## Οπτική,

# Σύγχρονη, Ατομική & Μοριακή Φυσική για Βιολόγους

2011

Σαμουήλ Κοέν

## Μέρος Α. Οπτική

Κ0. Εισαγωγικό Σημείωμα Κυματικής	Σελίδα	
1. Απλή Αρμονική Ταλάντωση.	<i>K</i> 0-1	
1.1 Ορισμοί	<i>K</i> 0-1	
1.2 Η Αρχή της Υπέρθεσης (ή Επαλληλίας)		
1.3 Ηλεκτρικές Ταλαντώσεις	К0-3	
2. Κύματα	<i>K</i> 0-3	
2.1 Μηχανικά Κύματα 1 – Μία Διάσταση	<i>K</i> 0-3	
2.2 Μηχανικά Κύματα 2 – Κύματα Επιφάνειας & Σφαιρικά		
2.3 Ηλεκτρομαγνητικά Κύματα	<i>K</i> 0-6	
2.4 Συμβολή (Υπέρθεση) Κυμάτων		
2.5 Στάσιμα Κύματα	<i>K</i> 0-10	
2.6 Περίθλαση Κυμάτων	<i>K</i> 0-11	

### Κ1. Γεωμετρική Οπτική

1. Συνθήκη Ισχύος της Γεωμετρικής Οπτικής, Οπτικός Δρόμος, Αρχές Fermat και Αντιστρε-				
πτότηταςΚ				
2. Ο Νόμος της Ανάκλασης	-3			
3. Ο Νόμος της Διάθλασης & η Ολική Εσωτερική Ανάκλαση	-3			
4. Είδωλα & Παραξονική Προσέγγιση	-5			
5. Είδη Φακών & Τύπος Κατασκευαστών Λεπτών Φακών	-7			
6. Θεμελιώδης Εξίσωση Λεπτών Φακών, Μεγεθύνσεις & Γραφικός Προσδιορισμός Ειδώλων	,			
	-8			
7. Συστήματα Φακών	-9			
8. Φακοί Μη-Αμελητέου Πάχους	0			
9. Διαφράγματα	0			
9.1 Διαφράγματα Περιορισμού Φωτεινής Ισχύος & Κόρες Εισόδου και ΕζόδουΚ1-1	1			
9.2 Διαφράγματα Πεδίου και Παράθυρα Εισόδου και ΕζόδουΚ1-1	4			
<b>10.</b> Αριθμητικό Άνοιγμα (Numerical Aperture)	5			
<b>11. Το Ανθρώπινο Μάτι</b>	5			
11.1 Περιγραφή & ΛειτουργίαΚ1-1	5			
11.2 Οπτικά Χαρακτηριστικά, Γωνία Όρασης & Διακριτική Ικανότητα του ΜατιούK1-1	6			
<b>12. Ο Απλός Μεγεθυντής</b>	8			
<b>13.</b> Το Σύνθετο Μικροσκόπιο	9			

### Κ2. Περίθλαση και Χωρικά Φίλτρα

. Περίθλαση Fresnel, Περίθλαση Fraunhofer & Μετασχηματισμοί Fourier			
2. Παραδείγματα Προτύπων Περίθλασης	K2-3		
2.1 Απλή Ορθογώνια Σχισμή			
2.2 Αρχή του Babinet			
2.3 Κυκλικό Άνοιγμα			
2.4 Φράγμα Περίθλασης	K2-6		
3. Ο Ρόλος της Περίθλασης στην Απεικονιστική Λειτουργία Φακών & Οπτικώ	ον Συστημάτων		
	K2-7		
4. Το Οπτικό Φιλτράρισμα	K2-8		
5. Ο Φακός ως Φίλτρο Αποκοπής Υψηλών Τάξεων Περίθλασης	K2-9		
6. Διακριτική Ικανότητα Φασματοσκοπίου Φράγματος	<i>K</i> 2-11		
7. Περίθλαση ακτίνων Χ			

### Μέρος Β. Σύγχρονη, Ατομική & Μοριακή Φυσική

### K3. Εισαγωγικό Σημείωμα στη Φυσική του 20<sup>ου</sup> αιώνα +

1. Η Κλασσική Φυσική στο Γύρισμα του 19 <sup>ου</sup> προς 20° Αιώνα	<i>K</i> 3-1
2. Παράδειγμα Σωματιδιακής Συμπεριφοράς Η/Μ Κυμάτων: Το Φωτοηλεκτρικό Φ	Ραινόμενο
	<i>K</i> 3-2
3. Δεύτερο Παράδειγμα Σωματιδιακής Συμπεριφοράς Η/Μ Κυμάτων: Το Φαινόμ	evo Comp-
ton	<i>K</i> 3-5
4. Ο Κυματοσωματιδιακός Δυϊσμός & η Υπόθεση de Broglie	КЗ-6
5. Παράδειγμα Κυματικής Συμπεριφοράς Σωματιδίων: Περίθλαση Ηλεκτρονίων	<i>K</i> 3-8
6. Συνέπειες του Κυματοσωματιδιακού Δυϊσμού: Αρχή της Απροσδιοριστίας	<i>K</i> 3-10
7. Η Εξίσωση Schrödinger & ο Παράξενος αλλά & Συναρπαστικός Κβαντικός Μικ	ρόκοσμος
	<i>K</i> 3-12
7.1 Η εξίσωση Schrödinger & η Κυματοσυνάρτηση	<i>K</i> 3-12
7.2 Δέσμιες Καταστάσεις & Καταστάσεις του Συνεχούς	<i>K</i> 3-13
7.3 Ανακλαστικότητα και Διαπερατότητα σε ένα Σκαλοπάτι Δυναμικού	<i>K</i> 3-14
7.4 Το Φαινόμενο & το Μικροσκόπιο Σήραγγας	<i>K</i> 3-15

### Κ4. Στοιχεία Ατομικής Φυσικής

1. Προϊστορία	<i>K</i> 4-1
2. Τα Γραμμικά Φάσματα των Ατομικών Αερίων	<i>K</i> 4-2
2.1 Συνεχή και Γραμμικά Φάσματα Απορρόφησης & Εκπομπής	<i>K</i> 4-2
2.2 Γραμμικά Φάσματα του Υδρογόνου	<i>K</i> 4-4
3. Τα Μοντέλο του Bohr για το Άτομο του Υδρογόνου μεΟλίγη Υπόθεση de Η	Broglie K4-4
4. Κβαντομηχανική Περιγραφή του Ατόμου του Υδρογόνου	<i>K</i> 4-9
4.1 Προβλέψεις της Εζίσωσης Schrödinger	<i>K</i> 4-9
4.2 Δεν Είναι Όλες οι Μεταβάσεις Επιτρεπτές – Κανόνες Επιλογής	<i>K</i> 4-12
4.3 Το Σπιν του Ηλεκτρονίου	<i>K</i> 4-13
4.4 Μερικές Πρώτες Συνέπειες της Υπαρζης του Σπιν του Ηλεκτρονίου	<i>K</i> 4-15
5. Πολυηλεκτρονιακά Άτομα	<i>K</i> 4-15
5.1Εισαγωγικές Παρατηρήσεις	<i>K</i> 4-15
5.2 Η Απαγορευτική Αρχή του Pauli & η Ατομική Δομή	<i>K</i> 4-16
5.3 Μεταβάσεις στην Περιοχή των Ακτίνων Χ & του Ορατού-Υπεριώδους	<i>K</i> 4-20

### Κ5. Στοιχεία Μοριακής Φυσικής

1. Εισαγωγικά Σχόλια	<i>K</i> 5-1
2. Αλληλεπιδράσεις & Προσεγγίσεις	<i>K</i> 5-1
3. Η Ηλεκτρονιακή Ενέργεια ε <sub>el</sub> & οι Χημικοί Δεσμοί	<i>K</i> 5-4
3.1 Καμπύλες Ηλεκτρονιακής Ενέργειας	<i>K</i> 5-4
3.2 Κύρια Είδη Χημικών Δεσμών	<i>K</i> 5-5
3.2.1 Ιοντικός (ή Ετεροπολικός) Δεσμός	<i>K</i> 5-7
3.2.2 Ομοιοπολικός δεσμός	<i>K</i> 5-8
3.3 Άλλα Είδη Δεσμών Ι: Δεσμός van der Waals	<i>K</i> 5-10
3.4 Άλλα Είδη Δεσμών ΙΙ: Δεσμός Υδρογόνου	<i>K</i> 5-10
4. Η Ταλάντωση & Περιστροφή των Μορίων	<i>K</i> 5-12
5. Τα Μοριακά Φάσματα	<i>K</i> 5-15
5.1 Γενικές Παρατηρήσεις	<i>K</i> 5-15
5.2 Διατομικά Μόρια στην Αέρια Φάση	<i>K</i> 5-16
5.3 Βιολογικά Μόρια στο Φυσικό τους Περιβάλλον	<i>K</i> 5-17
6. Η Συνεστιακή Μικροσκοπία	<i>K</i> 5-18
6.1 Τυπική Μεθοδολογία & Γεωμετρία	<i>K</i> 5-18
6.2 Ειδικό Θέμα: Συνεστιακή Μικροσκοπία Διφωτονικής Απορρόφησης	<i>K</i> 5-20

Μέρος Α

Οπτική

### Κ0. Εισαγωγικό Σημείωμα Κυματικής

#### 1. Απλή Αρμονική Ταλάντωση

#### 1.1 Ορισμοί

Έστω το σύστημα του Σχ. 1. Το σώμα βρίσκεται στην αρχή σε ηρεμία, στη θέση ισορροπίας του y=0. Το ελατήριο δεν του ασκεί καμία δύναμη. Τραβάμε το σώμα μέχρι τη θέση  $y=y_{max}$ . Στη συνέχεια αφήνουμε το σώμα ελεύθερο. Λόγω της δύναμης που του ασκεί το ελατήριο, το σώμα ταλαντώνεται μεταξύ των θέσεων  $\pm y_{max}$  (θεωρούμε ότι δεν υπάρχουν τριβές). Σε κάθε χρονική στιγμή, η θέση του (μετατόπιση από τη θέση ισορροπίας) δίνεται από



τη σχέση (Σχ. 2)

$$y(t) = y_{\max} \cos(\omega t) \tag{1}$$

όπου  $y_{\text{max}} \ge 0$  το πλάτος και

$$\omega = 2\pi v = 2\pi/T \tag{2}$$

η κυκλική συχνότητα της ταλάντωσης, με v τη συχνότητα και T την περίοδο (η χρονική διάρκεια ενός «κύκλου» της κίνησης). Η ταχύτητα του σώματος (u=dy/dt) γράφεται ως,

$$u(t) = -u_{\max} \sin(\omega t), \qquad u_{\max} = \omega \cdot y_{\max} \ge 0$$
 (3)

και η επιτάχυνσή του  $(a=d^2y/dt^2)$ ως,

$$a(t) = -a_{\max} \cos(\omega t), \qquad a_{\max} = \omega^2 \cdot y_{\max} \ge 0.$$
(4)

Από τις (1) και (4) καθώς και τον νόμο του Νεύτωνα (F=ma) βρίσκουμε ότι  $F = -(m\omega^2)$ ·y. Η δύναμη αυτή έχει κάθε στιγμή κατεύθυνση αντίθετη στην κατεύθυνση της κίνησης, προσπαθώντας πάντα να επαναφέρει το σώμα στη θέση ισορροπίας (δύναμη επαναφοράς).

Κατά την ταλάντωση το σώμα έχει κινητική και δυναμική ενέργεια. Χρησιμοποιώντας τις παραπάνω σχέσεις η κινητική ενέργεια *K* [=(1/2)*mu*<sup>2</sup>] γράφεται,

$$K(t) = (1/2) \cdot m \cdot \omega^2 \cdot y^2_{\text{max}} \sin^2(\omega t)$$
(5)

και η δυναμική ενέργεια U δίνεται από τη σχέση

$$U(t) = (1/2) \cdot m \cdot \omega^2 \cdot y^2_{\text{max}} \cos^2(\omega t).$$
(6)

Από τις (5) και (6) παρατηρούμε ότι η μηχανική ενέργεια (που είναι το άθροισμά τους) είναι σε κάθε στιγμή σταθερή,

$$E = K + U = (1/2) \cdot m \cdot \omega^2 \cdot y^2_{\text{max}}$$
<sup>(7)</sup>

μια και δεν έχουμε θεωρήσει απώλειες ενέργειας (αμείωτη ταλάντωση σε αντίθεση με τη φθίνουσα). Την ενέργεια αυτή την προσφέραμε στο σύστημα όταν το τραβήξαμε από τη θέση ισορροπίας του στη θέση y<sub>max</sub> (παράγοντας έργο κατά τη μετατόπιση του σώματος).

Γενικεύουμε την (1) γράφοντας τη μετατόπιση y(t) ως,

#### $y(t)=y_{\max}\cos(\omega t + \varphi)$

όπου η γωνία φ (σταθερά φάσης) καθορίζει τη θέση κατά τη χρονική στιγμή t=0. Εάν π.χ. τη στιγμή αυτή το σώμα ξεκινούσε την ταλάντωσή του από τη θέση ηρεμίας y=0 και κατευθυνόταν προς θετικές μετατοπίσεις,  $\cos(\varphi)=0$  και  $\varphi = -\pi/2$ . Τότε, η ταλάντωση του σώματος θα γραφόταν  $y(t)=y_{max}\cos(\omega t - \pi/2)=y_{max}\sin(\omega t)$ . Επίσης, μέσω της σταθεράς φάσης μπορούμε να συγκρίνουμε την εξέλιξη δύο ή περισσότερων αρμονικών ταλαντώσεων ίδιας συχνότητας. Π.χ. στο Σχ. 2 συγκρίνονται δύο τέτοιες ταλαντώσεις, μία με  $\varphi_1=0$ 



και μία με  $\varphi_2 = \pi/4$ . Λέμε ότι οι δύο ταλαντώσεις έχουν διαφορά φάσης  $\Delta \varphi = \varphi_2 - \varphi_1 = \pi/4$ . Εάν  $\Delta \varphi = 2n\pi$ ,  $n=0,\pm 1,\pm 2...$  τότε λέμε ότι οι ταλαντώσεις είναι συμφασικές. Οι δύο μετατοπίσεις λαμβάνουν ταυτόχρονα τις μέγιστες, ελάχιστες και μηδενικές τιμές τους. Αντίθετα, εάν  $\Delta \varphi = (2n+1)\pi$ ,  $n=0,\pm 1,\pm 2...$ , λέμε ότι οι ταλαντώσεις είναι εντελώς εκτός φάσης Στην περίπτωση αυτή, όταν η μία μετατόπιση είναι μέγιστη  $(y_1=+y_{max,1})$  η άλλη είναι ελάχιστη  $(y_2=-y_{max,2})$ και αντίστροφα. Όλες οι άλλες διαφορές φάσης οδηγούν σε ενδιάμεσες περιπτώσεις.

#### 1.2 Η Αρχή της Υπέρθεσης (ή Επαλληλίας)

Κάποιο σώμα ή σημείο μπορεί να εκτελεί ταυτόχρονα δύο ή περισσότερες ταλαντώσεις. Επιπλέον, οι ταλαντώσεις αυτές μπορεί να εκτελούνται σε διαφορετικές διευθύνσεις πχ. κατά τη διεύθυνση x και κατά τη διεύθυνση y. Στην γενικότερη περίπτωση λοιπόν πρέπει να χειριστούμε τις μετατοπίσεις διανυσματικά, να γράψουμε δηλαδή την κάθε μία ως  $\vec{y}_i(t) = \vec{y}_{max,i} \cos(\omega_i t + \varphi_i)$ . Η αρχή της υπέρθεσης δηλώνει ότι η σύνθετη κίνηση του σημείου θα περιγράφεται από το διανυσματικό άθροισμα των επιμέρους κινήσεων. Εδώ όμως θα περιοριστούμε στη περίπτωση όπου όλες οι ταλαντώσεις εκτελούνται στην ίδια διεύθυνση, οπότε

(8)

το διανυσματικό άθροισμα καταλήγει σε ένα απλό αλγεβρικό άθροισμα. Π.χ. για δύο ταλαντώσεις ίδιας διεύθυνσης,  $y_1(t)$  και  $y_2(t)$ , η συνολική μετατόπιση θα είναι,

 $y_{tot}(t) = y_1(t) + y_2(t)$ 

Μέσω της αρχής της υπέρθεσης μπορούμε να χειριστούμε φαινομενικά περίπλοκες κινήσεις, αναλύοντάς τες σε απλούστερες. Τα παραπάνω θα μας χρησιμεύσουν όταν ασχοληθούμε με τη συμβολή και περίθλαση των κυμάτων.

#### 1.3 Ηλεκτρικές Ταλαντώσεις

Η ταλαντωτική συμπεριφορά δεν περιορίζεται στις κινήσεις των υλικών σωμάτων. Είναι γνωστό π.χ. ότι στο κύκλωμα LC του Σχ. 3 το ρεύμα που το διαρρέει μεταβάλλεται με το χρόνο ως  $I(t)=I_{max}sin(\omega t)$ . Η κυκλική συχνότητα δίνεται από τη σχέση  $\omega = 1/\sqrt{LC}$  (όπου C η χωρητικότητα του πυκνωτή και L ο συ-



ντελεστής αυτεπαγωγής του πηνίου) ενώ το μέγιστο ρεύμα  $I_{max}$  προσδιορίζεται από την αρχική ενέργεια που προσφέραμε στο κύκλωμα πριν από την έναρξη της ταλάντωσης. Η ενέργεια αυτή μοιράζεται σε κάθε στιγμή σε ενέργεια ηλεκτρικού πεδίου  $U_E$  (πυκνωτής) και ενέργεια μαγνητικού πεδίου  $U_B$  (πηνίο) που αντιστοιχούν στην κινητική και δυναμική ενέργεια K και U της μηχανικής ταλάντωσης που αναφέραμε προηγουμένως. Αντίστοιχες ταλαντωτικές συμπεριφορές με αυτές του ρεύματος ή του φορτίου παρατηρούμε επίσης τόσο για το ηλεκτρικό πεδίο E (μεταξύ των οπλισμών του πυκνωτή) όσο και για το μαγνητικό πεδίο B (στο εσωτερικό του πηνίου).

#### 2. Κύματα

#### 2.1 Μηχανικά κύματα 1 – Μία Διάσταση

Στο Σχ. 4, ένα σχοινί κρατιέται τεντωμένο, από τη μία πλευρά σε ένα τοίχο και από την άλλη από έναν άνθρωπο. Ο άνθρωπος κάποια στιγμή αρχίζει να κουνάει το χέρι του πάνω-κάτω. Ας υποθέσουμε ότι το χέρι του εκτελεί απλή αρμονική ταλάντωση. Η διαταραχή αυτή (το κύμα) διαδίδεται κατά μήκος του μέσου (σχοινιού) του οποίου τα σημεία αρχίζουν και αυτά



(9)

να εκτελούν απλή αρμονική ταλάντωση ίδιας συχνότητας με αυτή του χεριού. Συνεπώς,

η συχνότητα ν της ταλάντωσης κάθε σημείου του μέσου καθορίζεται αποκλειστικά από την πηγή (χέρι). Από την άλλη,

η ταχύτητα υ με την οποία διαδίδεται η διαταραχή εξαρτάται αποκλειστικά από το μέσο διάδοσης Προσοχή: Μη συγχέετε την ταχύτητα διάδοσης του κύματος υ με τη ταχύτητα u της ταλάντωσης του κάθε σημείου. Τέλος, το μήκος κύματος λ ορίζεται ως η απόσταση κατά την οποία διαδίδεται το κύμα στη διάρκεια μιας περιόδου T=1/v. Επακόλουθα,

το μήκος κύματος λ καθορίζεται πλήρως από τη συχνότητα και την ταχύτητα του κύματος Συγκεκριμένα,

	$\lambda = vT = v/v$	$\rightarrow$	$v = \lambda \cdot v$	(10	))
--	----------------------	---------------	-----------------------	-----	----

(θεμελιώδης εξίσωση της κυματικής). Σκοπός μας τώρα είναι να βρούμε την εξίσωση που θα μας περιγράφει την παραπάνω εικόνα για όλα τα σημεία του μέσου διάδοσης. Έστω ότι η ταλάντωση της πηγής, την οποία θα χρησιμοποιήσουμε ως το «ρολόι» μας, περιγράφεται μέσω της  $y_{\pi\eta\gamma\eta\varsigma}(t)=y_{max}\sin(\omega t)$ . Το κάθε σημείο του μέσου ξεκινά την ταλάντωσή του καθυστερημένα σε σχέση με την πηγή κατά χρόνο ίσο με τον χρόνο που χρειάστηκε το κύμα να φτάσει σε αυτό, δηλαδή κατά z/v. Την καθυστέρηση αυτή θα την εκφράσουμε μέσω μιας σταθεράς φάσης  $\varphi(z)$ . Συνεπώς, η ταλάντωση του σημείου στο z γράφεται ως  $y(z,t)=y_{max}sin(\omega t - \varphi(z))$ . Εάν η καθυστέρηση ήταν ακριβώς ίση με μία περίοδο τότε η σταθερά φάσης θα ήταν ίση με  $2\pi$  και η θέση  $z=\lambda$ . Στη γενικότερη περίπτωση έχουμε λοιπόν  $\varphi(z)=(2\pi)\cdot z/\lambda$  και η ταλάντωση του σημείου αυτού γράφεται,

$$y(z,t) = y_{\max} \sin(\omega t - 2\pi z/\lambda) = y_{\max} \sin(\omega t - kz)$$
(11)

με  $k=2\pi/\lambda$  τον λεγόμενο κυματικό αριθμό (ή κυματάριθμο).

