bar{s}$	1	0	0	1	1	0

Huom. Varauksen ja outouden yhdistämislakina on tavanomainen yhteenlasku. Pseudoskalaarit mesonit, t.s. mesonit, joiden spin J on 0 ja pariteetti ξ_P on -1 ($J^P = 0^-$), ovat kombinaatioita

$$\begin{aligned}\pi^- &= (d\bar{u}), \quad \pi^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(u\bar{u} - d\bar{d}), \quad \pi^+ = (u\bar{d}) \\ K^- &= (s\bar{u}), \quad K^0 = (s\bar{d}), \quad \bar{K}^0 = (d\bar{s}), \quad K^+ = (u\bar{s}) \\ \eta &= \frac{1}{\sqrt{6}}(u\bar{u} + d\bar{d} - 2s\bar{s}), \quad \eta' = \frac{1}{\sqrt{3}}(u\bar{u} + d\bar{d} + s\bar{s}).\end{aligned}$$

Symmetria, jota kolmen kvarkin malli noudattaa on n.s. $SU(3)$ -symmetria. Tämän symmetriaryhmän mukaisesti hiukkaset voidaan ryhmittää singleteiksi(1), okteteiksi(8) ja dekapleteiksi(10). Kukin multipletti on invariantti ryhmän operaatioissa, t.s. jos jonkin multipletin hiukkaseen sovelletaan jotakin $SU(3)$ -operaatiota, muunnettu hiukkanen kuuluu edelleen samaan multiplettiin.

Pseudoskalaarit mesonit ryhmittyvät yhdeksi singletiksi ja yhdeksi oktetiksi. $SU(3)$ -kielellä tämä ilmaistaan kuten

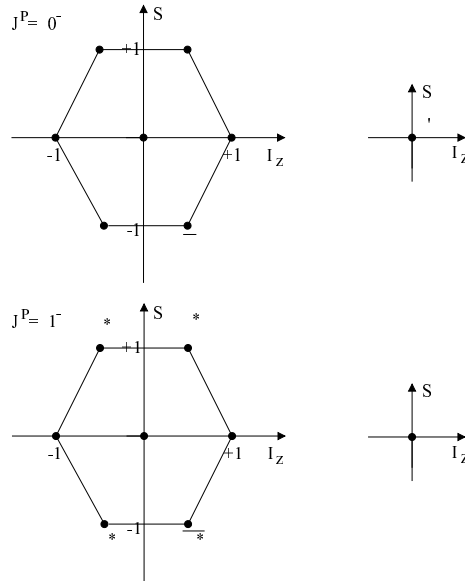
$$3 \otimes \bar{3} = 8 \oplus 1.$$

Tämä tarkoittaa, että kvarkin (3 mahdollisuutta) ja antikvarkin (3 mahdollisuutta) kombinaatiot muodostavat 8 hiukkasen $SU(3)$ -operaatioissa

invariantin joukon ja lisäksi yhden hiukkasen, joka ei muutu miksikään k.o. operaatioissa.

Graafisesti on tapana esittää $SU(3)$ -mesonimultipletit $I_z S$ -tasossa.

Pseudoskalaari- ($J^P = 0^-$) ja vektori- ($J^P = 1^-$) mesoneille saadaan esitykset



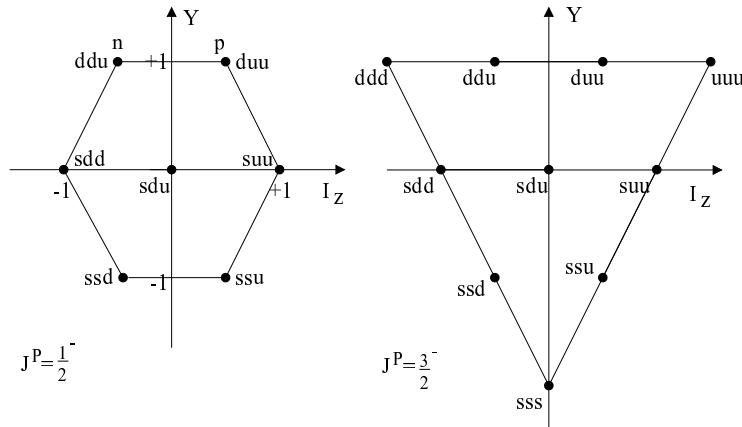
Kaikki muut havaitut mesonit (joille $c = \dots = 0$), voidaan tulkita näiden $9 + 9$ kvarkkijärjestelmien viritystiloiksi. Viritystiloissa kvarkkien suhteellinen liike kasvattaa m.m. impulssimomenttia.