Κατά τη διάδοση του κύματος, τα σημεία του μέσου δεν μεταφέρονται (εκτελούν απλώς ταλαντώσεις γύρω από τη θέση ισορροπίας τους) και συνεπώς δεν υπάρχει μεταφορά μάζας. Μέσω του κύματος όμως μεταφέρεται ενέργεια και ισχύς (που την προσφέρει η πηγή). Αποδεικνύεται ότι η χρονική μέση τιμή της μεταφερόμενης ισχύος (μέση μεταφερόμενη ενέργεια στη μονάδα του χρόνου) γράφεται ως,

$$P_{\text{avg}} = \mathbf{C} \cdot \mathbf{y}^2_{\text{max}} \tag{12}$$

με C μια σταθερά που εξαρτάται από τη συχνότητα και την ταχύτητα v.

#### 2.2 Μηχανικά Κύματα 2 – Κύματα Επιφάνειας & Σφαιρικά.

Προφανώς, κύματα δεν διαδίδονται μόνο σε μία διάσταση, μπορούν να διαδίδονται και σε δύο (επιφάνεια) ή τρεις διαστάσεις. Πιθανότατα, τα γνωστότερα επιφανειακά κύματα είναι αυτά που διαδίδονται στην επιφάνεια ενός υγρού. Το Σχ. 5 περιγράφει επιφανειακά κύματα που προκαλούνται από μία σημειακή πηγή (π.χ. σταγόνα) και διαδίδονται απομακρυνόμενα από αυτήν προς όλες τις κατευθύνσεις.





Δημιουργούνται έτσι επάνω στην επιφάνεια καμπύλες που αποτελούνται από όλα τα σημεία στα οποία το κύμα φτάνει την ίδια χρονική στιγμή. Οι καμπύλες αυτές ονομάζονται μέτωπα κύματος (ή κυματομέτωπα). Όλα τα σημεία ενός κυματομετώπου ταλαντώνονται με το ίδιο πλάτος και, κυρίως, συμφασικά. Στο Σχ. 5 τα κυματομέτωπα είναι ομόκεντροι κύκλοι με κέντρο την πηγή. Συνήθως σχεδιάζουμε τα κυματομέτωπα έτσι ώστε να απέχουν μεταξύ τους κατά ένα μήκος κύματος (Σχ. 5(β)).

Αντίστοιχα, για τα σφαιρικά κύματα, όπως αυτό του Σχ. 6, τα κυματομέτωπα είναι ομόκεντρες σφαίρες με κέντρο την πηγή. Όταν όμως τα σχεδιάζουμε, τις περισσότερες φορές τα αναπαριστούμε ως κυματομέτωπα επιφάνειας, όπως φαίνεται στο Σχ. 6(β). Επιπλέον, όπως γίνεται φανερό από το σχήμα αυτό, σε μεγάλες αποστάσεις μικρά τμήματα των κυματομετώπων είναι σχεδόν επίπεδα. Για το λόγο αυτό τα κύματα αυτά τα ονομάζουμε επίπεδα κύματα.

Για να περιγράψουμε τη μεταφορά ενέργειας από ένα κύμα στις τρείς διαστάσεις, χρησιμοποιούμε συνήθως, αντί της μέσης ισχύος, τη χρονική μέση τιμή



της έντασης Ι του κύματος (μέση ισχύς ανά μονάδα επιφάνειας). Υποθέστε λοιπόν ότι έχουμε ένα σφαιρικό κύμα και ότι η πηγή προσφέρει μέση ισχύ  $P_0$ . Σε απόσταση (ακτίνα) r από την πηγή η ισχύς αυτή έχει «μοιραστεί» σε όλη την επιφάνεια μιας σφαίρας το εμβαδόν της οποίας είναι ίσο με  $S=4\pi r^2$ . Από τη σχέση I=P/Sγια την ένταση έχουμε ότι για τα σφαιρικά κύματα σε κάθε σημείο της επιφάνειας,

$$I_{avg}(r) = \frac{P_o}{4\pi r^2}$$
(14)

Η παραπάνω σχέση υποδηλώνει ότι το πλάτος της ταλάντωσης των σημείων του μέσου θα μειώνεται με την απόσταση. Πράγματι, η εξίσωση κύματος για ένα σφαιρικό κύμα γράφεται ως

$$y(r,t) = \frac{A}{r}\sin(\omega t - kr)$$
<sup>(15)</sup>

με Α μία σταθερά. Σε μεγάλες αποστάσεις όπου, όπως είπαμε, μπορούμε να προσεγγίσουμε το σφαιρικό κύμα ως επίπεδο, θεωρούμε σταθερό πλάτος (εξίσωση παρόμοια με την (11)) και η μέση έντασή του είναι και αυτή ανεξάρτητη της απόστασης. Γενικότερα, αυτό που αξίζει να θυμόμαστε είναι ότι,

$$I_{\rm avg} \propto (\pi \lambda \dot{\alpha} \tau \sigma \varsigma)^2$$
 (16)

ότι δηλαδή η μέση ένταση είναι ανάλογη του τετραγώνου του πλάτους ταλάντωσης των σημείων του μέσου.

#### 2.3 Ηλεκτρομαγνητικά Κύματα

Στο κύκλωμα του Σχ. 3, η χωρητικότητα C και η<sub>(α)</sub> αυτεπαγωγή L είναι περιορισμένες σε μικρό χώρο. Ως αποτέλεσμα αυτού, το ηλεκτρικό πεδίο περιορίζεται στο χώρο μεταξύ των οπλι-<sup>(β)</sup> σμών του πυκνωτή ενώ το μαγνητικό πεδίο στο εσωτερικό του πηνίου. Συνεπώς, το κύκλωμα δεν εκπέμπει ενέργεια σε μεγάλες αποστάσεις.



Όμως, ένα κύκλωμα όπως αυτό που φαίνεται στο Σχ. 7 δημιουργεί ένα ηλεκτρικό και ένα μαγνητικό πεδίο που είναι απεντοπισμένα και διαδίδονται σε μεγάλες αποστάσεις. Πρόκειται για μία πηγή εναλλασσόμενης τάσης συνδεδεμένη με δύο ευθύγραμμα σύρματα. Η κεραία αυτή είναι ένα κύκλωμα εξαναγκασμένης ταλάντωσης. Αυτό που μας ενδιαφέρει εδώ όμως είναι η μορφή και διάδοση των δύο πεδίων σε μεγάλες αποστάσεις από την κεραία. Αυτή φαίνεται στο Σχ. 8. Παρατηρούμε ότι το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο είναι πάντα κάθετα μεταξύ τους, διαδίδονται κατά τον ίδιο τρόπο όπως και ένα μηχανικό κύμα (σχέσεις (11) ή (15)) και είναι συμφασικά. Όταν λοιπόν μιλάμε για Ηλεκτρομαγνητικά (Η/Μ) κύματα, η διαδιδόμενη διαταραχή αφορά ένα ηλεκτρικό και ένα μαγνητικό πεδίο, δημιουργείται από την κεραία (πηγή) και διαδίδονται και στο χώρο χωρίς να υπάρχει η ανάγκη κάποιου μέσου διάδοσης. Πράγματι, τα Η/Μ κύματα διαδίδονται και στο κενό με ταχύτητα ίση με την ταχύτητα του φωτός στο κενό  $c_0=3\times10^8$  m/s. Σε όλα τα υλικά διαδίδονται με μικρότερη ταχύτητα. Επίσης τα Η/Μ κύματα είναι εγκάρσια, δηλαδή η διεύθυνση ταλάντωσης των *Ε* και *Β* είναι κάθετη στη διεύθυνση διάδοσής τους. Ακόμη, μπορούμε να μιλήσουμε και εδώ για σφαιρικά και επίπεδα κύματα,



κυματομέτωπα κλπ. Τέλος ισχύει και για αυτά η αρχή της επαλληλίας. Όπως έχουμε μάθει ήδη στη Γ' Λυκείου, η ύπαρξη Η/Μ κυμάτων προτάθηκε από τη θεωρία του Maxwell. Η θεωρία προβλέπει ότι η γένεση των κυμάτων αυτών οφείλεται στην επιταχυνόμενη κίνηση ηλεκτρικών φορτίων και ότι η ταυτόχρονη διάδοση ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου οφείλεται στο φαινόμενο της επαγωγής (χωροχρονικά μεταβαλλόμενο μαγνητικό πεδίο δημιουργεί ηλεκτρικό πεδίο και το αντίστροφο). Η θεωρία επίσης ενοποίησε τον ηλεκτρομαγνητισμό με την Οπτική. Πράγματι, η θεμελιώδης εξίσωσης της κυματικής για τα Η/Μ κύματα που διαδίδονται στο κενό γράφεται,

$$c_0 = \nu \cdot \lambda_0$$
 (17)

και, προφανώς, το μήκος κύματος  $\lambda_0$  καθορίζεται πλήρως από τη συχνότητα (εφόσον η  $c_0$  είναι μια παγκόσμια σταθερά). Από την άλλη, οι συχνότητες των Η/Μ κυμάτων μπορούν να διαφέρουν κατά πολλές τάξεις μεγέθους. Στα Η/Μ κύματα συμπεριλαμβάνονται λοιπόν (κατά αύξουσα συχνότητα) τα ραδιοφωνικά κύματα, τα μικροκύματα, η υπέρυθρη ακτινοβολία, η ορατή στον άνθρωπο ακτινοβολία (δηλαδή *το φως*), η υπεριώδης ακτινοβολία, οι ακτίνες Χ και οι ακτίνες γ (Σχ. 9).



Όσον αφορά την Οπτική, μας ενδιαφέρει το ορατό φάσμα (φάσμα≡περιοχή) που ξεκινά από το υπέρυθροερυθρό ( $\lambda_0 \approx 700 \text{ nm} - 1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$ ), περιλαμβάνει το πράσινο (≈500 nm) και τελειώνει στο ιώδες-υπεριώδες (≈400 nm). Το ανθρώπινο μάτι είναι πιο ευαίσθητο στα ≈555 nm (πράσινο-κίτρινο). Όπως είπαμε, η ταχύτητα διάδοσης του φωτός στα διαφανή ή ημιδαφανή σε αυτό υλικά (π.χ. γυαλιά), έστω *c*, είναι μικρότερη από τη *c*<sub>0</sub>. Χρησιμοποιούμε το λεγόμενο δείκτη διάθλασης *n* ως μέτρο σύγκρισης των *c* και *c*<sub>0</sub>. Ο δείκτης διάθλασης ορίζεται ως,

$$n = \frac{C_0}{c}.$$
(18)

και, εφόσον η συχνότητα του κύματος δεν εξαρτάται από το υλικό διάδοσης (θυμηθείτε ότι καθορίζεται αποκλειστικά από την πηγή), η μεταβολή ταχύτητας σε κάθε υλικό μεταβάλλει και το μήκος κύματος. Από τη θεμελιώδη εξίσωση της κυματικής σε κάποιο υλικό (*c*=*v*·λ) έχουμε λοιπόν ότι,

$$n = \frac{\lambda_{o}}{\lambda}.$$
(19)

Σημαντικό είναι να θυμόμαστε ότι ο δείκτης διάθλασης εξαρτάται από την συχνότητα του κύματος ή, ισοδύναμα, από το  $\lambda_0$  (διασκεδασμός). Στις συνήθεις περιπτώσεις έχουμε μείωση του *n* όσο το  $\lambda_0$  αυξάνεται. Τέλος να σημειώσουμε ότι για τη συντριπτική πλειοψηφία των φαινομένων της οπτικής που θα εξετάσουμε, υπεύθυνο είναι το ηλεκτρικό πεδίο του Η.Μ κύματος και όχι το μαγνητικό. Για το λόγο αυτό συνήθως παραλείπουμε και δε σχεδιάζουμε το μαγνητικό πεδίο.

#### 2.4 Συμβολή (Υπέρθεση) Κυμάτων

### Θεωρήστε δύο $πηγές τις <math>S_1$ και $S_2$ που εκπέμπουν κύματα κατά z=0 z=l z Σχήμα 10.

την ίδια κατεύθυνση, όπως φαίνεται στο Σχ. 10. Οι δύο πηγές πάλλονται με το ίδιο πλάτος, έχουν την ίδια συχνότητα και είναι συμφασικές. Επιπλέον, απέχουν μεταξύ τους κατά *l*. Έτσι λοιπόν σε κάποια θέση *z* δεξιά της S<sub>2</sub>, το κύμα που προέρχεται από την S<sub>1</sub> γράφεται ως  $y_1(z,t) = y_{max} sin(\omega t - kz)$  ενώ το κύμα από την S<sub>2</sub> ως  $y_2(z,t) = y_{max} sin(\omega t - k(z-l))$ . Από την αρχή της υπέρθεσης γνωρίζουμε ότι η σύνθετη κίνηση στο σημείο *z* θα περιγράφεται από το αλγεβρικό άθροισμα των δύο επιμέρους ταλαντώσεων,

$$y_{\text{tot}}(t) = y_1(t) + y_2(t) = y_{\text{max}}[\sin(\omega t - kz) + \sin(\omega t - k(z - l))].$$
(20)

Παρατηρούμε ότι η διαφορά φάσης των δύο ταλαντώσεων είναι,

$$\Delta \varphi = k(z-l) - kz = -kl \tag{21}$$

και χρησιμοποιώντας την τριγωνομετρία, η σχέση (20) μπαίνει στη μορφή,

$$y_{\text{tot}}(t) = 2y_{\text{max}} \cdot \cos(\Delta \varphi/2) \cdot \sin(\omega t - kz + \Delta \varphi/2)).$$
(22)

Κάθε σημείο z λοιπόν εκτελεί ταλάντωση με πλάτος  $|2y_{max} \cdot \cos(\Delta \varphi/2)|$ . Εφόσον η μέση ισχύς που μεταφέρεται σε κάθε σημείο από τις δύο πηγές (όπως και η ένταση στις τρεις διαστάσεις) είναι ανάλογη του τετραγώνου του πλάτους (σχέσεις (12) και (16)) θα έχουμε

$$P_{\rm avg} \propto 4y^2_{\rm max} \cdot \cos^2(\Delta \varphi/2) = 2y^2_{\rm max} \cdot [1 + \cos(\Delta \varphi)].$$
<sup>(23)</sup>

Επιπλέον, εφόσον για την ισχύ που προέρχεται από κάθε πηγή ξεχωριστά, έστω  $P_{\text{avg,o}}$ , έχουμε ότι  $P_{\text{avg,o}} \propto y^2_{\text{max}}$ , μπορούμε τελικά να γράψουμε

$$P_{\text{avg}} = 2P_{\text{avg,o}}[1 + \cos(\Delta \varphi)].$$
<sup>(24)</sup>

Η σχέση (24) μας λέει ότι εάν η απόσταση l είναι έτσι επιλεγμένη ώστε η διαφορά φάσης να είναι  $\Delta \varphi = 2n\pi$ ,  $n=0,\pm 1,\pm 2...$ , τότε κάθε σημείο του μέσου διάδοσης πάλλεται με διπλάσιο πλάτος και η μέση ισχύς είναι τετραπλάσια της ισχύος κάθε πηγής ξεχωριστά. Εάν όμως  $\Delta \varphi = (2n+1)\pi$ ,  $n=0,\pm 1,\pm 2...$ , τότε  $\cos(\Delta \varphi)=-1$  και τόσο το πλάτος όσο και η συνολική μέση ισχύς είναι μηδέν. Στην περίπτωση αυτή όλα τα σημεία του μέσου δεξιά της S<sub>2</sub> στο Σχ. 10 θα παρέμεναν ακίνητα (ο παρατηρητής δεν βλέπει κάθε μία κίνηση ξεχωριστά αλλά την επαλληλία τους). Για όλες τις άλλες, ενδιάμεσες, διαφορές φάσης η συνολική ισχύς θα έχει τιμές μεταξύ των 0 και 4 $P_{avg,o}$ .

Το παραπάνω παράδειγμα δεν συναντάται εύκολα στην πράξη. Για να παρουσιάσουμε κάτι ρεαλιστικότερο, θα το γενικεύσουμε στις τρεις διαστάσεις, συμπεριλαμβάνοντας και το φως (Η/Μ κύματα). Πριν προχωρήσουμε θα πρέπει να κάνουμε μια μικρή πα-

Σχήμα 11.

ρένθεση και να παρουσιάσουμε την *Αρχή του Huygens*. Η τελευταία είναι ένα χρήσιμο εργαλείο με το οποίο μπορούμε να μελετήσουμε τη διάδοση των κυμάτων, αν και, από φυσική άποψη, δεν είναι αυστηρά θεμελιωμένη. Η Αρχή του Huygens λοιπόν δηλώνει ότι:

Κάθε σημείο ενός διαδιδόμενου κυματομετώπου μπορεί να θεωρηθεί ως πηγή δευτερογενών σφαιρικών κυμάτων (ίδιας συχνότητας και ταχύτητας διάδοσης με το υπ' όψη κύμα), έτσι ώστε σε κάποια μεταγενέστερη χρονική στιγμή το νέο κυματομέτωπο να είναι η περιβάλλουσα («φάκελος») αυτών των δευτερογενών κυμάτων. Παραδείγματα της παραπάνω πρότασης για τις περιπτώσεις ενός επίπεδου και ενός σφαιρικού κύματος φαίνονται στο Σχ. 11.

Επιστρέφουμε τώρα στο θέμα της συμβολής όπου θα χρησιμοποιήσουμε ως ένα επιπλέον παράδειγμα τη διάταξη του Young που φαίνεται στο Σχ. 12. Θεωρήστε την πηγή S που εκπέμπει σφαιρικά φωτεινά κύματα μίας μόνο συχνότητας, είναι δηλαδή μια μονοχρωματική πηγή. Το κύμα διαδίδεται προς μία οθόνη που έχει δύο μικρές οπές σε ίσες αποστάσεις από τον άξονα του συστήματος. Συνεπώς, οι οπές βρίσκονται επί του ιδίου κυματομετώπου. Τα σημεία του κυματομετώπου αυτού στις περιοχές των οπών λειτουργούν, σύμφωνα με την αρχή του Huygens, ως δευτερογενείς πηγές, S<sub>1</sub> και S<sub>2</sub>, σφαιρικών



κυμάτων. Λόγω της ίσης απόστασης των S<sub>1</sub> και S<sub>2</sub> από την S λοιπόν, οι δύο αυτές φωτεινές πηγές είναι συμφασικές. Θεωρούμε επιπλέον ότι είναι και σύμφωνες. Προσοχή: οι δύο όροι δεν είναι ταυτόσημοι. Σύμφωνες ονομάζονται οι πηγές των οποίων η διαφορά φάσης  $\Delta \varphi$  δεν αλλάζει με το χρόνο (αλλά δεν είναι αναγκαστικά μηδενική ή ακέραιο πολλαπλάσιο του 2π). Σε απόσταση L από την οθόνη με τις οπές υπάρχει μια ακόμη οθόνη στην οποία φτάνουν τα δύο κύματα. Σε κάποια απόσταση x από τον άξονα του συστήματος οι αποστάσεις  $r_1$  και  $r_2$  που διανύουν τα κύματα είναι προφανώς διαφορετικές. Αυτό σημαίνει ότι τα δύο κύματα τα στο σημείο αυτό δεν θα είναι πλέον συμφασικά αλλά θα έχουν μία διαφορά φάσης

$$\Delta \varphi = kr_2 - kr_1 = k(r_2 - r_1) = k\Delta r.$$
<sup>(25)</sup>

Ακολουθούμε τώρα την ίδια διαδικασία που παρουσιάσαμε παραπάνω, χρησιμοποιώντας την αρχή της υπέρθεσης, και υπολογίζουμε τη συνολική μέση ένταση στο σημείο x. Το αποτέλεσμα γράφεται ως

$$I_{\text{tot}} = I_1 + I_2 + 2[I_1 \cdot I_2]^{1/2} \cos(\Delta \varphi)$$
(26)

όπου  $I_1$  και  $I_2$  οι μέσες εντάσεις του κάθε ενός κύματος ξεχωριστά. Εδώ, σε αντίθεση με το προηγούμενο παράδειγμα, οι δύο εντάσεις δεν είναι ίδιες λόγω της διαφοράς των πλατών των δύο κυμάτων στο σημείο x. Αυτή η διαφορά πλατών οφείλεται στη διαφορά των αποστάσεων  $r_1$  και  $r_2$  (κοιτάξτε τη σχέση (15)). Στη πραγματικότητα η σχέση (26) ισχύει για οποιοδήποτε τύπο κυμάτων (σφαιρικά, επίπεδα κλπ) και για διαφορές φάσης  $\Delta \varphi$  που είναι ανεξάρτητες του χρόνου. Η τελευταία απαίτηση εξηγεί το λόγο για τον οποίο υποθέσαμε ότι οι δύο πηγές είναι σύμφωνες. Προβλέπει δε τη μεταβολή της έντασης μεταξύ μιας μέγιστης τιμής (φωτεινοί κροσσοί συμβολής)

$$I_{\max} = I_1 + I_2 + 2[I_1 \cdot I_2]^{1/2} \quad \gamma \iota \alpha \, \Delta \varphi = 2n\pi, \, n = 0, 1, 2, \dots$$
(27)

και μιας ελάχιστης τιμής (σκοτεινοί κροσσοί)

$$I_{\min} = I_1 + I_2 - 2[I_1 \cdot I_2]^{1/2} \gamma \iota \alpha \, \Delta \varphi = (2n+1)\pi, \, n=0,1,2,\dots$$
(28)

Προσέξτε ότι κατά την ενισχυτική συμβολή (σχέση (27)) η συνολική ένταση είναι μεγαλύτερη από το άθροισμα των δύο εντάσεων ενώ κατά την καταστρεπτική συμβολή (σχέση (28)) είναι μικρότερη από αυτό. Έχουμε δηλαδή μια ανακατανομή της έντασης σε σχέση με το απλό άθροισμα  $I_1 + I_2$ . Η συμβολή λοιπόν είναι ένα φαινόμενο μέσω του οποίου οι μεταβολές φάσης (που ειδικά για το φως δεν μπορούν να παρατηρηθούν από το μάτι ή τους ανιχνευτές) μετατρέπονται σε μεταβολές φωτεινής έντασης που μπορούν να παρατηρηθούν ή μετρηθούν. Η εισαγωγή διαφοράς φάσης μεταξύ των δύο κυμάτων μπορεί να γίνει με διάφορους τρόπους.

Ειδικά για το συμβολόμετρο του Young του Σχ. 12, μπορούμε να βρούμε την έκφραση για τη διαφορά δρόμου Δr γεωμετρικά. Το ακριβές αποτέλεσμα είναι,

$$\Delta r = \frac{2 \cdot d \cdot x}{\sqrt{L^2 + (x - d/2)^2} + \sqrt{L^2 + (x + d/2)^2}}$$
(29)

με *d* την απόσταση των δύο πηγών. Όμως, εάν η απόσταση των δύο πηγών από την τελική οθόνη παρατήρησης είναι πολύ μεγαλύτερη της μεταξύ τους απόστασης, ισχύει δηλαδή *L>>d*, η (29) απλοποιείται σημαντικά και έχουμε

$$\Delta r \approx \frac{d \cdot x}{L}.$$
(30)

Η παραπάνω παραδοχή αντιστοιχεί στο να υποθέσουμε ότι αντί για σφαιρικά κύματα έχουμε επίπεδα με περίπου ίσες μέσες εντάσεις  $I_1 \approx I_2$ . Από την (28) βλέπουμε ότι όταν οι δύο εντάσεις είναι ίσες η ελάχιστη μέση ένταση είναι μηδενική και έχουμε τη μέγιστη δυνατή αντίθεση έντασης (contrast) μεταξύ φωτεινών και σκοτεινών κροσσών. Προσέξτε επίσης ότι η διαφορά δρόμου  $\Delta r$  και επακόλουθα και η διαφορά φάσης  $\Delta \varphi$  εξαρτώνται από τη θέση x στην οθόνη. Αυτή η εναλλαγή φωτεινών και σκοτεινών κροσσών φαίνεται στο παράδειγμα του Σχ. 13 στην περίπτωση που αυτά παράγονται στην επιφάνεια ενός υγρού.

Ερώτηση: Τι θα συνέβαινε εάν οι πηγές δεν ήταν σύμφωνες και η Δφ μεταβαλλόταν με το χρόνο;



#### 2.5 Στάσιμα Κύματα.

Τα στάσιμα κύματα είναι μία άλλη περίπτωση επαλληλίας κυμάτων. Θεωρήστε δύο επίπεδα κύματα ίσου πλάτους που διαδίδονται κατά την ίδια διεύθυνση αλλά αντίθετες κατευθύνσεις (+z και – z αντίστοιχα). Σε κάποιο σημείο z οι απομακρύνσεις τους γράφονται

$$y_1 = y_{\text{max}} \cdot \sin(\omega t - kz) \tag{31a}$$

και

$$y_2 = y_{\text{max}} \cdot \sin(\omega t + kz). \tag{31\beta}$$

Χρησιμοποιώντας την αρχή της επαλληλίας ( $y_{tot} = y_1 + y_2$ ) μετά από κάποιες τριγωνομετρικές πράξεις η συνολική απομάκρυνση γράφεται ως

$$y_{\text{tot}}(z,t)=2y_{\text{max}}\cdot\cos(kz)\cdot\sin(\omega t).$$

Η σχέση (32) μας λέει ότι το σημείο στη θέση z ταλαντώνεται στο χρόνο με κυκλική συχνότητα ω, όπως και τα επιμέρους κύματα, αλλά τόσο το πλάτος όσο και η φάση του μεταβάλλονται με τη θέση αυτή. Τα σημεία για τα οποία ισχύει  $\cos(kz)=0$  δεν ταλαντώνονται καθόλου και ονομάζονται δεσμοί. Αντίθετα τα σημεία για τα οποία ισχύει  $|\cos(kz)|=1$  ταλαντώνονται με μέγιστο πλάτος  $2y_{max}$  και ονομάζονται κοιλίες. Όλα τα υπόλοιπα σημεία έχουν πλάτη μεταξύ 0 και  $2y_{max}$ . Διαδοχικοί δεσμοί ή διαδοχικές κοιλίες απέχουν απόσταση Δz=λ/2 (ενώ διαδοχικός δεσμός



(32)

**από κοιλία λ/4)** – Σχ. 14. Τέλος, σημεία μεταξύ δύο δεσμών πάλλονται συμφασικά ενώ είναι εκτός φάσης κατά π με τα σημεία εκατέρωθεν των δεσμών αυτών.

Θεωρήστε τώρα μία χορδή (π.χ. μιας κιθάρας) τεντωμένη μεταξύ δύο ακλόνητων άκρων. Έστω ότι το μήκος της χορδής είναι *l*. Εάν χτυπήσουμε τη χορδή αυτή θα αρχίσει να πάλλεται και θα δημιουργηθεί ένα στάσιμο κύμα από τα πολλά κύματα που θα διαδίδονται κατά μήκος της κατά τις δύο κατευθύνσεις και θα ανακλώνται στα δύο ακλόνητα άκρα. Τα δύο τελευταία προφανώς δεν θα πάλλονται καθόλου, θα είναι δηλαδή δεσμοί. Το σημαντικό στοιχείο εδώ είναι ότι η χορδή δεν μπορεί να πάλλεται σε οποιοδήποτε μήκος κύματος. Πάλλεται μόνον σε εκείνα τα μήκη κύματος για τα οποία ισχύει

$$l = m \frac{\lambda_m}{2}, m = 1, 2, \dots$$
(33)

για τα οποία δηλαδή το μήκος της αντιστοιχεί σε ακέραιο αριθμό ημικυμάτων (Σχ. 14). Σε αυτά τα μήκη κύματος αντιστοιχούν φυσικά και κάποιες συχνότητες που δίνονται από τη (10). Για όλες τις άλλες συχνότητες η ταλάντωση της χορδής είναι αμελητέα (έχουμε δηλαδή καταστροφική συμβολή μεταξύ των πολλών κυμάτων ίδιας συχνότητας που διαδίδονται στη χορδή). Συνεπώς τα μήκη κύματος στα οποία μπορει να ταλαντωθεί η χορδή είναι όπως λέμε **διάκριτα**.

#### 2.6 Περίθλαση Κυμάτων

Όπως υπονοήσαμε και παραπάνω η συμβολή δύο κυμάτων γενικεύεται και στην περίπτωση συμβολής περισσοτέρων των δύο κυμάτων. Μια ενδιαφέρουσα περίπτωση αποτελεί το φαινόμενο της περίθλασης, όπου το κύμα συναντά εμπόδια ή οπές. Ως παράδειγμα, ας υποθέσουμε ότι ένα επίπεδο κύμα που προσπίπτει σε μία οπή (Σχ. 15). Θεωρούμε ότι κάθε επίπεδο κυματομέτωπο έχει άπειρη διάσταση. Σύμφωνα με την Αρχή του Huygens κάθε σημείο του κυματομετώπου μπορεί να θεωρηθεί ως πηγή σφαιρικών δευτερευόντων κυμάτων. Όλες οι δευτερογενείς πηγές είναι συμφασικές, εφόσον όλες βρίσκονται επί του ιδίου κυματομετώπου. Έστω τώρα κάποιο σημείο Ρ που βρίσκεται μετά την οπή. Το σημείο αυτό απέχει διαφορετικές αποστάσεις από τις πηγές που βρίσκονται στην περιοχή της οπής (τα κύματα των υπολοίπων πηγών, στην αδιαφανή περιοχή του πετάσματος, αποκόπτο-



νται από αυτό). Συνεπώς, τα κύματα των δευτερογενών πηγών φτάνουν στο P με διαφορετικές φάσεις και πλάτη. Η υπέρθεσή τους θα είναι άλλοτε τελείως ενισχυτική, άλλοτε τελείως καταστροφική και άλλοτε ενδιάμεση. Παρόλο που στο Σχ. 14 έχουμε δείξει ένα πεπερασμένο αριθμό δευτερογενών πηγών, ο αριθμός τους είναι προφανώς άπειρος. Έτσι, αν και από φυσική άποψη το φαινόμενο της περίθλασης είναι απλώς μια ειδική περίπτωση του φαινομένου της συμβολής, η «άθροιση» των άπειρων επιμέρους διαταραχών στο P δεν



Είναι τετριμμένη υπόθεση. Αποδεικνύεται δε ότι, όταν η οπή είναι μεγάλη εάν συγκριθεί με το μήκος κύματος, το αποτέλεσμα της συμβολής είναι απλώς η διάδοση του (επίπεδου) κύματος ως η οπή να μην υπήρχε (ή, ακριβέστερα, η διαφοροποίηση από τη διάδοση επιπέδων κυμάτων είναι μικρή – Σχ. 16(α)). Όσο μικραίνει περισσότερο η οπή (σε σχέση πάντα με το μήκος κύματος και την απόσταση του σημείου P από την οπή) τόσο μεγαλύτερες είναι και οι παρατηρούμενες αποκλίσεις από τη διάδοση ενός ανεμπόδιστου επίπεδου κύματος – Σχ. 16(β). Αργότερα θα ασχοληθούμε λεπτομερέστερα με την περίθλαση.

#### ΚΟ. Ερωτήσεις/Προβλήματα

**1.** Εάν οι αρχικές συνθήκες μιας αρμονικής ταλάντωσης της μορφής  $y(t)=y_{max}cos(\omega t + \varphi)$  είναι: (α)  $y(0)=-y_{max}$ (β)  $y(0)=y_{max}/2$  και v(0)<0βρείτε τη σταθερά φάσης  $\varphi$  στις δύο περιπτώσεις.

**2.** Δύο ταλαντώσεις γράφονται:  $y_1(t)=y_{max1}\cos(\omega t - \pi/4)$  και  $y_2(t)=y_{max2}\cos(\omega t + \pi/4)$ . Ποια είναι η διαφορά φάσης τους;

**3.** Εάν η ταχύτητα ενός κύματος σε κάποιο μέσο είναι v=300 m/s και η συχνότητα της πηγής που παράγει το κύμα είναι v=10 kHz, ποιο το μήκος κύματος  $\lambda$ ;

**4.** Όργανο μέτρησης ισχύος επιφάνειας  $S=1 \text{ m}^2$  βρίσκεται σε απόσταση R=1 m από φωτεινή πηγή σφαιρικών κυμάτων ισχύος  $P_0 = 1$  Watt. Ποια η τιμή της ισχύος P που ανιχνεύεται από το όργανο;

**5.** Η ταχύτητα κυμάτων που διαδίδονται σε χορδή μήκους L=1 m είναι 200 m/s. Τα άκρα της χορδής είναι ακλόνητα. Βρείτε τα τρία πρώτα μήκη κύματος  $\lambda_{1,2,3}$  καθώς και τις συχνότητες  $v_{1,2,3}$  των στασίμων κυμάτων που μπορούν να δημιουργηθούν στη χορδή.

6. Ποια η συχνότητα ν φωτεινής ακτινοβολίας κόκκινου χρώματος μήκους κύματος στο κενό  $\lambda_0$ =600 nm; Ποια η αντίστοιχη συχνότητα για τις ακτίνες X μήκους κύματος  $\lambda_0$ = 1 nm; Βρείτε και τις αντίστοιχες περιόδους ταλάντωσης. Δίδεται ότι  $c_0$ =3×10<sup>8</sup> m/s.

7. (α) Σχεδιάστε ποιοτικά το πρότυπο συμβολής που εμφανίζεται στην οθόνη παρατήρησης ενός συμβολομέτρου Young.

(β) Χρησιμοποιώντας την προσέγγιση L >> d (L η απόσταση φωτεινών πηγών-οθόνης και d η απόσταση μεταξύ των πηγών), βρείτε τις θέσεις των φωτεινών  $x_{n\varphi}$  και σκοτεινών  $x_{n\sigma}$  αντίστοιχα κροσσών συμβολής για κάθε τάξη n.

Εφαρμογή:  $\lambda$ =500 nm, *L*=1 m, *d*=0.25 mm, *n*=0,±1,±2.

8. Τι εννοούμε όταν λέμε ότι δύο πηγές είναι (ι) συμφασικές; (ιι) εντελώς εκτός φάσης; (ιι) σύμφωνες; Τι περιμένουμε να δούμε στην οθόνη παρατήρησης ενός συμβολομέτρου Young εάν οι δύο πηγές (α) είναι σύμφωνες και (β) δεν είναι σύμφωνες;

9. Αντιστοιχίστε τις παρακάτω δύο στήλες:

Ραδιοκύματα	$10^{13}$ Hz
Μικροκύματα	$10^{17} \mathrm{Hz}$
Ακτίνες Χ	$10^8$ Hz
Υπέρυθρο	$10^{10}\mathrm{Hz}$
Υπεριώδες	$10^{15}$ Hz
Ακτίνες γ	$10^{19}\mathrm{Hz}$

10. Η διάταξη του διπλανού σχήματος αποτελείται από δύο σωλήνες Α και Β. Ο σωλήνας Β μπορεί να μετακινείται. Με αυτό τον τρόπο μεταβάλλεται το μήκος x. Μια ηχητική πηγή Π δημιουργεί στο ανοιχτό άκρο του σωλήνα ήχο συχνότητας 1.25 kHz. Στο άλλο άκρο (Σ) του σωλήνα φτάνουν ταυτόχρονα δύο ηχητικά κύματα. Τα κύματα δημιουργούνται από την πηγή και διαδίδονται μέσω του αέρα στους σωλήνες Α και Β. Όταν



μετακινούμε το σωλήνα B (μεταβάλλεται τότε η απόσταση x) παρατηρούμε ότι η ένταση του ήχου στο σημείο  $\Sigma$  αυξομειώνεται. Η ένταση του ήχου στο σημείο  $\Sigma$  είναι μηδέν όταν η απόσταση x είναι  $x_0 = 0.408$ 

m. Ποια είναι η επόμενη τιμή της απόστασης x (x>0.408 m) για την οποία μηδενίζεται ξανά η ένταση του ήχου; Δίνεται η ταχύτητα του ήχου στον αέρα v=340 m/s.<sup>1</sup>

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Παντού, το δεκαδικό μέρος ενός αριθμού διαχωρίζεται από το ακέραιο μέρος του με μία τελεία. Π.χ. 10.000=10

### Κ1. Γεωμετρική Οπτική

### 1. Συνθήκη Ισχύος της Γεωμετρικής Οπτικής, Οπτικός Δρόμος, Αρχές Fermat και Αντιστρεπτότητας

Στη Γεωμετρική Οπτική δεχόμαστε ότι το φως αποτελείται από ακτίνες (Σχ. 1(α)) που εκκινώντας από κάποια φωτεινή πηγή διαδίδονται προς διάφορες κατευθύνσεις και κάμπτονται απότομα λόγω της διάθλασης ή ανάκλασής τους σε διάφορα οπτικά στοιχεία. Θεωρούμε ότι σε ομογενή μέσα οι φωτεινές ακτίνες διαδίδονται ευθύγραμμα και αγνοούμε το κυματικό χαρακτήρα του φωτός, εφαρμόζοντας τους νόμους της ανάκλασης και της διάθλασης χωρίς περιορισμούς. Σε όλα τα οπτικά συστήματα, το φως διαδίδεται πάντα μέσα από κάποιο αριθμό οπών, διαφραγμάτων ή σχισμών από τις οποίες διέρχεται ένα μέρος του προσπίπτοντος



κυματομετώπου. Η Γεωμετρική Οπτική μπορεί να θεωρηθεί ως το όριο της Κυματικής Οπτικής στο οποίο η περίθλαση (που θα μελετήσουμε αργότερα) στα στοιχεία αυτά είναι αμελητέα. Στο παράδειγμα του Σχ. 1(β), επίπεδο κύμα προσπίπτει σε οπή διαμέτρου D και διαδίδεται μέχρι την οθόνη που απέχει από αυτή απόσταση L. Εάν τα φαινόμενα περίθλασης είναι αμελητέα τότε το διερχόμενο κύμα θα συνεχίσει να είναι επίπεδο και οι διαστάσεις της διαδιδόμενης δέσμης θα είναι ίσες με αυτές της οπής. Διαφορετικά θα παρατηρήσουμε αποκλίσεις από την ευθύγραμμη διάδοση. Αποδεικνύεται ότι για να ισχύει η Γεωμετρική Οπτική πρέπει οι διαστάσεις του ανοίγματος να είναι πολύ μεγαλύτερες του μήκους κύματος λ της ακτινοβολίας. Ακριβέστερα, θα πρέπει να ικανοποιείται η σχέση,

$$D \gg \sqrt{L\lambda}$$
 (1)

Συνήθως η απόσταση L δε λαμβάνεται υπ' όψη αλλά αυτό δεν είναι σωστό. Θεωρήστε π.χ. πράσινο φως μήκους κύματος  $\lambda = 500$  nm =  $5 \times 10^{-7}$  m και μία οπή διαμέτρου D = 1 mm =  $10^{-3}$  m. Η σχέση (1) προβλέπει τότε ότι εάν L << 2 m θα έχουμε αμελητέα φαινόμενα περίθλασης. Μπορούμε εύκολα να διαπιστώσουμε πειραματικά ότι τα τελευταία μπορούν να παρατηρηθούν ακόμα και για αποστάσεις L = 1 m. Σε ότι ακολουθεί αποδεχόμαστε τη ισχύ της (1).

Όταν το φως διέρχεται από ανοίγματα δημιουργεί φωτεινές δέσμες με σχήμα συνήθως κυλινδρικό ή κωνικό. Οι φωτεινές ακτίνες μπορούν να θεωρηθούν ως οι άξονες της δέσμης. Δε μπορεί να υπάρξει μία και μόνο ακτίνα που είναι γεωμετρικό κατασκεύασμα. Μπορούμε παρ' όλα αυτά να θεωρήσουμε ότι οι ακτίνες αναπαριστούν τη διαδρομή ροής φωτεινής ενέργειας (η οποία διατηρείται παρά τις όποιες μεταβολές ή παραμορφώσεις της δέσμης εάν η τελευταία δεν αποκόπτεται σε κάποιο σημείο του οπτικού συστήματος) και ότι σε ισότροπα υλικά είναι κάθετες σε κάθε σημείο του κυματομετώπου της δέσμης.



Αν και οι νόμοι της ανάκλασης και της διάθλασης μπορούν να εξαχθούν χωρίς παραδοχές μέσω της κυματικής ή της σωματιδιακής θεωρίας του φωτός, στη Γεωμετρική Οπτική εξάγονται μετά από την αποδοχή "Αρχών" όπως η αρχή του Fermat και η αρχή της Αντιστρεπτότητας. Ποιο συγκεκριμένα η **Αρχή του Fermat** δηλώνει ότι:

Το φως διαδίδεται ανάμεσα σε δύο σημεία ακολουθώντας τον ελάχιστο οπτικό δρόμο (που συνεπάγεται και την ελάχιστη χρονική διάρκεια διάδοσης).