Baryonit kvarkkijärjestelminä

Baryonit (antibaryonit) voidaan esittää kolmen kvarkin (antikvarkin) yhdistelminä. Nämä ryhmittyvät $SU(3)$ -multipleteiksi seuraavasti:

$$3 \otimes 3 \otimes 3 = 10 \oplus 8 \oplus 8 \oplus 1.$$

Baryonimultipletit on tapana esittää joko $I_z Q$ - tai $I_z Y$ -tasossa, esim. $J^P = 1/2^-$ -oktetti ja $J^P = 3/2^+$ dekapletti:



Gell-Mann ennusti (1962) Ω^- -hiukkasen ominaisuudet sekä synty- ja hajoamisprosessit ennen kokeellista löytöä, kun dekapletin muut jäsenet jo tunnettiin kokeellisesti.

Ψ -hiukkaset ja lumo

Vuonna 1974 havaittiin $p+p \rightarrow e^+ + e^- + \dots$ ja $e^+ + e^- \rightarrow \mu^+ + \mu^-$ sironnoissa poikkeuksellisen korkeat piikit 3.095 GeV:n ja 3.7 GeV:n energioilla. Piikit olivat niin kapeita, että niitä vastaavia tiloja voidaan pitää hiukkasina ($\Delta E \Delta t \geq \hbar$). Näiden Ψ -hiukkasiksi (tai joskus J -hiukkasiksi) kutsuttujen hiukkasten ominaisuuksien selittämiseen ei kolmen kvarkin malli riittänyt. Otettiin käyttöön uusi kvanttiluku *lumo* C ja sitä vastaava neljäs kvarkki c (=charm). Kvarkkitaulukko on täydennettynä

kvarkki	B	S	q/e	C
u	1/3	0	2/3	0
d	1/3	0	-1/3	0
s	1/3	-1	-1/3	0
c	1/3	0	2/3	1

Kvarkkijärjestelmäkaaviot esitetään nyt kolmiulotteisessa $I_z Y C$ -avaruudessa. Keveimmät lumomesonit ovat D-mesoneja, joiden kvarkkirakenne on $D^+ = (c\bar{d})$, $D^0 = (c\bar{u})$, $D_s^+ = (c\bar{s})$, $D_s^0 = (c\bar{s})$ ja niiden antihiukkaset, kun taas kevein lumobaryoni on $\Lambda_c = (udc)$.

Kauneus ja totuus

Edellisten kvarkkien lisäksi on vielä löydetty kaksi muuta kvarkkia. Vuonna 1977 Fermilabin kokeissa havaittiin viides kvarkki, b (=bottom/beauty, pohja/kauneus) ja pitkän etsinnän seurauksena vuonna 1995 löydettiin viimeinen kvarkki, t (=truth/top, totuus/huippu). t -kvarkista ja sen antikvarkista koostuva mesoni on itseasiassa niin lyhytikäinen, ettei sitä voida suoraan havaita vaan sen olemassaolo on päätelty sen hajoamistuotteista. Täydennetty ja lopullinen kvarkkitaulukko on täten seuraavanlainen:

kvarkki	B	q/e	$\sim M (GeV/c^2)$	S	C	B	T
u	1/3	2/3	0,005	0	0	0	0
d	1/3	-1/3	0,01	0	0	0	0
c	1/3	2/3	1,5	0	1	0	0
s	1/3	-1/3	0,2	1	0	0	0
t	1/3	2/3	170	0	0	0	1
b	1/3	-1/3	4,7	0	0	1	0

Resonanssit

Suurin osa hiukkasista on hyvin lyhytikäisiä ($\tau \approx 10^{-23} s$) vahvojen vuorovaikutusten kautta hajoavia resonansseja. Esimerkiksi pionilla on lukuisia viritystiloja. Pionin kokonaisospin J on nolla ja pariteetti negatiivinen $J^P = 0^-$. Pionin resonanssihiukkasia ovat esim. ρ , a_0 , b , a_1 , a_2 , jotka vastaavat arvoja $J^P = 1^-, 0^+, 1^+, 1^+$ ja 2^+ vastaavasti. Myös kaonilla,

nukleoneilla ja hyperoneilla on suuri määrä resonansseja. Hadronien resonanssit ovat liian lyhytikäisiä suoraan havaittavaksi ja ne päätelläänkin invariantin massan W jakaumasta.

Tarkastellaan esimerkkinä hajontaa

$$\pi^+ + p \rightarrow X^0 + n \rightarrow \pi^+ + \pi^- + n.$$

Hajoavan hiukkasen X^0 invariantin massan neliö on

$$W^2 = (E_+ + E_-)^2 - (\mathbf{p}_+ + \mathbf{p}_-)^2 c^2,$$

missä alaviitteet $+$ ja $-$ viittavaat positiivisesti ja negatiivisesti varattuun pioniin. Resonanssit näkyvät piikkeinä invariantin massan W jakaumassa. Piikkien leveys $\Gamma = 1/\tau$ on 100 MeV:n suuruusluokkaa, kuten Heisenbergin epätarkkuusrelaatiosta voidaan päätellä.