Ο οπτικός δρόμος μεταξύ δύο σημείων Α και Β ορίζεται ως (Σχ. 2)

$$\ell_{opt} = \sum_{i} n_i l_i = \int_{A}^{B} n(l) dl$$
<sup>(2)</sup>

και ο χρόνος διάδοσης υπολογίζεται από τη σχέση  $t_{A\to B} = \ell_{opt}/c_o$ , όπου  $c_o$  η ταχύτητα του φωτός στο κενό. Στις σχέσεις αυτές  $n_i$  (n(l)) είναι οι δείκτες διάθλασης των υλικών από τα οποία διέρχεται το φως που, όπως είπαμε, ορίζονται μέσω της σχέσης

$$n \equiv \frac{c_{\rm o}}{c} = \frac{\lambda_{\rm o}}{\lambda} \tag{3}$$

όπου λ<sub>0</sub> το μήκος κύματος του φωτός στο κενό, και *c* και λ η ταχύτητα και το μήκος κύματός του στο διαφανές υλικό. Μεταξύ δύο υλικών, αυτό με το μεγαλύτερο δείκτη διάθλασης ονομάζεται οπτικά πυκνότερο. Ο δείκτης διάθλασης του κενού είναι προφανώς ίσος με 1. Ο δείκτης διάθλασης του αέρα είναι ≈1.0003. Όμως εδώ θα θεωρήσουμε από εδώ και στο εξής ότι *n*<sub>αέρα</sub>≈1. Πρέπει να τονιστεί για ακόμη μία φορά ότι, ακόμη και για το ίδιο διαφανές υλικό, ο δείκτης διάθλασης έχει έντονη εξάρτηση από το μήκος κύματος του φωτός. Όσον αφορά τα μεγέθη  $l_i$  (dl), αυτά είναι τα γεωμετρικά μήκη της διαδρομής του φωτός. Η αρχή του Fermat οδηγεί στον υπολογισμό της διαδρομής του φωτός μέσω της σχέσης  $d\ell_{opt}/dl=0$ .

Τέλος, η Αρχή της Αντιστρεπτότητας δηλώνει ότι:

Το φως διαδίδεται ανάμεσα σε δύο σημεία μέσω του ιδίου οπτικού δρόμου ανεξαρτήτως της φοράς διάδοσης. Δηλαδή t<sub>A→B</sub> = t<sub>B→A</sub>.

#### 2. Ο Νόμος της Ανάκλασης

Υποθέστε ότι φωτεινή ακτίνα (ή φωτεινή δέσμη) διαδίδεται σε κάποιο διαφανές μέσο (π.χ. αέρας) και προσπίπτει σε επίπεδη και γυαλιστερή επιφάνεια. Η επιφάνεια αυτή μπορεί να είναι είτε μεταλλική, είτε αδιαφανής διηλεκτρική είτε απλώς η μεσεπιφάνεια μεταξύ δύο διαφανών υλικών. Κατά την ανάκλαση το φως αλλάζει διεύθυνση διάδοσης αλλά παραμένει εντός του ιδίου μέσου. Ο νόμος της ανάκλασης μπορεί να διατυπωθεί ως εξής:

Κατά την ανάκλαση, (α) η προσπίπτουσα ακτίνα, η ανακλώμενη ακτίνα και η κάθετη στην ανακλαστική επιφάνεια στο σημείο πρόσπτωσης βρίσκονται επί του αυτού επιπέδου το οποίο ονομάζουμε επίπεδο πρόσπτωσης και (β) η γωνία πρόσπτωσης ισούται με τη γωνία ανάκλασης,



Ως γωνίες πρόσπτωσης και ανάκλασης, θ<sub>π</sub> και θ<sub>α</sub>, ορίζουμε αυτές που σχηματίζονται μεταξύ της κάθετης στην επιφάνεια στο σημείο πρόσπτωσης και της προσπίπτουσας και ανακλώμενης ακτίνας αντίστοιχα (Σχ. 3). Η διάχυτη ανάκλαση (ή απλά **διάχυση**) του φωτός από τραχιές επιφάνειες εξηγείται μέσω της εφαρμογής του νόμου της ανάκλασης σε κάθε στοιχειώδη επιφάνεια που μπορεί να θεωρηθεί επίπεδη. Το ίδιο ισχύει και για λείες αλλά όχι επίπεδες επιφάνειες θεωρώντας την κάθετο στην επιφάνεια σε κάθε σημείο πρόσπτωσης.

#### 3. Ο Νόμος της Διάθλασης & η Ολική Εσωτερική Ανάκλαση

Υποθέστε τώρα ότι φωτεινή ακτίνα προσπίπτει στην επίπεδη και λεία μεσεπιφάνεια μεταξύ δύο διαφανών υλικών. Στη περίπτωση αυτή, εκτός από ανάκλαση (της οποίας το ποσοστό εξαρτάται από τη γωνία πρόσπτωσης), παρατηρείται και διάθλαση δηλαδή αλλαγή τόσο της διεύθυνσης διάδοσης του φωτός όσο και του μέσου διάδοσης. Ο νόμος της διάθλασης μπορεί να διατυπωθεί ως εξής:

Κατά τη διάθλαση, (α) η προσπίπτουσα ακτίνα, η διαθλώμενη ακτίνα και η κάθετη στη διαθλαστική επιφάνεια στο σημείο πρόσπτωσης βρίσκονται επί του αυτού επιπέδου (επίπεδο πρόσπτωσης) και (β) η γωνία πρόσπτωσης συνδέεται με τη γωνία διάθλασης μέσω της σχέσης,

$$n_{\pi} \sin \theta_{\pi} = n_{\delta} \sin \theta_{\delta}. \tag{5}$$

Στη σχέση (5) (που είναι γνωστή ως **νόμος του Snell**) η γωνία διάθλασης  $\theta_{\delta}$  ορίζεται ανάλογα με αυτές της πρόσπτωσης και ανάκλασης, δηλαδή είναι η γωνία μεταξύ της κάθετης στην επιφάνεια και της διαθλώμενης ακτίνας (Σχ. 4).

Εάν  $n_{\pi} < n_{\delta}$ , (πέρασμα από οπτικά αραιότερο σε οπτικά πυκνότερο μέσο) τότε  $\theta_{\pi} > \theta_{\delta}$  και η διαθλώμενη ακτίνα πλησιάζει την κάθετη στη μεσεπιφάνεια. Αντίθετα, εάν  $n_{\pi} > n_{\delta}$ , (πέρασμα από οπτικά πυκνότερο σε οπτικά αραιότερο μέσο) τότε  $\theta_{\pi} < \theta_{\delta}$  και η διαθλώμενη ακτίνα απομακρύνεται από την κάθετη στη μεσεπιφάνεια. Στην τελευταία αυτή περίπτωση μπορούμε να έχουμε  $\theta_{\delta} = 90^{\circ}$  (Σχ. 5β) για γωνία πρόσπτωσης ίση με τη λεγόμενη κρίσιμη που δίδεται από τη σχέση





Για γωνίες πρόσπτωσης μεγαλύτερες από τη κρίσιμη ο νόμος της διάθλασης δεν έχει νόημα και όλη η προσπίπτουσα ακτινοβολία ανακλάται (Σχ. 5γ). Έχουμε τότε το φαινόμενο της ολικής εσωτερικής ανάκλασης στο οποίο βασίζεται και η λειτουργία των οπτικών ινών, διαχωριστών δέσμης και άλλων οπτικών συστημάτων.



Ως παράδειγμα αναφέρουμε τη κατασκευή διαφόρων τύπων πρισμάτων (Σχ. 6). Παρ' όλο που ο δείκτης διάθλασης εξαρτάται από το μήκος κύματος η γωνία πρόσπτωσης από το γυαλί στον αέρα για όλους τους τύπους πρισμάτων (~45°) είναι μεγαλύτερη της κρίσιμης (~42°) για όλα τα χρώματα που ενδιαφέρουν ανά-



λογα με την εφαρμογή. Έτσι τα πρίσματα λειτουργούν ως αχρωματικοί ανακλαστήρες. Οι διαφορές τους εστιάζονται στη γωνία εκτροπής της προσπίπτουσας δέσμης και (α) Pστη περιστροφή, ανόρθωση ή αντιστροφή των ειδώλων των αντικειμένων.

# Είδωλα & Παραξονική Προσέγγιση

Οπτικές συσκευές, όπως φωτογραφικές μηχανές, κιάλια, διαφανοσκόπια, τα μάτια κλπ, χρησιμοποιούνται καθημερινά για την απεικόνιση αντικειμένων. Τα κυριότερα οπτικά στοιχεία από τα οποία αποτελούνται είναι τα κάτοπτρα (καθρέφτες) και οι φακοί. Η δράση τους στηρίζεται στους νόμους της ανάκλασης και της διάθλασης καθώς και της πιθανής καμπυλότητας που παρουσιάζουν οι επιφάνειές τους. Μέσω των στοιχείων αυτών δημιουργούνται είδωλα των αντικειμένων. Διακρίνουμε τα είδωλα σε πραγματικά και φανταστικά. Ένα παράδειγμα φανταστικού ειδώλου φαίνεται στο Σχ. 7(α) όπου από το φωτεινό



σημείο *P* (αυτόφωτο ή ετερόφωτο) εκπέμπεται αποκλίνουσα δέσμη φωτεινών ακτίνων η οποία ανακλάται από την επιφάνεια του επίπεδου κατόπτρου σύμφωνα με το νόμο της ανάκλασης και εισέρχεται στο μάτι του παρατηρητή. Σ' αυτόν δημιουργείται η εντύπωση ότι οι ακτίνες ξεκινούν όχι από το σημείο *P* αλλά από το σημείο *Q* το οποίο είναι το φανταστικό είδωλο του *P*. Δηλαδή το *Q* «δημιουργείται» από προεκτάσεις ακτίνων και όχι από τις ίδιες τις ακτίνες. Παρ' όλα αυτά, όπως γνωρίζουμε από τη καθημερινή μας εμπειρία, τα φανταστικά είδωλα μπορούμε να τα δούμε (όπως τον εαυτό μας στον καθρέφτη). Τα φανταστικά είδωλα δεν μπορούν όμως να σχηματιστούν σε οθόνη ούτε να καταγραφούν σε φιλμ ή ψηφιακά. Μπορούμε να πούμε ότι η «ύπαρξη» φανταστικών ειδώλων εξαρτάται από την ύπαρξη παρατηρητή ή όχι. Αντίθετα, τα πραγματικά είδωλα υφίστανται ανεξάρτητα από την ύπαρξη παρατηρητή, δημιουργούνται από τις ίδιες τις ακτίνες και όχι τις προεκτάσεις τους και μπορούν να καταγραφούν. Παραδείγματα πραγματικών ειδώλων βλέπουμε στα Σχ. 7(β) και (γ). Στο Σχ. 7(β) όλες οι ακτίνες που ξεκινούν από το φωτεινό σημείο *P* περνούν από το σημείο *Q*, αφού ανακλαστούν από ένα λείο και κοίλο σφαιρικό κάτοπτρο. Το ίδιο συμβαίνει και στο Σχ. 7(γ) όπου το πραγματικό είδωλο δημιουργείται από της διάθλασης. Εάν αυτή τη διαθλαστική επιφάνεια την «κόψουμε» και από την άλλη μεριά (δεξιά της στο σχήμα) κατασκευάζουμε ένα φακό, όπως αυτός του Σχ. 8.

Όταν ένα σημείο *P* απεικονίζεται ως σημείο *Q* (πραγματικό ή φανταστικό), λέμε ότι έχουμε στιγματική απεικόνιση. Στην πραγματικότητα οι σφαιρικές επιφάνειες των σχημάτων 7(β) και (γ) δεν προσφέρουν στιγματική απεικόνιση, παρά μόνο όταν ισχύει η λεγόμενη **παραξονική προσέγγιση** ότι δηλαδή:

# Οι φωτεινές ακτίνες βρίσκονται κοντά στον άζονα του συστήματος και σχηματίζουν μικρές γωνίες ( $\leq 5^{\circ}$ ) με αυτόν.

Μαθηματικά, οι γωνίες που σχηματίζουν οι παραξονικές ακτίνες με τον οπτικό άξονα είναι τόσο μικρές ώ-

στε να ισχύει sinθ~tanθ~θ(rad). Τότε, όσον αφορά τη διάθλαση, ο νόμος του Snell (σχέση (5)) προσεγγίζεται ως  $n_{\pi}\theta_{\pi}\approx n_{\delta}\theta_{\delta}$ . Παράδειγμα, των σφαλμάτων που εμφανίζουν τα σφαιρικά οπτικά στοιχεία φαίνεται στο Σχ. 8. Παρατηρούμε ότι οι ακτίνες που είναι πολύ απομακρυσμένες από τον άξονα του φακού, ακόμα και όταν η δέσμη είναι ευθυγραμμισμένη, διαθλώνται κατά μεγάλες γωνίες και δεν εστιάζονται στο ίδιο σημείο με τις υπόλοιπες. Κατά την απεικονιστική λειτουργία λοιπόν, και εάν δεν ισχύει η παραξονική προσέγγιση, είναι πιθανόν οι ακτίνες που ξεκινούν από ένα σημείο *P* να μην περνούν όλες από το σημείο *Q* και το *P* να απεικονιστεί, π.χ., σε μία μικρή ευθεία γραμμή. Λόγω του ότι το σφάλμα αυτό οφείλεται στο σφαιρικό σχήμα των δύο επιφανειών του φακού ονομάζεται σφάλμα σφαιρικότητας ή *σφαιρική εκτροπή*. Για να αποφύγουμε



τη σφαιρική εκτροπή μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε ασφαιρικές λείες επιφάνειες (ελλειπτικές, παραβολικές κλπ). Οι τελευταίες έχουν πολύ καλύτερες ιδιότητες απεικόνισης αλλά παρουσιάζουν κατασκευαστικές δυσκολίες και είναι επακόλουθα πολύ ακριβότερες. Σε ότι ακολουθεί θα αναφερθούμε μόνο σε σφαιρικούς φακούς.

#### 5. Είδη Φακών & Τύπος Κατασκευαστών Λεπτών Φακών

Οι δύο μεγάλες κατηγορίες φακών είναι οι συγκλίνοντες (συγκεντρωτικοί) και οι αποκλίνοντες (απο-

κεντρωτικοί). Οι πρώτοι εστιάζουν προσπίπτουσα παράλληλη φωτεινή δέσμη (σχήμα 9(α)) ενώ οι αποκλίνοντες την απεστιάζουν (Σχ. 9(β)). Ο υπολογισμός των χαρακτηριστικών τους απλοποιείται κατά πολύ εάν θεωρήσουμε ότι είναι λεπτοί, δηλαδή ότι το πάχος τους είναι πολύ μικρότερο της εστιακής τους απόστασης. Η τελευταία συμβολίζεται με f και ορίζεται ως η απόσταση μεταξύ του φακού (ακριβέστερα του οπτικού του κέντρου Ο) και του σημείου εστίας - όπου συγκλίνουν όλες οι φωτεινές ακτίνες μιας παράλληλης φωτεινής δέσμης (ή οι προεκτάσεις τους). Λόγω της Αρχής της Αντιστρεπτότητας κάθε φακός έχει δύο εστίες εκατέρωθεν αυτού. Σε λεπτό φακό και οι δύο απέχουν ίση απόσταση από αυτόν, δηλαδή οι δεξιά



και η αριστερή εστιακή απόσταση είναι ίσες. Συμβολίζοντας με n<sub>y</sub> το δείκτη διάθλασης του γυαλιού από το οποίο είναι κατασκευασμένος και υποθέτοντας ότι περιβάλλεται εξ ολοκλήρου από το ίδιο διαφανές μέσο με δείκτη διάθλασης n<sub>πep</sub>, η εστιακή απόσταση λεπτού φακού δίνεται από τον λεγόμενο τύπο των κατασκευαστών των λεπτών φακών που γράφεται

$$\frac{1}{f} = \left[\frac{n_{\gamma}}{n_{\pi\varepsilon\rho}} - 1\right] \cdot \left[\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2}\right].$$
(7)

Στην (7)  $R_1$  και  $R_2$  είναι οι ακτίνες καμπυλότητας των επιφανειών που συναντούν οι φωτεινές ακτίνες (πρώτη και δεύτερη αντίστοιχα). Τόσο αυτές όσο και η εστιακή απόσταση μπορούν να πάρουν θετικές ή αρνητικές



τιμές. Οι συμβάσεις προσήμων φαίνονται στο Σχ. 10. Έτσι λοιπόν, εάν το κέντρο καμπυλότητας C μιας επιφάνειας βρίσκεται από τη μεριά πρόσπτωσης των φωτεινών ακτίνων τότε η ακτίνα αυτή είναι αρνητική. Διαφορετικά είναι θετική. Εάν η επιφάνεια είναι επίπεδη η ακτίνα καμπυλότητάς της είναι άπειρη. Όσο για την εστιακή απόσταση όπως αυτή προκύπτει από την (7), εάν αυτή είναι θετική τότε μιλάμε για συγκλίνοντα ή θετικό φακό. Στην αντίθετη περίπτωση ο φακός είναι αποκλίνων ή αρνητικός. Προσέξτε ότι το πρόσημο της f και η δράση του φακού δεν εξαρτώνται μόνον από τα πρόσημα των ακτίνων καμπυλότητας αλλά και από το σχετικό δείκτη διάθλασης  $n_{σ\chi}=n_{\gamma}/n_{περ}$ . Στη συνηθέστερη περίπτωση όπου  $n_{σ\chi}>1$ , οι συγκλίνοντες φακοί είναι λεπτότεροι στα άκρα και παχύτεροι στο κέντρο τους, ενώ οι αποκλίνοντες παχύτεροι στα άκρα και λεπτότεροι στο κέντρο. Σημειώστε ακόμη ότι, εφόσον ο δείκτης διάθλασης εξαρτάται από το μήκος κύματος, η εστιακή απόσταση είναι διαφορετική για κάθε χρώμα (συχνότητα ή μήκος κύματος). Αυτό το σφάλμα των φακών ονομάζεται χρωματική εκτροπή. Σημειώστε ότι τα κάτοπτρα έχουν το πλεονέκτημα ότι δεν εμφανίζουν χρωματική εκτροπή, μια και η απεικονιστική τους λειτουργία βασίζεται στο νόμο της ανάκλασης όπου δεν υπάρχει εξάρτηση από το μήκος κύματος.

#### 6. Θεμελιώδης Εξίσωση Λεπτών Φακών, Μεγεθύνσεις & Γραφικός Προσδιορισμός Ειδώλων

Θεωρούμε παρακάτω την περίπτωση n<sub>ox</sub>>1. Στα παραδείγματα του Σχ. 11 αντικείμενο απέχει από το συγκλίνοντα φακό απόσταση *a*. Η απόσταση του ειδώλου, *b*, από αυτόν δίνεται από τη θεμελιώδη εξίσωση των λεπτών φακών

$$\frac{1}{a} + \frac{1}{b} = \frac{1}{f}.$$
(8)

Εάν συμβολίσουμε το μέγεθος του αντικειμένου με A και του ειδώλου με B, η εγκάρσια μεγέθυνση M<sub>T</sub> δίνεται από τη σχέση,

$$M_T = \frac{B}{A} = -\frac{b}{a}.$$
 (9)

Τα μεγέθη  $a, b, A, B, M_T$  μπορούν να είναι είτε θετικά είτε αρνητικά (όπως και η f). Οι συμβάσεις προσήμων φαίνονται στο Πίνακα 1. Είναι (I) A > 0 (I) O (II) B < 0 B < 0 (III) B < 0 (III) (III)



χρήσιμο στο σημείο αυτό να ορίσουμε και δύο ακόμη μεγεθύνσεις: Τη διαμήκη

$$m_L \equiv \frac{\Delta x_{im}}{\Delta x_{ob}} = -\left(\frac{b}{a}\right)^2 = -m_T^2 \tag{11}$$

(Σχ. 12) και τη γωνιακή μεγέθυνση

$$m_A \equiv \frac{\theta_{im}}{\theta_{ob}} = \frac{1}{m_T} \tag{12}$$

Το αρνητικό πρόσημο στην (11) μπορεί να κατανοηθεί μέσω του Σχ. 12 όπου τα  $\Delta x_{ob}$  και  $\Delta x_{im}$  έχουν τη ίδια κατεύθυνση ενώ θεωρούμε ότι οι αποστάσεις *a* και *b* αυξάνουν όσο απομακρυνόμαστε από το φακό.