Värikuoro vaikutus

Kvarkkimalli ei ole tällaisenaan tyydyttävä. Esimerkiksi Ω^- koostuu kolmesta s-kvarkista, joiden spinit ovat yhdensuuntaiset. Paulin kielto säännön tulisi estää kolmen identtisen kvarkin tila. Ratkaisun ongelmaan tuo jo v. 1964 esitetty lisäkvanttiluku, väri. Jokainen kvarkkilaaji voi esiintyä kolmessa eri väritilassa, punaisena, sinisenä ja keltaisena. Kolmesta pääväristä ja niiden komplementtiväreistä saadaan väritön lopputulos sekoittamalla – perusväriä ja sen komplementtiväriä, – kolmea perusväriä, – kolmea komplementtiväriä. Kaikki hadronit ovat värineutraaleja ja mainitut värittömät sekoitukset vastaavat mesonia, baryonia ja antibaryonia. Värisymmetriaryhmä on $SU(3)$. Värivarausta toimii vahvan vuoro vaikutuksen lähteenä.

Vahvan vuoro vaikutuksen matemaattinen teoria on kvanttiväridynamiikka (engl. lyhenne QCD). QCD on mittakenttäteoria, jonka mittabosoni on fotonin tavoin massaton gluoni. Välittäessään vuoro vaikutusta kahden kvarkin välillä gluoni vaihtaa näiden kvarkkien värejä, joten gluonin on oltava ”kaksivärinen”. Pääväreistä ja niiden komplementtiväreistä voidaan muodostaa seuraavat yhdistelmät: $\text{pun}\overline{\text{pun}}$, $\text{pun}\overline{\text{sin}}$, $\text{pun}\overline{\text{kel}}$, $\text{sin}\overline{\text{pun}}$, $\text{sin}\overline{\text{sin}}$, $\text{sin}\overline{\text{kel}}$, $\text{kel}\overline{\text{pun}}$, $\text{kel}\overline{\text{sin}}$, $\text{kel}\overline{\text{kel}}$. Kolmesta värittömästä tilasta $\text{pun}\overline{\text{pun}}$, $\text{sin}\overline{\text{sin}}$ ja $\text{kel}\overline{\text{kel}}$ voidaan muodostaa kaksi värillistä ja yksi väritön lineaarikombinaatio, joten vuoro vaikutuksen välittämiseen sopivia gluoneja on kahdeksaa lajia. Värivarauksesta johtuen gluonit vuoro vaikuttavat myös keskenään, minkä seurauksena ovat asymptoottinen vapaus ja väri vankeus.

1. Asymptoottinen vapaus

Väri voima heikkenee kvarkkien välisen etäisyyden pienetessä alle fermin etäisyyksillä. Hyvin pienillä ($\leq 0,2$ fm) etäisyyksillä häiriöteorian alimman kertaluvun termit dominoivat.

2. Väri vankeus

Väri vuoro vaikutus sitoo kvarkit ja gluonit vangituiksi tiloiksi, joilla ei ole väri varausta. Väri vuoro vaikutuksen sitomia tiloja ovat hadronit ja ytimet. Kvarkki tai gluoni ei voi esiintyä yksinään vapaana. Kun esimerkiksi mesonin

kvarkkia ja antikvarkkia pyritään loitontamaan toisistaan, värivoimakentän energia kasvaa ja kenttä materialisoituu uudeksi kvarkki-antikvarkkipariksi. Tällöin mesoni hajoaa kahdeksi mesoniksi.

Hadronien välinen ydinvoima on värivoimien jäännösefekti. Lähellä hadronia sen lähimmän kvarkin tai gluonin värivoima dominoi, vaikka keskimäärin värivoimat neutralisoivatkin toisensa. Näiden pienten ylimäärävoimien vaikutuksesta nukleonit sitoutuvat ytimiksi.

Kvarkki-gluoni-plasma

Eräs kvanttiväridynamiikan kiinnostava ennuste on, että vahvasti vuorovaikuttava ydinaine muodostaa hyvin korkeissa lämpötiloissa kvarkki-gluoni-plasmaa. Riittävät ääriolosuhteet toivotaan saatavan aikaan raskaiden ytimien suurenergiatörmäyksissä. Törmäyksessä aineen tiheys ja lämpötila kasvavat ja uusi aineen olomuoto voi hetkellisesti syntyä. Mahdollinen kvarkkiaine laajenee ja viilenee nopeasti, jolloin kvarkit ja gluonit kahlituvat takaisin hadroneiksi. CERNin ja Brookhavenin laboratorioissa on käynnissä koeohjelmat kvarkkiaineen tutkimiseksi. CERN:stä ilmoitettiin vuoden 2000 keväällä, että törmäyskokeissa olisi tämä aineen uusi olomuoto löydetty.

10.7 Vuorovaikutusten yhtenäistäminen

Sähkömagneettisilla ja heikoilla vuorovaikutuksilla on yhteisiä piirteitä. Esimerkiksi molempien vuorovaikutusten välittäjinä toimivat spin-1 bosonit. Fotonin tavoin heikkojen vuorovaikutusten kvantit W^\pm ja Z^0 esiintyvät myös reaalisina hiukkasina. Välibosonit syntyvät esim. protoni-antiprotoni törmäyksessä kvarkista ja antikvarkista, $u + \bar{d} \rightarrow W^+$, $d + \bar{u} \rightarrow W^-$, $q + \bar{q} \rightarrow Z^0$. Neutraali Z^0 -hiukkanen voi syntyä myös elektroni-positroni annihilaatiossa $e^+ + e^- \rightarrow Z^0$. Välibosonit hajoavat leptoniksi ja antileptoniksi, $W^- \rightarrow e + \bar{\nu}$, $Z^0 \rightarrow e^+ + e^-$ tai vastaaviin μ^- tai τ^- kanaviin. Leptonin energia on puolet välibosonin energiasta, joten välibosoni on helppo tunnistaa.

1960-luvulla S.Glashow, W.Weinberg ja A.Salam kehittivät sähkömagneettisten ja heikkojen vuorovaikutusten yhtenäisteorian, sähköheikkoteorian. Sähköheikkoteorian avulla ennustettiin Z^0 :n välittämät heikot neutraalivirrat kymmenisen vuotta ennen niiden kokeellista havaitsemista.

Sähköheikkoteorian mittasymmetria on rikottu, mikä ilmenee välibosonien W^\pm ja Z^0 massoina sekä sähkömagneettisen ja heikon voiman erilaisuuksina. Valon liikkuminen väliaineessa valon tyhjiönopeutta pienemmällä nopeudella aiheutuu fotonin vuorovaikutuksesta aineen elektronien kanssa. Tämä voidaan tulkita siten, että fotonille syntyy väliaineessa tehollinen lepomassa.

Sähköheikkoteoriassa W^\pm ja Z^0 oletetaan alunperin massattomiksi.

Vakuumissa oletetaan olevan skalaarikentän, joka hidastaa välibosonien kulkua ja aikaansaa niille massan. Kyseessä on Higgsin kenttä. Koska Higgsin kenttä oletetaan sähköisesti neutraaliksi, se ei hidasta fotonin kulkua ja jättää sen

leptomassattomaksi. Higgsin kenttä aikaansaa myös kvarkkien ja muiden leptonien kuin neutriinoiden massat. Kyseessä on spontaani symmetrian rikko. Myös vahvan vuorovaikutuksen taustalla on mittasymmetria. Kaikilla kolmella hiukkasvuorovaikutuksella on yhteisiä ominaisuuksia. Voimia välittävät spin-1 kvantit (fotoni, W^\pm , Z^0 , 8 gluonia) ja voimien suuruudet ovat verrannolliset vuorovaikuttavien fermionien varaukseen. Onkin pyritty aikaansaamaan suuri yhtenäisteoria, jonka mukaan kaikki vuorovaikutukset olisivat saman voiman ilmenemismuotoja.

Sähkömagneettisen vuorovaikutuksen voimakkuutta kuvaa hienorakennevakio α . Vastaavasti heikon ja vahvan vuorovaikutuksen hienorakennevakiot ovat α_w ja α_s . Varauksen varjostusilmioistä johtuen kytkentävakiot riippuvat vuorovaikutusenergiasta. Kytkentävakioiden arvot tunnetaan mittausten perusteella 100 GeV:n energiaan asti. Energialla 100 GeV hienorakennevakioiden arvot ovat $\alpha \sim 1/129$, $\alpha_w \sim 1/27$, $\alpha_s \sim 1/10$.

Hienorakennevakiot α_w ja α_s pienenevät ja α kasvaa vuorovaikutusenergian funktiona. 100 GeV:n energiassa mitattujen arvojen ja kenttäteoreettisten laskujen perusteella kaikki kolme vuorovaikutusta tulevat yhtä voimakkaiksi, kun $E = E_{GUT} \sim 10^{15}$ GeV.

Yhdistymisenergiaa suuremmissa energioissa on vain yksi voima. Kun vuorovaikutusenergia pienenee, tapahtuu energiaskaalassa E_{GUT} spontaani symmetrian rikko. Eräs suuren yhtenäisteorian ennuste on protonin hajonta. Toistaiseksi ei protonin hajontaa ole havaittu ja mittausten perusteella protonin elinajan tiedetään olevan suurempi kuin 10^{31} vuotta.