Πίνακας 1. Συμβάσεις προσήμων για λεπτούς σφαιρικούς φακούς.				
Μέγεθος	Πρόσημο			
	+	-		
а	Από τη μεριά πρόσπτωσης των ακτίνων (πραγματικό	Μετά το φακό ως προς τη μεριά πρόσπτωσης των		
	αντικείμενο)	ακτίνων (φανταστικό αντικείμενο)		
b	Μετά το φακό ως προς τη μεριά πρόσπτωσης των	Από τη μεριά πρόσπτωσης των ακτίνων		
	ακτίνων ( πραγματικό είδωλο)	(φανταστικό είδωλο)		
A	Πάνω από τον άξονα, ορθό	Κάτω από τον άξονα, αντεστραμμένο		
В	Πάνω από τον άξονα, ορθό	Κάτω από τον άξονα, αντεστραμμένο		
$M_T$	Μη-αντιστροφή ειδώλου ως προς αντικείμενο	Αντιστροφή ειδώλου ως προς αντικείμενο		

Για το γραφικό προσδιορισμό του ειδώλου ενός σημείου του αντικειμένου αρκεί να βρούμε το σημείο τομής δύο φωτεινών ακτίνων (ή των προεκτάσεών τους) που ξεκινούν από αυτό. Χρησιμοποιούμε συνήθως το πλέον απομακρυσμένο από τον οπτικό άξονα σημείο και τουλάχιστον δύο από τις τρεις **κύριες ακτίνες** (Ι), (ΙΙ) και (ΙΙΙ) του Σχ. 11. Σύμφωνα με αυτές:

(I) Προσπίπτουσα φωτεινή ακτίνα παράλληλη στον οπτικό άξονα περνά, η ίδια ή η προέκτασή της, μετά το φακό από τη μία εστία του.

(II) Η διεύθυνση προσπίπτουσας φωτεινής ακτίνας που περνά από το οπτικό κέντρο λεπτού φακού δεν υφίσταται καμία μεταβολή.

(III) Προσπίπτουσα φωτεινή ακτίνα που διέρχεται, η ίδια (f>0) ή η προέκτασή της (f<0), από την άλλη εστία του φακού παραλληλίζεται μετά από αυτόν.

#### 7. Συστήματα Φακών

Πολλές φορές η χρήση ενός και μόνο φακού δεν αρκεί για να φέρει το επιθυμητό αποτέλεσμα. Γι' αυτό και καταφεύγουμε σε συστήματα φακών. Εδώ θα περιοριστούμε στους δύο φακούς. Στο παράδειγμα του Σχ. 13 έχουμε επιλέξει να είναι και οι δύο συγκλίνοντες. Γενικά, για να βρούμε το τελικό είδωλο ενός αντικειμένου Α εργαζόμαστε ως εξής: Πρώτα βρίσκουμε το είδωλο B<sub>1</sub> του αντικειμένου ως προς τον πρώτο φακό χωρίς την παρουσία του άλλου (Σχ. 13(α)). Θεωρούμε στη συνέχεια το είδωλο αυτό ως αντικείμενο για το δεύτερο φακό και βρίσκουμε το τελικό είδωλο Β2 χρησιμοποιώντας ξανά τους τρεις κανόνες για τις κύριες ακτίνες που αναφέρθηκαν παραπάνω. Στο Σχ. 13(β) η απόσταση d μεταξύ των φακών είναι μεγαλύτερη από την απόσταση πρώτου φακού-πρώτου ειδώλου b1. Έτσι, η απόσταση πρώτου ειδώλου-δεύτερου φακού (για τον οποίο είναι το αντικείμενο)  $a_2 = d$   $b_1 > 0$  και το ενδιάμεσο αντικείμενο (B<sub>1</sub>) είναι πραγματικό. Αντίθετα, στο Σχ. 11(γ) η απόσταση dέχει επιλεγεί έτσι ώστε  $a_2 = d - b_1 <$ 0 οπότε το ενδιάμεσο αντικείμενο είναι φανταστικό (δημιουργείται από προεκτάσεις ακτίνων).



#### 8. Φακοί Μη-Αμελητέου Πάχους

Εάν το πάχος του φακού είναι συγκρίσιμο με την εστιακή του απόσταση (τυπική περίπτωση οι αντικειμενικοί των μικροσκοπίων) οι παραπάνω σχέσεις είναι μόνο προσεγγιστικές, καθώς πρέπει να ληφθεί υπ' όψη και η διαδρομή του φωτός μέσα στο φακό. Η κύρια διαφορά από τους λεπτούς φακούς είναι ότι οι εστιακές αποστάσεις εκατέρωθεν του φακού είναι διαφορετικές.

#### 9. Διαφράγματα

Διαφράγματα κάποιου είδους υπάρχουν σε όλα τα οπτικά συστήματα. Μπορεί να έχουν τοποθετηθεί εσκεμμένα π.χ. για την εξάλειψη ή μείωση του σφάλματος σφαιρικότητας (Σχ. 8) ή χωρίς πρόθεση ή ακόμα να είναι απλώς και μόνο τα φυσικά όρια των φακών, κατόπτρων ή άλλων στοιχείων του συστήματος. Γενικά, τα διαφράγματα επηρεάζουν σε σημαντικό βαθμό τη λειτουργία των οπτικών συστημάτων και για το λόγο αυτό είναι αναγκαίο να τα εξετάσουμε με κάποια λεπτομέρεια.

Για να καταλάβουμε τη σημασία των διαφραγμά-



των ας θεωρήσουμε πρώτα ένα απλό διαφανοσκόπιο. Θα περίμενε ίσως κάποιος ότι η κατασκευή του είναι πολύ εύκολη (Σχ. 14(α)). Χρειάζεται μόνο μία φωτεινή πηγή – 1 που θα φωτίζει τη διαφάνεια – 3 και ένα φακό καλής ποιότητας – 4 που βρίσκεται σε κάποια απόσταση από αυτή και δημιουργεί σε απομακρυσμένη οθόνη – 5 το πραγματικό και μεγαλύτερό της είδωλο. Από το Σχ. 14(α) μπορούμε να δούμε ότι, με τη διάταξη που μόλις περιγράψαμε, μόνο οι φωτεινές ακτίνες που ξεκινούν από το κεντρικό τμήμα της διαφάνειας συλλέγονται ικανοποιητικά από το φακό ενώ όσο απομακρυνόμαστε από το κέντρο της συλλέγεται όλο και λιγότερο φως. Έτσι μόνο το κεντρικό μέρος του ειδώλου θα είναι αρκετά φωτεινό ενώ η φωτεινότητά του θα μειώνεται σταδιακά όσο απομακρυνόμαστε από το μέσον του. Στο φαινόμενο αυτό αποδίδεται η ονομασία vignetting. Προφανώς μεγάλο μέρος του φωτός της πηγής γάνεται διότι η διάμετρος του φακού δεν είναι αρκετά μεγάλη για να το συλλέξει. Θα μπορούσαμε να λύσουμε το πρόβλημα χρησιμοποιώντας ένα φακό αρκετά μεγαλύτερης διαμέτρου αλλά αυτό, μεταξύ άλλων προβλημάτων, θα αύξανε υπερβολικά το κόστος και το βάρος του οργάνου. Έτσι καταφεύγουμε σε μία άλλη λύση. Χρησιμοποιούμε έναν ακόμη φακό (ή σύστημα φακών) συλλογής του φωτός τοποθετημένο ακριβώς πριν από τη διαφάνεια (Σχ. 14(β)). Η διάμετρος αυτού του φακού πρέπει να είναι λίγο μεγαλύτερη από τη διαγώνιο της διαφάνειας αλλά επειδή ο ίδιος δεν συμμετέχει στη διαμόρφωση του ειδώλου δεν είναι αναγκαίο να είναι καλής ποιότητας (μπορεί π.χ. να είναι πλαστικός και άρα φτηνός και ελαφρύς). Ο ρόλος του είναι να συγκεντρώσει όλο το φως της πηγής στα όρια του φακού καλής ποιότητας – 4. Με άλλα λόγια να γεμίσει, όπως λέμε, το διάφραγμα του φακού – 4 που στη συγκεκριμένη περίπτωση είναι τα φυσικά όριά του. Τώρα η φωτεινότητα του ειδώλου είναι παντού η ίδια.

#### 9.1 Διαφράγματα Περιορισμού Φωτεινής Ισχύος & Κόρες Εισόδου και Εξόδου

Υπάρχουν δύο είδη διαφραγμάτων, τα διαφράγματα περιορισμού φωτεινής ισχύος (Aperture Stops) και τα διαφράγματα πεδίου (Field Stops). Θα εξετάσουμε κατ' αρχήν τα διαφράγματα περιορισμού φωτεινής ισχύος, δίνοντας πρώτα κάποιους ορισμούς. Το (πραγματικό ή φανταστικό) είδωλο του διαφράγματος που δημιουργείται από όλους τους φακούς ή κάτοπτρα πριν από αυτό (δηλαδή από τα στοιχεία όπου το φως συναντά πριν φτάσει στο διάφραγμα – υποσύστημα ΥΣ1 στο Σχ. 15(α)) ονομάζεται κόρη εισόδου (entrance pupil). Στη περίπτωση που δεν υπάρχουν οπτικά στοιχεία τότε το διάφραγμα συμπεριφέρεται και ως κόρη εισόδου (Σχ. 15(β)). Από την άλλη, το είδωλο του διαφράγματος που δημιουργείται από όλους τους φακούς ή κάτοπτρα μετά από αυτό (δηλαδή από τα στοιχεία που το φως συναντά αφού περάσει από το διάφραγμα – υποσύστημα ΥΣ2 στο Σχ. 15(α)) ονομάζεται κόρη εξόδου (exit pupil). Στη περίπτωση που δεν υπάρχουν οπτικά στοιχεία μετά από το διάφραγμα τότε το ίδιο συμπεριφέρεται και ως κόρη εξόδου (Σχ. 15(γ)). Σε έναν παρατηρητή στη περιοχή σχηματισμού του ειδώλου δημιουργείται η εντύπωση ότι τα όρια της εισερχόμενης στο σύστημα φωτεινής δέσμης καθορίζονται από την κόρη εξόδου. Από την άλλη μεριά, σε έναν παρατηρητή στην περιοχή του αντικειμένου δημιουργείται η εντύπωση ότι είναι η κόρη εισόδου που θέτει τα όρια αυτά. Συνεπώς η φωτεινή ένταση που έχει συλλέξει το οπτικό σύστημα περιέχεται εντός των διαστάσεων της κόρης εισόδου και εξόδου. Όταν η τελευταία είναι το πραγματικό είδωλο του διαφράγματος (Σχ. 15(β)), στη θέση της τοποθετείται συνήθως το ανιχνευτικό σύστημα (φωτογραφική μηχανή ή μάτι). Συνεπώς, για να επιτύχουμε μέγιστη συλλογή φωτεινής ενέργειας από τον ανιχνευτή, θα πρέπει η κόρη εισόδου του να συμπίπτει τόσο σε θέση όσο και σε μέγεθος και σχήμα με την κόρη εξόδου του υπ' όψη οπτικού συστήματος. Έτσι η τοποθέτηση ενός διαφράγματος περιορισμού ισχύος πρέπει να γίνεται με γνώμονα τις θέσεις και τα μεγέθη της κόρης εισόδου και εξόδου που αυτή συνεπάγεται.



Τα διαφράγματα περιορισμού φωτεινής ισχύος καθορίζουν την ποσότητα του φωτός που μπορεί να συλλέξει ένα οπτικό σύστημα (ισχύ συλλογής φωτός). Ας πάρουμε ως παράδειγμα ένας απλό φακό που απεικονίζει ένα αντικείμενο που βρίσκεται στο άπειρο ( $a \rightarrow \infty$ , b=f). Η φωτεινότητα του ειδώλου του αντικειμένου είναι ανάλογη του παράγοντα (D/f)<sup>2</sup> όπου D είναι η διάμετρος της κόρης εισόδου. Η εξάρτηση της φωτεινότητας από τα δύο αυτά μεγέθη εξηγείται από τους εξής συλλογισμούς: (ι) Η διάμετρος D ελέγχει την ποσότητα φωτός (φωτεινή ενέργεια) που εισέρχεται στο σύστημα μέσω της επιφάνειας συλλογής που είναι ανάλογη του  $D^2$  και (ιι) η εστιακή απόσταση f ελέγχει την ένταση της ακτινοβολίας στη θέση του ειδώλου, εφόσον επηρεάζει την επιφάνεια στην οποία θα συγκεντρωθεί η εισερχόμενη φωτεινή ισχύς (ένταση = ενέργεια/[(χρόνος-έκθεσης)×επιφάνεια] = ισχύς/επιφάνεια). Το μέγεθος του ειδώλου ενός μακρινού αντικειμένου είναι ανάλογο της f και συνεπώς η επιφάνειά του είναι ανάλογη του  $f^2$ . Για να ποσοτικοποιηθούν τα παραπάνω ορίζεται ο ονομαζόμενος **αριθμός-f (f-number)**,

$$f - number = f/\# = \frac{f}{D}$$
(13)

(εάν το αντικείμενο δεν είναι στο άπειρο τότε αντί της f πρέπει να χρησιμοποιηθεί η απόσταση b). Σημειώστε ότι η επιθυμητή φωτεινότητα του ειδώλου κατά τη φωτογράφηση καθορίζει και το χρόνο έκθεσης του φιλμ. Συγκεκριμένα, ο χρόνος έκθεσης είναι ανάλογος του (αριθμού-f)<sup>2</sup> ή η ταχύτητα του φακού είναι ανάλογη του (αριθμού-f)<sup>-2</sup> για δεδομένη φωτεινότητα. Συνεπώς, η φωτογράφηση αντικειμένων που κινούνται γρήγορα και απαιτούν μικρούς χρόνους έκθεσης πρέπει να γίνεται με μικρό αριθμό-f.

Τα διαφράγματα περιορισμού φωτεινής ισχύος επηρεάζουν και τη διακριτική ικανότητα του οπτικού συστήματος. Περισσότερα για το θέμα αυτό θα πούμε όταν μιλήσουμε για την περίθλαση. Για το λόγο αυτό, εδώ δε θα είμαστε αυστηροί συζητώντας για το λεγόμενο βάθος εστίασης (depth of focus), ένα μέγεθος επίσης σημαντικό στη φωτογραφία. Το βάθος εστίασης μπορεί να οριστεί ως η μέγιστη απόσταση Δb κατά την οποία μπορούμε να μετακι-



νήσουμε την οθόνη παρατήρησης του ειδώλου ώστε η εστίασή του να είναι ακόμη αποδεκτή. Από την άλλη, αγνοώντας άλλου είδους σφάλματα, προβλέπεται ότι, λόγω της περίθλασης και μόνο το φως δε μπορεί να εστιαστεί σε σημεία με τη γεωμετρική έννοια αλλά σε φωτεινούς δίσκους πεπερασμένου μεγέθους. Η ακτίνα των δίσκων θα είναι ίση με τον ονομαζόμενο δίσκο του Airy,

$$\Delta r = 1.22\lambda \frac{b}{D}.$$
(14)

Συνεπώς δύο δίσκοι των οποίων τα κέντρα διαφέρουν απόσταση μικρότερη από την ακτίνα τους (που εξαρτάται από το D) είναι σχεδόν αδύνατο να διακριθούν ως ξεχωριστά σημεία και φαίνονται ως ένα. Στο απλό παράδειγμα του Σχ. 16, η σχέση μεταξύ Δb και Δr μπορεί εύκολα να βρεθεί μέσω της αναλογίας,

$$\frac{\Delta r}{\Delta b} = \frac{D/2}{b} \tag{15}$$

οπότε με τη βοήθεια της (13) (με αντικατάσταση της f από τη b) το βάθος εστίασης γράφεται ως,

$$\Delta b = 2.44\lambda \left(\frac{b}{D}\right)^2 = 2.44\lambda (1 - M_T)^2 [f/\#]^2$$
(16)

με  $M_T$  την εγκάρσια μεγέθυνση το φακού. Σημειώστε ότι το  $\Delta b$  είναι η απεικόνιση του συζυγούς βάθους πεδίου (field depth)  $\Delta a$  (Σχ. 16) που έχει την ίδια εξάρτηση από τον αριθμό-f. Μπορούμε να δούμε την πρακτική σημασία της παραπάνω συζήτησης στις φωτογραφίες του Σχ. 17. Η φωτογραφία (α) έχει καταγραφεί με f/# = f/4 και ταχύτητα διαφράγματος  $10^{-3}$  s ενώ η (β) με f/# = f/22και ταχύτητα διαφράγματος  $30^{-1}$  s. Στη δεύτερη περίπτωση τα αντικείμενα φαίνονται πολύ καθαρά ανεξάρτητα από την απόστασή τους από τη φωτογραφική μηχανή (βάθος πεδίου) αλλά το είδωλο του τρεχούμενου νερού εμφανίζεται θολό. Ακριβώς το αντίθετο συμβαίνει με τη φωτογραφία (α) όπου το είδωλο του νερού είναι πολύ καλά εστιασμένο αλλά τα είδωλα των μακρινών αντικειμένων φαίνονται θολά.

#### 9.2 Διαφράγματα Πεδίου και Παράθυρα Εισόδου και Εξόδου

Θα χρησιμοποιήσουμε πάλι το παράδειγμα μίας απλουστευμένης εκδοχής της φωτογραφικής μηχα-



νής που απεικονίζει ένα μακρινό αντικείμενο στο φωτογραφικό φιλμ. Το πλαίσιο που συγκρατεί το φιλμ θέτει ταυτόχρονα και τα όρια του μεγέθους του ειδώλου και επακόλουθα του μέγιστου μεγέθους του αντικειμένου που μπορεί να απεικονιστεί. Το πλαίσιο στην περίπτωση αυτή είναι το διάφραγμα πεδίου και καθορίζει το γωνιακό πεδίο παρατήρησης (Σχ. 18). Γενικά, το διάφραγμα πεδίου τοποθετείται συνήθως στο επίπεδο δημιουργίας του ειδώλου αλλά μπορεί να τοποθετηθεί και στη περιοχή του αντικειμένου όπως για παράδειγμα στο διαφανοσκόπιο όπου το αδιαφανές πλαίσιο της θέσης της διαφάνειας παίζει αυτό το ρόλο. Το (πραγματικό ή φανταστικό) είδωλο αυτού του τύπου διαφράγματος που δημιουργείται από όλους τους φακούς ή κάτοπτρα πριν από αυτό (δηλαδή από τα στοιχεία που το φως συναντά πριν φτάσει στο διάφραγμα) ονομάζεται παράθυρο εισόδου (entrance window). Στη περίπτωση που δεν υπάρχουν οπτικά στοιχεία τότε το διάφραγμα συμπεριφέρεται και ως παράθυρο εισόδου. Το είδωλο του διαφράγματος που δημιουργείται από όλους τους φακούς ή κάτοπτρα μετά από αυτό (δηλαδή από τα στοιχεία που το φως συναντά αφού περάσει από το διάφραγμα) ονομάζεται παράθυρο εισόδου. Και στοιχεία που το φως συναντά αρου δημιουργεί-

οπτικά στοιχεία μετά από το διάφραγμα τότε το ίδιο συμπεριφέρεται και ως παράθυρο εξόδου. Σε έναν παρατηρητή στη περιοχή σχηματισμού του ειδώλου δημιουργείται η εντύπωση ότι το γωνιακό πεδίο παρατήρησης περιορίζεται από το παράθυρο εισόδου. Από την άλλη μεριά, σε ένα παρατηρητή στη περιοχή του αντικειμένου δημιουργείται η εντύπωση ότι είναι το παράθυρο εξόδου που



το περιορίζει. Ο όρος «παράθυρο» είναι ιδιαίτερα εύστοχος. Φανταστείτε για παράδειγμα ότι βρίσκεστε σε ένα δωμάτιο και κοιτάτε έξω. Είναι τότε το μέγεθος και η θέση του παραθύρου σε σχέση με εσάς που καθορίζει το πεδίο παρατήρησής σας.

#### 10. Αριθμητικό Άνοιγμα (Numerical Aperture)

Πρέπει να τονιστεί ότι, λόγω του ότι η θέση και το μέγεθος του διαφράγματος περιορισμού ισχύος και της κόρης εισόδου και εξόδου είναι ανεξάρτητος της εκάστοτε θέσης του αντικειμένου και ειδώλου, η σχέση-ορισμός (13) του αριθμού-f είναι ανεξάρτητος από τη θέση του αντικειμένου αν και, όπως είπαμε παραπάνω, εάν το αντικείμενο δεν είναι μακρινό πρέπει να χρη-



σιμοποιείται η απόσταση του ειδώλου *b* αντί της εστιακής απόστασης *f*. Παρ' όλα αυτά τις περισσότερες φορές συνεχίζουμε να υπολογίζουμε τον αριθμό-f μέσω της (13) σε οποιαδήποτε περίπτωση ακριβώς για το λόγο ότι αποτελεί αμετάβλητο χαρακτηριστικό του συστήματος. Υπάρχει όμως και μία παράμετρος των οπτικών συστημάτων που επίσης είναι μέτρο της ισχύος συλλογής φωτός ενός συστήματος αλλά που αυτή τη φορά εξαρτάται εκπεφρασμένα από τη θέση του αντικειμένου. Η παράμετρος αυτή είναι το λεγόμενο *Αριθ*μητικό Άνοιγμα (Numerical Aperture – NA) που δίδεται από τη σχέση

$$NA = n_1 \sin\theta \tag{17}$$

όπου n<sub>1</sub> ο δείκτης διάθλασης του μέσου πριν από την είσοδο του φωτός στο σύστημα και η γωνία θ σχηματίζεται από τον οπτικό άξονα του συστήματος και την λεγόμενη περιθωριακή ακτίνα (marginal ray) ή την προέκτασή της (Σχ. 19). Η περιθωριακή ακτίνα είναι αυτή που ξεκινά από τον άξονα του συστήματος στη θέση του αντικειμένου και έχει τη μεγαλύτερη δυνατή κλίση. Ακτίνες με ακόμη μεγαλύτερη κλίση αποκόπτονται. Η γνώση του αριθμητικού ανοίγματος είναι ιδιαίτερα σημαντική στις οπτικές ίνες και στα μικροσκόπια.

#### 11. Το Ανθρώπινο Μάτι

#### 11.1 Περιγραφή & Λειτουργία

Ένα απλό σχέδιο του ανθρώπινου ματιού φαίνεται στο Σχ. 20. Ο βολβός του ματιού περιβάλλεται από το σκληρό χιτώνα του ματιού-1, που προστατεύει το εσωτερικό του ματιού και του δίνει κάποια ακαμψία. Στο εμπρόσθιο μέρος ο σκληρός χιτώνας μετατρέπεται στο λεπτό και διαφανή κερατοειδή χιτώνα-2 που λειτουργεί ως εμπρόσθιος φακός του ματιού. Πίσω από τον κερατοειδή χιτώνα υπάρχει η ίριδα-3, ένας μυς σχετικά σκληρός με μορφή δαχτυλιδιού που μπορεί να ανοίγει ή να κλείνει ώστε να ελέγχει τη ποσότητα φωτός που εισέρχεται στην κόρη-4. Η κόρη αποτελεί το κεντρικό άνοιγμα του ματιού (διάφραγμα περιορισμού φωτεινής ισχύος). Πίσω από την ίριδα βρίσκεται ο κρυσταλοειδής φακός-5 που είναι ελαστικός και συγκρατείται από το βλεφαριδωτό μυ-6. Ο μυς αυτός μπορεί να τεντωθεί ή να συρρικνωθεί ώστε να μεταβάλλει την καμπυλότητα του κρυσταλοειδή φακού και συνεπώς και την εστιακή του απόσταση. Ο θάλαμος μεταξύ φακού και κερατοειδή χιτώνα είναι γεμάτος από ένα υδατώδες υγρό ενώ ο θάλαμος πίσω από το φακό είναι γεμάτος από ένα άλλο πυκνότερο υγρό με την ονομασία υαλώδες σώμα οφθαλμού-7. Ο θάλαμος που συγκρατεί το υαλώδες σώμα είναι καλυμ-



μένος με ένα φωτοευαίσθητο στρώμα, τον αμφιβληστροειδή χιτώνα-9. Αυτός έχει σχήμα ημισφαιρικό και περιέχει φωτοδέκτες δύο ειδών, τα ραβδία και τα κωνία. Το μάτι έχει συνολικά περίπου 125 εκατομμύρια ραβδία και 6.5 εκατομμύρια κωνία. Οι φωτοδέκτες βρίσκονται στο πίσω μέρος του αμφιβληστροειδή χιτώνα που συγκρατείται από ένα αδιαφανή αγγειακό ιστό-8. Σε μία πλευρά του αμφιβληστροειδή χιτώνα συγκλίνουν τα νευρικά κύτταρα προς το οπτικό νεύρο-10. Το σημείο όπου το οπτικό νεύρο εισέρχεται στο μάτι ονομάζεται τυφλό σημείο-11 διότι δεν υπάρχουν φωτοδέκτες. Αντίθετα, στο σημείο που ο οπτικός άξονας τέμνει τον αμφιβληστροειδή χιτώνα υπάρχει ένα βαθούλωμα-12 (fovea centralis) που είναι το σημείο της πλέον ευκρινούς όρασης. Στο σημείο αυτό είναι συγκεντρωμένα τα κωνία. Η υπόλοιπη επιφάνεια του αμφιβληστροειδή χιτώνα είναι κατειλημμένη κυρίως από ραβδία.

Όταν φως εισέρχεται στο μάτι και συλλαμβάνεται από τα ραβδία προκαλεί μία φωτοχημική αντίδραση που έχει ως αποτέλεσμα τη μετατροπή ενός συμπλόκου (που αποτελείται από μια μορφή της βιταμίνης Α και της πρωτεΐνης ροδοψίνης του αμφιβληστροειδή χιτώνα) από την ισομερή μορφή cis- στη μορφή trans-. Λόγω της αντίδρασης αυτής κάθε ραβδίο αποθηκεύει ενέργεια και δημιουργεί ένα νευρικό παλμό που συλλαμβάνεται από το οπτικό νεύρο και οδηγείται στον εγκέφαλο. Κάθε ραβδίο μπορεί να ανιχνεύσει ένα και μοναδικό *φωτόνιο* (που θα εξηγήσουμε αργότερα τι είναι!). Στα κωνία από την άλλη μεριά οφείλεται η αντίληψη των χρωμάτων αν και δεν είναι τόσο ευαίσθητα στο φως όσο τα ραβδία. Λόγω αυτής της διαφοράς μεταξύ κωνίων και ραβδίων μπορούμε να δούμε σε λιγοστό φως τα σχήματα των αντικειμένων αλλά όχι και τα χρώματά τους.

#### 11.2 Οπτικά Χαρακτηριστικά, Γωνία Όρασης & Διακριτική Ικανότητα του Ματιού.

Ο κερατοειδής χιτώνας, ο κρυσταλοειδής φακός και το υγρό-7 αποτελούν ένα οπτικό σύστημα ισοδύναμο με ένα λεπτό φακό εστιακής απόστασης ~17.2 mm. Το οπτικό κέντρο του ισοδύναμου φακού απέχει 5 mm από το κερατοειδή χιτώνα προς το εσωτερικό του ματιού και βρίσκεται πάνω στον οπτικό του άξονα που φαίνεται στο Σχ. 20. Το μάτι μπορεί να δημιουργήσει στον αμφιβληστροειδή χιτώνα ευκρινή είδωλα αντικειμένων που βρίσκονται σε διαφορετικές αποστάσεις. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω της μεταβολής της εστιακής απόστασης του κρυσταλοειδούς φακού. Η δυνατότητα αυτή του ματιού ονομάζεται **προσαρμογή** (**accommodation**). Το μάτι προσαρμόζεται αυθόρμητα. Όταν εστιάζουμε τη προσοχή μας από το ένα αντικείμενο στο άλλο η ευκρίνεια του ειδώλου που δημιουργείται μειώνεται και αυτό προκαλεί την αποστολή ενός σήματος προς τον εγκέφαλο. Αυτός με τη σειρά του αναγκάζει το βλεφαριδωτό μυ να συρρικνωθεί ή χαλαρώσει ώστε να αλλάξει και η εστιακή απόσταση του κρυσταλοειδούς φακού και να έχουμε πάλι ευκρινές είδωλο στον αμφιβληστροειδή χιτώνα. Η απόσταση που μπορεί να δει ευκρινώς το μάτι όταν ο βλεφαριδωτός μυς είναι τελείως χαλαρός ονομάζεται μακρινό σημείο του ματιού και για υγιή και νέα μάτια πρέπει να είναι άπειρη. Αντίθετα το κοντινότερο σημείο που μπορούμε να δούμε όταν ο μυς είναι κατά το μέγιστο συρρικνωμένος ονομάζεται κοντινό σημείο του ματιού και είναι περίπου 15 cm. Στη περίπτωση αυτή όμως μετά από λίγο επέρχεται κούραση. Τέλος, η απόσταση άκοπης ευκρινούς όρασης ή απόσταση της πλέον ευκρινούς όρασης είναι περίπου Δ=25 cm. Στην απόσταση αυτή το μάτι προσαρμόζεται και ο μυς είναι ελαφρά συρρικνωμένος αλλά δεν κουράζεται.

Το μάτι παρουσιάζει όλα τα σφάλματα των φακών. Η σαφήνεια των ειδώλων οφείλεται στο μικρό άνοιγμα της ίριδας και συνεπώς και της κόρης και γενικότερα στο μικρό άνοιγμα της φωτεινής δέσμης που επιτρέπεται να εισέλθει στο μάτι με επακόλουθο την ισχύ της παραζονικής προσέγγισης. Τα προηγούμενα δεν έχουν να κάνουν με τις παθήσεις των ματιών. Για παράδειγμα, στα μάτια που υποφέρουν από μυωπία το μακρινό σημείο δε βρίσκεται στο άπειρο αλλά σε κάποια πεπερασμένη απόσταση. Αντίθετα, στα μάτια που υποφέρουν από πρεσβυωπία το κοντινό σημείο του ματιού είναι σε απόσταση μεγαλύτερη των 15 cm. Τα δύο μάτια κάθε ανθρώπου βλέπουν τα αντικείμενα λίγο διαφορετικά το ένα από το άλλο. Μέσω της εμπειρίας, ο εγκέφαλος συνδυάζει τις δύο εικόνες και δημιουργεί τη αίσθηση της προοπτικής και την αντίληψη του βάθους. Οι οπτικοί άζονες των ματιών σχηματίζουν την λεγόμενη *γωνία σύγκλισης*. Οι δύο κόρες απέχουν περίπου 5 cm, οπότε η γωνία σύγκλισης μπορεί να πάρει τιμές μεταξύ ~0° (μακρινό σημείο) και 10° (κοντινό σημείο).

Το μέγεθος του ειδώλου που δημιουργείται στον αμφιβληστροειδή χιτώνα καθορίζεται αποκλειστικά από τη γ**ωνία όρασης** 

$$\varphi = h_f / f_{eye}$$

μετρημένη από το ισοδύναμο οπτικό κέντρο (Ο στο Σχ. 21). Η γωνία φ μπορεί να αυξηθεί εάν το αντικείμενο έλθει κοντύτερα στο μάτι (αλλά αυτό συνεπάγεται κούραση του ματιού). Δύο φωτεινά σημεία ενός αντικειμένου θα είναι διακριτά από το μάτι εάν τα σημεία στα οποία απεικονίζονται επάνω στον



αμφιβληστροειδή χιτώνα απέχουν απόσταση μεγαλύτερη ή ίση από την απόσταση δύο διαδοχικών κωνίων ή ραβδίων που είναι περίπου  $h_0$ =5 μm. Εάν αυτό δε συμβαίνει, τα δύο σημεία θα εμφανιστούν ως ένα. Η διακριτική ικανότητα του ματιού λοιπόν χαρακτηρίζεται από την ελάχιστη γωνία όρασης  $\varphi_o$ , που για  $h_f \approx h_o$  και  $f_{eye} \approx 17.2$  mm στη σχέση (18) είναι ίση με 1' (πειραματικές μελέτες έδειξαν ότι μεταβάλλεται από άτομο σε άτομο μεταξύ 1' και 2'). Πρέπει όμως να τονιστεί ότι η διακριτική ικανότητα του ματιού μειώνεται και όσο μειώνεται η φωτεινότητα του ειδώλου.

(18)
# 12. Ο Απλός Μεγεθυντής

Όσον αφορά τα μάτια, η μεγέθυνση των αντικειμένων από οποιοδήποτε οπτικό σύστημα επιτυγχάνεται πάντα μέσω της αύξησης της γωνίας όρασης  $\varphi$ . Το απλούστερο όργανο αυτού του τύπου είναι ο απλός μεγεθυντής ή **απλό μικροσκόπιο** δηλαδή ένας συγκλίνων φακός μικρής εστιακής απόστασης που τοποθετείται μπροστά από το μάτι σε μικρή απόσταση από αυτό. Το αντικείμενο τοποθετείται είτε στη θέση της εστίας του φακού (είδωλο στο άπειρο) είτε σε απόσταση μικρότερη από την εστιακή του απόσταση. Στη δεύτερη περίπτωση, του Σχ. 22, το είδωλο είναι φανταστικό, μεγαλύτερο του αντικειμένου και ορθό και επιλέγουμε να απέχει από το σύστημα φακός-μάτι απόσταση ίση με αυτή της άκοπης ευκρινούς όρασης Δ. Η λεγόμενη **μεγεθυντική ισχύς** (ή *γωνιακή μεγέθυνση*<sup>1</sup>) *γ* του απλού μικροσκοπίου ορίζεται ως:

Ο λόγος της γωνίας όρασης του ειδώλου όταν υπάρχει ο φακός προς τη γωνία όρασης του αντικειμένου όταν αυτός απουσιάζει, θεωρώντας ότι αντικείμενο και είδωλο βρίσκονται σε απόσταση Δ από το μάτι.

Από το Σχ. 22 έχουμε λοιπόν,

$$\gamma \equiv \frac{\varphi'}{\varphi} \tag{19}$$

και είναι φανερό ότι στα πλαίσια της παραξονικής προσέγγισης  $(\tan \varphi \sim \varphi)$  και λόγω της κοινής απόστασης αντικειμένου και ειδώλου από το σύστημα φακού-ματιού είναι αριθμητικά (και μόνο) ίση με το λόγο B/A



δηλαδή με την εγκάρσια μεγέθυνση του φακού,  $M_T$ . Χρησιμοποιώντας τη σχέση (9) για την εγκάρσια μεγέθυνση των λεπτών φακών, σε συνδυασμό με τη σχέση (8), και θέτοντας  $b \approx -\Delta$  ( $\Delta > 0$ ) βρίσκουμε τελικά,

$$\gamma \approx 1 + \frac{\Delta}{f_{lens}} \tag{20}$$

Εάν το είδωλο βρίσκεται στο άπειρο τότε από τη σχέση (20) πρέπει να παραληφθεί η μονάδα και η μεγεθυντική ισχύς είναι κάπως μικρότερη αλλά το μάτι δε προσαρμόζεται και αυτό είναι ιδιαίτερα επιθυμητό. Οι εστιακές αποστάσεις των απλών μεγεθυντών κυμαίνονται συνήθως μεταξύ 1-10 cm οπότε η μεγεθυντική ισχύς κυμαίνεται μεταξύ 3.5 και 26. Στη πράξη οι μικρής εστιακής απόστασης φακοί παρουσιάζουν έντονα σφάλματα και γι' αυτό περιοριζόμαστε σε μεγεθύνσεις μεταξύ 5 και 10.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Ο ορισμός αυτός ισχύει ειδικά για τα μάτια. Δεν συμπίπτει με εκείνον που δόθηκε για τους φακούς (σχέση (12)).

# 13. Το Σύνθετο Μικροσκόπιο

Με το σύνθετο μικροσκόπιο επιτυγχάνονται μεγεθύνσεις πολύ μεγαλύτερες από αυτές ενός απλού μεγεθυντή. Το όργανο αποτελείται κυρίως από ένα σύστημα φωτισμού του αντικειμένου και από δύο φακούς. Ο φακός που βρίσκεται κοντύτερα στο υπό μελέτη δείγμα ονομάζεται αντικειμενικός ενώ ο φακός όπου τοποθετούμε το μάτι μας για να το παρατηρήσουμε προσοφθάλμιος. Το σύστημα φωτισμού είναι πολύ σημαντικό για τη λειτουργία του μικροσκοπίου και για τη σχεδίασή του απαιτείται ξεχωριστή μελέτη. Ο δε αντικειμενικός είναι πολύ μικρής εστιακής απόστασης και η απόστασή του από τον προσοφθάλμιο είναι σταθερή. Αυστηρά μιλώντας, η εστιακή απόσταση του αντικειμενικού και η απόσταση του υπό εξέταση δείγματος από αυτόν είναι τόσο μικρές που η παραξονική προσέγγιση δεν ισχύει τις περισσότερες φορές. Εν πάση περιπτώσει, θεωρώντας ότι συνεχίζει να ισχύει, έχουμε να κάνουμε με ένα σύστημα δύο λεπτών φακών εστιακών αποστάσεων  $f_o$  (αντικειμενικός) και  $f_e$  (προσοφθάλμιος) που απέχουν μεταξύ τους κατά d. Συμβολίζοντας την απόσταση μεταξύ των δύο εστιών των φακών με  $\ell$  (Σχ. 23(α)), έχουμε λοιπόν,

$$\mathbf{d} = f_o + f_e + \ell \,. \tag{21}$$

Είναι η απόσταση  $\ell$ , αντί της d, που αναφέρεται συνήθως ως "μήκος του μικροσκοπίου" μια και είναι πολύ μεγαλύτερη των  $f_o$  και  $f_e^2$ . Έτσι δίδεται η δυνατότητα να έχουμε δημιουργία είτε φανταστικού ειδώλου (παρατήρηση με το μάτι – Σχ. 23(α)) είτε πραγματικού (καταγραφή του ειδώλου από φωτογραφική μηχανή –



Σχ. 23(β)). Εφόσον το μήκος του μικροσκοπίου δε μεταβάλλεται, η εστίασή του και η επιλογή πραγματικού

 $<sup>^{2}</sup>$  Στο Σχ. 23 δεν αποδίδεται σωστά η σχέση της απόστασης  $\ell$  και των εστιακών αποστάσεων  $f_{o}$  και  $f_{e}$ .

ή φανταστικού ειδώλου επιτυγχάνεται με μετακίνηση όλου του συστήματος ως προς το αντικείμενο. Για παρατήρηση με το μάτι η μεγεθυντική ισχύς του μικροσκοπίου γράφεται (Σχ. 23α)

$$\gamma = \frac{\varphi''}{\varphi} = \left| \frac{B}{A} \right| = \left| M_T \right| \tag{22}$$

δηλαδή, όπως και για τον απλό μεγεθυντή, είναι κατ' απόλυτη τιμή ίση με τη συνολική εγκάρσια μεγέθυνση του συστήματος. Υποθέτοντας ότι το τελικό φανταστικό είδωλο απέχει από το μάτι απόσταση (κατ' απόλυτη τιμή) ≈Δ, η μεγεθυντική ισχύς τελικά γράφεται ως

$$\gamma \approx \left(\frac{\Delta}{f_o}\right) \left(\frac{\ell}{f_e}\right). \tag{23}$$

Όταν στη βιβλιογραφία αναγράφεται μεγεθυντική ισχύς, π.χ., 16×40 ο πρώτος αριθμός αναφέρεται στην εγκάρσια μεγέθυνση του αντικειμενικού (πρώτος όρος της (23)) και ο δεύτερος στη μεγεθυντική ισχύ του προσοφθάλμιου (δεύτερος όρος της (23)). Η συνολική μεγεθυντική ισχύς είναι προφανώς ίση με 640. Ως τυπικές τιμές ενός καλού μικροσκοπίου αναφέρουμε τις  $f_o \sim 2.5$  mm,  $f_e \sim 15$  mm, και  $\ell \sim 160$  mm. Εφόσον Δ=250 mm βρίσκουμε ότι γ~1000. Μεγεθύνσεις πάνω από αυτή δεν



έχουν νόημα διότι δε παρέχουν περισσότερη πληροφορία λόγω του φαινομένου της περίθλασης που θα εξετάσουμε αργότερα. Προς το παρόν η συζήτησή μας θα είναι ποιοτική. Στα μικροσκόπια λοιπόν προσπαθούμε να παρατηρήσουμε μικροσκοπικά αντικείμενα, οπότε η μέγιστη μεγεθυντική ισχύς πρέπει να «μεταφραστεί» στη μικρότερη απόσταση δύο σημείων που μπορούν να διαχωριστούν. Εάν η περίθλαση ληφθεί υπ' όψη, αποδεικνύεται ότι αυτή η μικρότερη απόσταση, έστω ε, γράφεται ως,

$$\varepsilon \sim \frac{\lambda}{n\sin\theta} = \frac{\lambda}{NA}$$
(24)

όπου η γωνία θ φαίνεται στο Σχ. 23(α) και με n συμβολίζουμε το δείκτη διάθλασης του υλικού που παρεμβάλλεται μεταξύ του επίπεδου πλακιδίου που συγκρατεί το υπό μελέτη αντικείμενο (αντικειμενοφόρος) και του αντικειμενικού φακού. Συνεπώς η απόσταση ε εξαρτάται από το αριθμητικό άνοιγμα και το μήκος κύματος. Για n≈1 (αέρας) το αριθμητικό άνοιγμα παίρνει τιμές NA=sinθ~0.9. Πέραν της διακριτικής ικανότητας προσέξτε ότι, όπως φαίνεται και στο Σχ. 24, μεγάλο μέρος τους φωτός χάνεται (κυρίως λόγω της ολικής εσωτερικής ανάκλασης). Εάν όμως ο χώρος μεταξύ αντικειμένου και αντικειμενικού είναι γεμάτος με **λάδι** κατάλληλου δείκτη διάθλασης (**index matching oil**) n~1.5 τότε επιτυγχάνουμε τιμές NA~1.45 και η ε μειώνεται σημαντικά. Επίσης καταφέρνουμε να συλλέξουμε πολύ περισσότερο φως (Σχ. 24). Από την άλλη, τα περισσότερα μικροσκόπια λειτουργούν με ορατό φως και το μάτι είναι ποιο ευαίσθητο σε μήκος κύματος λ=555 nm. Για αυτές τις τιμές έχουμε ότι ε~200 nm και ακόμη και αυτήν την τιμή θα την επιτύχουμε μόνο εάν ο φωτισμός του αντικειμένου είναι επαρκής. Αντικείμενα αυτού του μεγέθους<sup>3</sup> πρέπει, για να είναι άνετη η παρατήρηση, να αποτυπωθούν σε μια περιοχή του αμφιβληστροειδή χιτώνα που περιλαμβάνει τουλάχι-

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Τα κύτταρα έχουν μέγεθος ~1000 nm και μπορούν να παρατηρηθούν ενώ για τους ιούς με μέγεθος από 275 nm έως και 10 nm απαιτείται ηλεκτρονικό μικροσκόπιο.

στον 20 ραβδία ή κωνία (που το καθένα απέχει από το άλλο ~5 μm) δηλαδή που έχει διαστάσεις ~0.2 mm. Συνεπώς η μεγεθυντική ισχύς στη περίπτωση αυτή θα είναι  $\gamma$ ~0.2×10<sup>-3</sup>/200×10<sup>-9</sup> =1000. Πέραν αυτής της μεγέθυνσης λοιπόν το μάτι (ή άλλο ανιχνευτικό σύστημα) αδυνατεί να διακρίνει περισσότερη λεπτομέρεια. Στη πράξη οι μεγεθύνσεις περιορίζονται μεταξύ 400-600. Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε φυσικά και φως μικρότερου μήκους κύματος για να μειώσουμε την ε. Στη περίπτωση χρήσης του υπεριώδους πρέπει το μικροσκόπιο να διαθέτει φακούς από χαλαζία (ώστε να μη το απορροφούν) και να δημιουργείται πραγματικό είδωλο πάνω σε φθορίζουσα οθόνη που θα μετατρέπει την υπεριώδη ακτινοβολία σε ορατό φως.

Τέλος, πέρα από τη κλασσική μορφή μικροσκοπίας, υπάρχουν και άλλες (όπου χρησιμοποιείται φως) όπως για παράδειγμα η λεγόμενη μικροσκοπία αντίθεσης φάσης (phase contrast microscopy) μέσω της οποίας γίνονται ορατά διαφανή αντικείμενα, η συνεστιακή μικροσκοπία (confocal microscopy) και η μικροσκοπία απορρόφησης δύο φωτονίων που προσφέρουν μεγαλύτερη διακριτική ικανότητα τόσο στο ίδιο επίπεδο όσο και κατά το βάθος του υπό μελέτη αντικειμένου.

#### Κ1. Ερωτήσεις/Προβλήματα



 Αποδείξτε ότι, με όποια γωνία και να εισέλθει στο σύστημα των δύο επιπέδων κατόπτρων η φωτεινή ακτίνα, η διεύθυνση εξόδου της είναι ίδια με αυτήν της εισόδου.

2. Στο Σχήμα 1 δίδεται ποιοτικά η εξάρτηση του δείκτη διάθλασης από το μήκος κύματος, λ<sub>0</sub>, στο κενό για δυο διαφανή υλικά, το A και το B. Σημειώνεται επίσης και κάποιο συγκεκριμένο μήκος κύματος λ<sub>0</sub>(1).





Σχήμα 2.

Σχήμα 1.

Στο Σχήμα 2, υποθέστε ότι η προσπίπτουσα στη διαχωριστική επιφάνεια ακτινοβολία έχει μήκος κύματος λ<sub>0</sub>(1). Έχουμε τοποθετήσει ανιχνευτές φωτός στις θέσεις 1, 2, 3 και 4. Για ποιους ανιχνευτές είμαστε σίγουροι ότι δε θα ανιχνεύσουν φως και γιατί;

**3.** Αποδείξτε ότι φωτεινή ακτίνα που προσπίπτει σε γυάλινο επίπεδο πλακίδιο υφίσταται παράλληλη μετατόπιση αλλά όχι αλλαγή διεύθυνσης.



4. Για πρόσπτωση ακτίνων όπως φαίνεται στο σχήμα, βρείτε τον ελάχιστο δείκτη διάθλασης του γυαλιού για τον οποίο δε θα υπάρχει διαθλώμενη ακτίνα στην υποτείνουσα του πρίσματος που περιβάλλεται από αέρα.

**5.** Βρείτε τη θέση του ειδώλου σε σχέση με το φακό καθώς και το μέγεθος και τη διεύθυνσή του σε σχέση με το αντικείμενο στις ακόλουθες περιπτώσεις: (1)  $a \rightarrow \infty$ , (2) a=3f, (3) a=2f, (4) a=f, (5) a=f/2 όταν (α) f>0, (β) f<0.

6. Έχουμε σύστημα δύο λεπτών φακών εστιακών αποστάσεων  $f_1$  και  $f_2$ . Η απόσταση των δύο φακών είναι d. Βρείτε τη θέση και μεγέθυνση του τελικού ειδώλου στις παρακάτω περιπτώσεις.

(a)  $f_1 = f_2 = f > 0, d = 2f$ (1)  $a_1 = f/2, (2) a_1 = f, (3) a_1 = 3f$ (**β**)  $f_1 = f > 0, f_2 = -f, d = 2f$  $a_1 = 5f/3$ 

**7.** Βρείτε το είδωλο του τετραγώνου ΑΒΓΔ. Βρείτε και τη διαμήκη μεγέθυνση του ειδώλου της πλευράς ΑΒ. Τι παρατηρείτε;



8. Μεγεθυντής δέσμης 1 (αντίστροφο τηλεσκόπιο Keppler): Δύο συγκλίνοντες λεπτοί φακοί εστιακών αποστάσεων  $f_1$  και  $f_2 > f_1$  τοποθετούνται στον ίδιο κεντρικό άξονα και σε απόσταση  $d=f_1+f_2$  ο ένας από τον άλλο. Δέσμη ακτίνων διαμέτρου D<sub>0</sub>, παράλληλων τόσο μεταξύ τους όσο και με τον άξονα εισέρχεται στο σύστημα όπως στο σχήμα. Αποδείξτε ότι η εξερχόμενη από το δεύτερο φακό δέσμη είναι επίσης παράλληλη και διαμέτρου  $D=D_0 f_2/f_1$ .

9. Μεγεθυντής δέσμης 2 (αντίστροφο τηλεσκόπιο Γαλιλαίου): Αποκλίνων λεπτός φακός εστιακής απόστασης  $f_1 < 0$  και συγκλίνων λεπτός φακός εστιακής απόστασης  $f_2 \ge |f_1|$  τοποθετούνται στον ίδιο κεντρικό άξονα και σε απόσταση  $d=f_2-|f_1|$  ο ένας από τον άλλο. Δέσμη ακτίνων διαμέτρου  $D_0$ , παράλληλων τόσο μεταξύ τους όσο και με τον άξονα εισέρχεται στο σύστημα όπως στο σχήμα. Αποδείξτε ότι η εξερχόμενη από το δεύτερο φακό δέσμη είναι επίσης παράλληλη και διαμέτρου  $D=D_0:f_2/|f_1|$ .

10. Αντικείμενο απέχει από λεπτό συγκλίνοντα φακό απόσταση α. Μετά το φακό και σε απόσταση επίσης α από αυτόν, υπάρχει οθόνη παρατήρησης. Με το σύμβολο (ο) απεικονίζονται οι δύο εστίες του φακού. Σχεδιάστε αιτιολογημένα τις πορείες των φωτεινών ακτίνων που φαίνονται στο σχήμα. Τι περιμένετε να δείτε στην οθόνη;

11. Αντικείμενο τοποθετείται σε απόσταση a από συγκλίνοντα λεπτό φακό εστιακής απόστασης f, όπως φαίνεται στο σχήμα. Με το σύμβολο (0) απεικονίζονται οι δύο εστίες του φακού ενώ με κατακόρυφη διακεκομμένη γραμμή το εστιακό του επίπεδο F. Το είδωλο του αντικειμένου απεικονίζεται ευκρινώς στην οθόνη Ι που απέχει από το φακό απόσταση b (1/a + 1/b = 1/f). Από το αξονικό και τα δύο ακραία σημεία του αντικειμένου χαράζουμε τρεις ακτίνες κλίσης  $+\theta$ , 0 και  $-\theta$ . Σγεδιάστε την πορεία των ακτίνων από το φακό μέχρι και την οθόνη Ι. Τι παρατηρείτε να συμβαίνει στο εστιακό επίπεδο;

12. Ο φακός μιας φωτογραφικής μηγανής έχει εστιακή απόσταση  $\sim 5$  cm και σμικρύνει τα είδωλα των αντικειμένων που φωτογραφίζει κατά ένα παράγοντα ~100. Εάν θέλουμε ευκρινή απεικόνιση αντικειμένων σε βάθος ~10 m (βάθος πεδίου), ποιος θα πρέπει να είναι ο αριθμός f/#; Ποια θα πρέπει να είναι η διάμετρος του φακού; Η φωτογράφιση πραγματοποιείται με ορατό φως (κεντρικού μήκους κύματος ~500 nm).

13. Περιγράψτε συνοπτικά τα μέρη και τη λειτουργία του ματιού.









F



14. Ποια θα πρέπει να είναι η εστιακή απόσταση ενός απλού μεγεθυντή ώστε, όταν το είδωλο του αντικειμένου βρίσκεται στην απόσταση άκοπης ευκρινούς όρασης Δ, η μεγεθυντική ισχύς να είναι ίση με γ=5; Ποια η αντίστοιχη εστιακή απόσταση εάν το είδωλο βρίσκεται στο άπειρο;

14. Στο διπλανό σχήμα εμφανίζεται η περιοχή του αντικειμενικού φακού ενός σύνθετου μικροσκοπίου. Μεταξύ του φακού και της καλύπτρας υπάρχει στρώμα αέρα (n<sub>αέρα</sub>~1). Ο δείκτης διάθλασης του γυαλιού από το οποίο είναι κατασκευασμένα ο φακός και η καλύπτρα είναι n>1. Χρησιμοποιώντας το σχήμα εξηγήστε τους λόγους για τον οποίους παρεμβάλουμε λάδι δείκτη διάθλασης n μεταξύ καλύπτρας και αντικειμενικού φακού.

15. Εάν η μεγέθυνση που προσφέρει ο φακός είναι (κατ' απόλυτη τιμή) ίση με 50 ποια η απόσταση ε; Εάν χρησιμοποιηθεί φως μήκος κύματος 500 nm ποιο θα πρέπει να είναι προσεγγιστικά το αριθμητικό άνοιγμα (NA); Εάν χρησιμοποιούσαμε φως μήκους κύματος 250 nm (με το ίδιο NA) θα κερδίζαμε ή θα χάναμε σε διακριτική ικανότητα και πόσο; <sup>1</sup>







# Κ2. Περίθλαση και Χωρικά Φίλτρα

# 1. Περίθλαση Fresnel, Περίθλαση Fraunhofer & Μετασχηματισμοί Fourier

Ήδη έχουμε αναφέρει το κριτήριο εφαρμογής της Γεωμετρικής Οπτικής που γράφεται  $D >> \sqrt{L\lambda}$ , με D το μέγεθος της οπής ή του εμποδίου στο οποίο προσπίπτει το φως, L την απόσταση μεταξύ οπής και οθόνης παρατήρησης και  $\lambda$  το μήκος κύματος της ακτινοβολίας. Εάν η ισχυρή αυτή ανισότητα δεν ισχύει το φως δε διαδίδεται πλέον ευθύγραμμα όταν συναντά οπές ή εμπόδια αλλά παρατηρούνται αποκλίσεις που



αποδίδονται με τον όρο περίθλαση. Όπως έχουμε ήδη πει, η περίθλαση μπορεί να θεωρηθεί ως μία υποπερίπτωση του φαινομένου της συμβολής. Π.χ. η διάδοση ενός Η/Μ κύματος από μία οπή προς μία οθόνη μπορεί να προβλεφθεί μέσω της συμβολής, σε κάποιο σημείο της οθόνης, των επιμέρους κυμάτων που εκπέμπονται από κάθε σημείο του κυματομετώπου στην περιοχή της οπής. Για τη περίθλαση λοιπόν γενικεύουμε την αρχή του Huygens, στηριζόμαστε δηλαδή στην Αρχή Huygens-Fresnel που δηλώνει ότι: Οιοδήποτε σημείο ενός κυματομετώπου μπορεί να θεωρηθεί ως πηγή δευτερογενών σφαιρικών κυμάτων, ίδιας ταχύτητας και συχνότητας με το υπ' όψη κύμα. Η συνολική διαταραχή σε κάποιο σημείο Ρ προκύπτει από τη πρόσθεση (υπέρθεση - συμβολή) όλων των σφαιρικών κυμάτων που διέρχονται δι' αυτού, πολλαπλασιασμένων με τον παράγοντα  $(\cos(\theta_{iP})+1)/2$  (Sc. 1). Προφανώς, τα σφαιρικά κύματα που διέρχονται δια του P έχουν διαφορετικές φάσεις και πλάτη που είναι αντιστρόφως ανάλογα των αποστάσεων Α.Ρ. Το συνολικό πλάτος του πεδίου σε σημείο παρατήρησης που βρίσκεται σε κάποια απόσταση από την οπή υπολογίζεται μέσω του «αθροίσματος» (δηλαδή της ολοκλήρωσης) πάνω σε όλα τα σημεία του αρχικού κυματομετώπου. Οδηγούμαστε τότε στο λεγόμενο ολοκλήρωμα Fresnel-Kirhoff που συνδέει τη κατανομή του πεδίου στη περιοχή της οπής με τη κατανομή του πεδίου σε κάποιο σημείο ή επιφάνεια παρατήρησης που βρίσκεται σε κάποια απόσταση από αυτή. Εάν η απόσταση μεταξύ οπής και οθόνης παρατήρησης είναι πολύ μικρή ( $\Sigma \chi$ . 2(α)) τότε μιλάμε για περίθλαση Fresnel και το ολοκλήρωμα Fresnel-Kirhoff πρέπει πρακτικά να υπολογιστεί χωρίς

προσεγγίσεις. Αντίθετα, εάν η απόσταση μεταξύ οπής και οθόνης είναι μεγάλη σε σχέση με τις διαστάσεις της οπής (Σχ. 2(γ)) τα σφαιρικά κύματα προσεγγίζονται από επίπεδα (Σχ. 3(α)), η περιγραφή απλοποιείται σημαντικά και μιλάμε τότε για περίθλαση Fraunhofer. Ακόμη όμως και στη περί-



πτωση όπου η απόσταση μεταξύ ανοίγματος και σημείου παρατήρησης είναι μικρή μπορούμε να έχουμε περίθλαση Fraunhofer εάν τοποθετήσουμε μετά το άνοιγμα ένα φακό που απέχει από αυτό όσο η εστιακή του απόσταση. Τα σφαιρικά κύματα που εκπέμπονται από τα σημεία του ανοίγματος μετατρέπονται τότε σε επίπεδα κύματα μετά το φακό (Σχ. 3(β)). Στις σημειώσεις αυτές θα περιοριστούμε στη περίθλαση Fraunhofer η οποία, όπως προείπαμε, έχει ως ιδιαίτερο χαρακτηριστικό την απλοποίηση του ολοκληρώματος Fresnel-Kirhoff που στη περίπτωση αυτή παίρνει τη μορφή ενός μετασχηματισμού (ολοκληρώματος) Fourier (για το λόγο αυτό μερικές φορές ονομάζεται και περίθλαση Fourier). Εδώ τα αποτελέσματα του υπολογισμού των



σχετικών ολοκληρωμάτων θα δίδονται έτοιμα. Όμως για λόγους πληρότητας και για την καλύτερη κατανόηση όσων θα ακολουθήσουν, θα αναφερθούμε περιληπτικά στη μιγαδική περιγραφή ενός επίπεδου Η/Μ κύματος. Η κυματική εξίσωση για το φως (όπως παράγεται από τις εξισώσεις Maxwell) έχει, για τα επίπεδα κύματα, ως λύσεις τις πραγματικές συναρτήσεις  $\vec{\mathbf{E}}_{max} \cos(\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{r}} - \omega t + \varphi)$  και  $\vec{\mathbf{E}}_{max} \sin(\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{r}} - \omega t + \varphi)$ . (Υπενθύμιση 1<sup>η</sup>: Το κυματάνυσμα  $\vec{\mathbf{k}}$ , μέτρου  $k=2\pi/\lambda$ , δείχνει την διεύθυνση διάδοσης του κύματος. Το  $\vec{\mathbf{r}}$  είναι απλώς το διάνυσμα θέσης. Η έκφραση  $\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{r}}$  συμβολίζει το εσωτερικό γινόμενο των δύο διανυσμάτων και ισούται με  $k \cdot r \cdot \cos(\theta)$ , όπου  $\theta$  η γωνία που σχηματίζουν τα  $\vec{\mathbf{k}}$  και  $\vec{\mathbf{r}}$ . Όταν, η το κύμα διαδίδεται κατά τη διεύθυνση π.χ. z,  $\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{r}} = k \cdot z$ ). Οι δύο παραπάνω λύσεις «συμπυκνώνονται» σε μία εάν εργαστούμε με τις μιγαδικές συναρτήσεις

$$\vec{\mathbf{E}}_{\max} e^{\pm i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{r}}+\varphi} e^{\mp i\omega t}$$
(1)

(Υπενθύμιση 2<sup>η</sup>: e<sup>±iφ</sup>=cosφ±i·sinφ, όπου i η φανταστική μονάδα, i<sup>2</sup>=-1). Ένα από τα ενδιαφέροντα στοιχεία της παραπάνω γραφής είναι ότι, τουλάχιστον όσον αφορά την περίθλαση, μπορούμε να αγνοήσουμε το χρονικά εξαρτώμενο εκθετικό και να ασχοληθούμε μόνο με το χωρικό μέρος του κύματος. Αγνοώντας και το διανυσματικό χαρακτήρα του  $\vec{\mathbf{E}}_{max}$ , μια και δε θα μας χρησιμεύσει εδώ, θα αναφερόμαστε από εδώ και στο εξής στο μιγαδικό πλάτος

$$u(\mathbf{r}) = E_{\max} e^{\pm i \vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{r}} + \varphi}$$
(2)

από το οποίο η μέση χρονική τιμή της έντασης ακτινοβολίας Ι υπολογίζεται μέσω της σχέσης

$$I \propto |u|^2$$
. (3)

Ας θεωρήσουμε τώρα τη δυσδιάστατη διάταξη (x,z) του Σχ. 4 όπου μία οθόνη που βρίσκεται στη θέση z=0 παρουσιάζει διαπερατότητα πλάτους (amplitude transmission function)  $t(x_i)$ . Μέσω της διαπερατότητας μπορούμε να περιγράψουμε τελείως αδιαφανείς περιοχές της οθόνης (t=0), ανοίγματα χωρίς κανένα υλικό στο χώρο που καταλαμβάνουν (t=1), μερικώς αδιαφανείς περιοχές (0<|t|<1), καθώς και διαφανείς περιοχές που προκαλούν μόνο μεταβολή της φάσης του προσπίπτοντος κύματος



 $(t=e^{i\phi})^1$ . Εδώ θα ασχοληθούμε με τις περιπτώσεις όπου η t είναι πραγματική συνάρτηση, ισχύει δηλαδή 0 $\leq$ t $\leq$ 1 (ειδικά στο Σχ. 4 έχει σχεδιαστεί η συνάρτηση διαπερατότητας πλάτους για μία σχισμή χαραγμένη κατά τη διεύθυνση y). Έστω λοιπόν ότι στην οθόνη προσπίπτει κάθετα ένα επίπεδο κύμα u<sub>0</sub>, οπότε αμέσως μετά από αυτήν το εξερχόμενο κύμα γράφεται

$$u_i(x_i) = t(x_i) \cdot u_0 \tag{4}$$

Εφόσον το πλάτος του προσπίπτοντος επιπέδου κύματος θεωρείται παντού σταθερό μπορούμε να θέσουμε  $u_0=1$ . Συνεπώς  $u_i(x_i)=t(x_i)$ . Για την περίθλαση Fraunhofer, αποδεικνύεται ότι το πλάτος  $u_L(x_L)$  του πεδίου σε σημείο  $x_L$  μακρινής οθόνης που βρίσκεται στη θέση z=L δίνεται από τη σχέση

$$u_L(x_L) \propto F[t(x_i)] \tag{5a}$$

με

$$F[t(x_i)] \propto \int_{-\infty}^{\infty} t(x_i) e^{-i\frac{2\pi x_L}{\lambda L}x_i} dx_i$$
(5β)

τον μετασχηματισμό Fourier. Η (5) γενικεύεται και στις δύο διαστάσεις και μπορεί να χρησιμοποιηθεί μετά κατάλληλη μετατροπή και για τις διαπερατότητες που έχουν αξονική συμμετρία (όπως π.χ. μια κυκλική οπή). Ότι αξίζει να κρατήσουμε εδώ είναι ότι η κατανομή πλάτους στη μακρινή οθόνη δίνεται από τον μετασχηματισμό της διαπερατότητας t που χαρακτηρίζει το άνοιγμα ή εμπόδιο. Συνεπώς κάθε άνοιγμα συνδέεται με μία τελική κατανομή στην οθόνη παρατήρησης, έχουμε δηλαδή  $t \rightarrow F[t]$  και ένταση  $I_{aρχικη} \propto |t|^2 \rightarrow I_{τελική} \propto$  $|F[t]|^2$ . Ένα χαρακτηριστικό της περίθλασης, που προβλέπεται και από το ολοκλήρωμα Fourier, είναι ότι όσο περισσότερο εκτεταμένη είναι η t, τόσο συμπιέζεται χωρικά η τελική κατανομή έντασης και αντίστροφα. Π.χ. εάν στο αρχικό επίπεδο z=0 ισχύει παντού t=1 (δηλαδή δε θέτουμε κανένα εμπόδιο στη διάδοση του κύματος) τότε η (5β) προβλέπει ότι η ένταση I θα είναι ένα φωτεινό σημείο (στην πράξη θα είναι μια μικρή φωτεινή κηλίδα ίδιων διαστάσεων με την αρχική μας δέσμη). Αντίθετα, εάν στο επίπεδο z=0 έχουμε τοποθετήσει αδιαφανή οθόνη με ένα μόνο άνοιγμα «μηδενικών» διαστάσεων (φωτεινό σημείο), τότε προβλέπεται ότι όλη η οθόνη παρατήρησης στο z=L θα είναι ομοιόμορφα φωτισμένη.

# 2. Παραδείγματα Προτύπων Περίθλασης

#### 2.1 Απλή Ορθογώνια Σχισμή

Θεωρήστε παράλληλη μονοχρωματική (επίπεδο κύμα) δέσμη laser μήκους κύματος λ που προσπίπτει κάθετα σε ορθογώνια λεπτή σχισμή πλάτους *a* (>λ) και μήκους πολύ μεγαλύτερου από *a*. Η διαπερατότητα της σχισμής γράφεται ως

$$t_{slit}(x_i) = \begin{cases} 1 \varepsilon \acute{\alpha} v |x_i| < a/2\\ 0 \varepsilon \acute{\alpha} v |x_i| > a/2 \end{cases}$$
(6)

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Αυστηρά μιλώντας, είναι πρακτικά αδύνατο να έχουμε μερικώς αδιαφανή ανοίγματα χωρίς να υπάρχει κάποιο υλικό στη περιοχή που καταλαμβάνουν και για το λόγο αυτό η διαπερατότητα θα έπρεπε να γράφεται ως t=|t|e<sup>iφ</sup>. Σε μια πρώτη προσέγγιση όμως μπορούμε να αγνοήσουμε τον παράγοντα φάσης θεωρώντας ότι t=|t|.

(Σχ. 4). Τότε, σε οθόνη που απέχει απόσταση L από τη σχισμή καταγράφεται σχηματισμός περίθλασης που αποτελείται από εναλλασσόμενες φωτεινές και σκοτεινές περιοχές (Σχ. 5α). Η ένταση της ακτινοβολίας στις διάφορες θέσεις του σχηματισμού περίθλασης δίνεται από την έκφραση:

$$I_L \propto \left| u_L \right|^2 \propto \left( \frac{\sin \pi \xi}{\pi \xi} \right)^2, \quad \xi = \frac{a}{\lambda} \sin \theta$$
 (7)

Στην εξίσωση (7) η γωνία θ προσδιορίζει την θέση παρατήρησης του σχηματισμού περίθλασης ως προς το κέντρο της σχισμής (Σχ. 5). Για κάθε σημείο παρατήρησης πάνω στην οθόνη εκφράζεται μέσω της σχέσης,

$$\sin\theta = \frac{x_L}{\sqrt{x_L^2 + L^2}} \tag{8a}$$

όπου  $x_L$  η απόσταση πάνω στην οθόνη του σημείου παρατήρησης από το κέντρο του σχηματισμού περίθλασης, που βρίσκεται ακριβώς απέναντι από το κέντρο της σχισμής. Για μικρές γωνίες όμως ( $\theta < 5^\circ$ ) μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την παραξονική προσέγγιση sin $\theta$ -tan $\theta$ - $\theta$  ( $\theta$  εκφρασμένη σε rad) οπότε



Στο κέντρο του σχηματισμού περίθλασης καταγράφεται η μέγιστη ένταση. Στο σημείο αυτό (ζ=0,  $\theta$ =0) η παράσταση  $[\sin(\pi\xi)/(\pi\xi)]^2$  (που ονομάζεται παράγοντας περίθλασης) έχει μέγιστο ίσο με το 1. Ποιοτικά, ο σχηματισμός περίθλασης αποτελείται από ένα έντονο κύριο μέγιστο και πολλά ασθενή δευτερεύοντα μέγιστα μεταξύ των οποίων εμφανίζονται σημεία μηδενικής έντασης (ελάχιστα έντασης). Οι θέσεις αυτών των ελαχίστων περίθλασης προσδιορίζονται από την σχέση,

$$a\sin\theta_m = m\lambda, \ m = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \tag{9}$$

Παρατηρείστε ότι ο ακέραιος δείκτης *m* (αποκαλείται και τάξη του ελαχίστου) δεν λαμβάνει την τιμή 0 που αντιστοιχεί στην θέση του κύριου μεγίστου και όχι σε θέση ελαχίστου. Οι ίδιας απόλυτης τιμής θετικές και αρνητικές τιμές του δείκτη (π.χ. +1 και –1) αντιστοιχούν σε θέσεις ελαχίστων συμμετρικές ως προς το κύριο μέγιστο (Σχ. 5(α)).

Διερευνώντας την (7) διαπιστώνουμε ότι για δεδομένη τιμή του λόγου  $a/\lambda$  και λόγω του ότι  $|\sin\theta_m| \le 1$ , ο μέγιστος αριθμός κροσσών περίθλασης καθορίζεται από την συνθήκη  $|m| \le a/\lambda$ . Είναι επίσης αξιοσημείωτο ότι οι θέσεις των ελαχίστων εξαρτώνται και από το μήκος κύματος (χρώμα). Ερώτηση: Τι περιμένουμε εάν αντί για μονοχρωματική ακτινοβολία ενός laser χρησιμοποιήσουμε το φως μιας λάμπας ή του Ήλιου;

#### 2.2 Αρχή του Babinet

Χρησιμοποιώντας το προηγούμενο παράδειγμα και τις μαθηματικές ιδιότητες των μετασχηματισμών Fourier μπορούμε να αποδείξουμε την Αρχή του Babinet, δηλαδή την ισοδυναμία (όσον αφορά τη περίθλαση) μεταξύ σχημάτων που αποτελούν το ένα αρνητικό του άλλου. Φανταστείτε ότι, αντί για σχισμή, στη θέση *z*=0 έχουμε εμπόδιο ιδίου σχήματος και διαστάσεων (π.χ. μία τρίχα). Τότε η διαπερατότητα πλάτους του εμποδίου γράφεται

$$t_{stop} = 1 - t_{slit} \tag{10}$$

δηλαδή έχουμε παντού ελεύθερη διέλευση εκτός από ην περιοχή της τρίχας. Οπότε,

$$F[t_{stop}] = F[1] - F[t_{slit}] = \delta(x_L) - F[t_{slit}]$$

$$\tag{11}$$

όπου ο μετασχηματισμός  $F[t_{slit}] \propto u_L(x_L)$  έχει ήδη υπολογιστεί (σχέση (7)). Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, ο μετασχηματισμός Fourier της μονάδας (παντού ίδιο πλάτος και ένταση φωτός) είναι ένα φωτεινό σημείο στο κέντρο (θέση  $x_L=0$ ) που το συμβολίζουμε με  $\delta(x_L)$ . Χωρίς να είμαστε αυστηροί μπορούμε να πούμε ότι  $\delta(0)=1$  και  $\delta(x_L\neq 0)=0$ . Η σχέση (11) μας λέει λοιπόν ότι, εκτός από ένα φωτεινό σημείο στη θέση  $x_L=0$ (συνάρτηση δέλτα), το πρότυπο περίθλασης (ένταση  $I_L(x_L)$ ) του εμποδίου θα είναι ακριβώς ίδιο με αυτό της σχισμής. Φυσικά τα παραπάνω ισχύουν για συμπληρωματικές οπές και ανοίγματα οποιουδήποτε σχήματος και όχι μόνο για την περίπτωση σχισμής/«τρίχας». Η αρχή του Babinet αντανακλά το γεγονός ότι η περίθλαση είναι ένα φαινόμενο που οφείλεται σχεδόν αποκλειστικά στο σχήμα των διαχωριστικών ορίων μεταξύ του διαφανούς και του αδιαφανούς μέσου (τα οποία π.χ. στη περίπτωση μιας κυκλικής οπής και ενός κυκλικού εμποδίου είναι προφανώς ίδια).

#### 2.3 Κυκλικό Άνοιγμα

Μια απλή αλλά σημαντική διάταξη για σχηματισμό περίθλασης αποτελείται από ένα κυκλικό άνοιγμα διαμέτρου *D* πάνω σε αδιαφανή οθόνη. Όταν φωτιστεί με δέσμη laser προκύπτει σχηματισμός περίθλασης κυλινδρικά συμμετρικός ως προς τον άξονα που διέρχεται από το κέντρο του ανοίγματος και είναι κάθετος στην οθόνη παρατήρησης. Στο Σχ. 6 απεικονίζονται φωτογραφίες του σχηματισμού περίθλασης (για δύο διαμέτρους) μια τρισδιάστατη αναπαράσταση και η δισδιάστατη προβολή της. Η θεωρητική κατανομή της έντασης ακτινοβολίας για περίθλαση από κυκλικό άνοιγμα δίνεται από την έκφραση,

$$I_L \propto \left[\frac{2J_1(\pi w)}{\pi w}\right]^2 \qquad \qquad w = \frac{D}{\lambda}\sin\theta \qquad (12)$$

όπου η μέγιστη ένταση καταγράφεται ξανά για  $\theta=0$  και  $J_1(x)$  η συνάρτηση Bessel πρώτου είδους και τάξης 1. Για μικρές τιμές του ορίσματος πw η  $J_1(\pi w)$  είναι ποιοτικά παρόμοια με την  $\sin(\pi w)/(\pi w)$  οπότε οι συνθήκες που δίνουν τις θέσεις των ελαχίστων είναι παρόμοιες με αυτές της απλής σχισμής (σχέση (9)). Οι θέσεις αυτές όμως δεν αντιστοιχούν σε ακέραιες τιμές του δείκτη m μια και προσδιορίζονται από τις ρίζες της συνάρτησης Bessel (που έχουν υπολογισθεί αριθμητικά και είναι καταγεγραμμένες σε σχετικούς πίνακες). Για τα ελάχιστα έχουμε,

$$m = 1.22, 2.233, 4.241, 5.243, \dots$$
 (13)



Να σημειωθεί ότι η ένταση του σχηματισμού περίθλασης που περικλείεται από το πρώτο ελάχιστο για *m* = 1.22 (ο λεγόμενος δίσκος του Airy – σχήμα 9(α)) αντιστοιχεί στο 84% της συνολικής έντασης του σχηματισμού ενώ το υπόλοιπο 14% κατανέμεται μεταξύ των φωτεινών δακτυλίων.

# 2.4 Φράγμα Περίθλασης

Ας θεωρήσουμε τώρα ότι μονοχρωματική δέσμη laser ακτινοβολεί κάθετα μια διάταξη με πολλές σχισμές που απέχουν μεταξύ τους κατά την περίοδο Λ (Σχ. 10). Εάν ο αριθμός των σχισμών είναι άπειρος (πρακτικά πολύ μεγάλος) και το εύρος τους αμελητέο ( $a \rightarrow 0$ ), τότε μιλάμε για ένα φράγμα περίθλασης. Το πρότυπο περίθλασης στην οθόνη αποτελείται από φωτεινές κουκίδες (Σχ. 11) των οποίων οι θέσεις δίνονται από τη σχέση,

$$\Lambda \sin \theta_n = n\lambda, \ n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$
(14)

και οι οποίες έχουν περίπου σταθερή ένταση. Ο μέγιστος αριθμός τάξεων *n* καθορίζεται από την συνθήκη |n|≤Λ/λ.

Τελειώνουμε τη παρουσίαση του φράγματος περίθλασης με ένα τελευταίο σχόλιο που αφορά τις διευθύνσεις των χαραγών και του προτύπου περίθλασης. Όπως και για την απλή σχισμή, η εξάρτηση της διαπερατότητας

του φράγματος μόνο από το x υπονοεί ότι οι σχισμές είναι χαραγμένες κατά τη κατεύθυνση y. Αντίθετα, τα φωτεινά σημεία του προτύπου περίθλασης είναι κατανεμημένα κατά τη διεύθυνση x, δηλαδή κάθετα προς την διεύθυνση των σχισμών. Αυτή είναι κοινή ιδιότητα όλως των μορφών διαπερατοτήτων, άσχετα από την ακριβή μορφολογία τους.

#### 3. Ο Ρόλος της Περίθλασης στην Απεικονιστική Λειτουργία Φακών & Οπτικών Συστημάτων

Ας θεωρήσουμε τη διάταξη απλού μικροσκοπίου του Σχ. 11(α). Η φωτεινή πηγή-1 φωτίζει το αντικείμενο-3 (στη περίπτωση του σχήματος ένα φράγμα περίθλασης) μέσω του φακού-2. Ο φακός-2 μετατρέπει την αποκλίνουσα φωτεινή δέσμη της πηγής σε παράλληλη (επίπεδο κύμα). Λόγω του φράγματος το φως περιθλάται σε πολλά επίπεδα κύματα σε θετικές και αρνητικές τάξεις περίθλασης. Τα επίπεδα κύματα συλλέγονται από τον αντικειμενικό του μικροσκοπίου-4 από τον οποίο το φράγμα-3 απέχει απόσταση a (στο σχήμα το άνοιγμα του φακού-4 επαρκεί μόνο για τις τάξεις  $n=0, \pm 1$  αλλά θα υποθέσουμε εδώ προς το παρόν ότι όλες οι τάξεις συλλέγονται από αυτόν). Τα κύματα μετατρέπονται σε συγκλίνοντα και εστιάζονται στο εστιακό επίπεδο του φακού σχηματίζοντας το πρότυπο περίθλασης που αντιστοιχεί στη διαπερατότητα του φράγματος (οι φωτεινές κηλίδες που αναφέραμε προηγουμένως). Τα φωτεινά σημεία στο εστιακό επίπεδο του φακού μπορούν να θεωρηθούν ως σημειακές πηγές που εκπέμπουν σφαιρικά κύματα τα οποία συμβάλουν ώστε να δημιουργηθεί το είδωλο του φράγματος-5 σε οθόνη που απέχει απόσταση b από το φακό-4. Οι a και b είναι αποστάσεις αντικειμένου-ειδώλου και, υποθέτοντας ότι ο φακός-4 είναι λεπτός, σχετίζονται μέσω της γνωστής σχέσης 1/a + 1/b = 1/f. Παρατηρούμε ότι ο (χωρίς σφάλματα και στιγματικός) φακός-4



λειτουργεί ως μετασχηματιστής Fourier και μάλιστα εκτελεί *ταυτόχρονα* δύο μετασχηματισμούς: Πρώτον, δημιουργεί το πρότυπο περίθλασης του αντικειμένου στο εστιακό του επίπεδο και, δεύτερον, μετασχηματίζει το πρότυπο περίθλασης στο είδωλο του αντικειμένου. Στα πλαίσια της παραξονικής προσέγγισης τα παραπάνω προβλέπονται και από την γεωμετρική οπτική (Σχ. 11(β)) και συνθέτουν περιληπτικά τη θεωρία Abbe για τη δημιουργία των ειδώλων που ισχύει για οποιοδήποτε αντικείμενο και οπτικό σύστημα και όχι μόνο για το συγκεκριμένο παράδειγμα που παραθέσαμε εδώ. Αποδεικνύεται δε ότι η περίθλαση είναι βασικό συστατικό της διαδικασίας απεικόνισης (imaging) και όχι απλώς ένα ενοχλητικό φαινόμενο που περιορίζει τη διακριτική ικανότητα των οπτικών συστημάτων. Δείχνει επίσης το λόγο για τον οποίο είναι σημαντικό για ένα μικροσκόπιο να έχει μεγάλο αριθμητικό άνοιγμα (numerical aperture-NA) ώστε να μπορεί να συλλέξει τις μεγάλες τάξεις περίθλασης που είναι υπεύθυνες για τις λεπτομέρειες μιας εικόνας (που όσον αφορά τα μικροσκόπια είναι η κύρια πληροφορία που ενδιαφέρει). Αντίθετα, οι χαμηλές τάξεις είναι υπεύθυνες για τη χονδροειδή κατασκευή του ειδώλου ενώ η μηδενική τάξη συμβάλει σχεδόν αποκλειστικά και μόνο στο φωτισμό του ειδώλου. Είναι ακριβώς αυτοί οι λόγοι για τους οποίους η μεγέθυνση του μικροσκοπίου είναι δευτερεύουσας σημασίας σε σύγκριση με το αριθμητικό άνοιγμα και μεγεθύνσεις μικροσκοπίου μεγαλύτερες από ~1000 δεν δίδουν περισσότερη πληροφορία. Να σημειώσουμε εδώ ότι με τον όρο «τάξεις περίθλασης» δεν εννοούμε μόνο αυτές που παράγονται από ένα φράγμα περίθλασης αλλά συμπεριλαμβάνουμε το σύνολο του προτύπου περίθλασης μιας οσοδήποτε περίπλοκης διαπερατότητας (αντικειμένου). Έτσι, π.γ. λέγοντας «μεγάλες τάξεις» εννοούμε το φως που περιθλάται σε μεγάλες γωνίες και συνεπώς αποστάσεις από το κέντρο του προτύπου, ενώ η μηδενική τάξη αφορά το πλάτος ή την ένταση του φωτός ακριβώς στο κέντρο του προτύπου.

#### 4. Το Οπτικό Φιλτράρισμα

Η παραπάνω ανάλυση μας εισάγει στην ιδέα ότι μπορούμε να επηρεάσουμε τη μορφή του ειδώλου ενός αντικειμένου εάν επέμβουμε στο επίπεδο όπου εμφανίζεται το πρότυπο περίθλασης (στο προηγούμενο παράδειγμα το εστιακό επίπεδο του φακού-4, δηλαδή το λεγόμενο επίπεδο Fourier). Πράγματι, εάν με κατάλληλα διαφράγματα (χωρικά φίλτρα ή, απλούστερα, μάσκες) αποκόψουμε μερικές τάξεις και επιτρέψουμε τη διέλευση άλλων, η ανασύνθεση των διερχόμενων τάξεων θα δημιουργήσει ένα είδωλο που μπορεί να μη θυμίζει σε τίποτα το αρχικό αντικείμενο. Για να γίνουν τα παραπάνω κατανοητά θεωρήστε το ακόλουθο παράδειγμα: Έστω ότι με τη παραπάνω διάταξη απεικονίζουμε το περιθλαστικό φράγμα Α περιόδου  $\Lambda_A$ . Υποθέτοντας την ισχύ της παραξονικής προσέγγισης στη σχέση (14), στο εστιακό επίπεδο του φακού-4 θα εμφανιστούν φωτεινές κηλίδες στις θέσεις 0,  $\pm \lambda L/\Lambda_A$ ,  $\pm 2\lambda L/\Lambda_A$ ,  $\pm 3\lambda L/\Lambda_A$ , κλπ. Έστω τώρα ότι αντικαθιστούμε το φράγμα Α με το φράγμα Β για την περίοδο του οποίου ισχύει  $\Lambda_B=\Lambda_A/2$ . Στο εστιακό επίπεδο του φακού



εμφανίζονται φωτεινές κηλίδες στις θέσεις 0,  $\pm \lambda L/\Lambda_B$ ,  $\pm 2\lambda L/\Lambda_B$ ,  $\pm 3\lambda L/\Lambda_B$ ..., δηλαδή στις θέσεις 0,  $\pm 2\lambda L/\Lambda_A$ ,  $\pm 4\lambda L/\Lambda_A$ ,  $\pm 6\lambda L/\Lambda_A$ ,.... Υποθέστε, τέλος ότι χρησιμοποιούμε πάλι το φράγμα Α αλλά αυτή τη φορά τοποθετούμε στο εστιακό επίπεδο του φακού μία οθόνη φιλτραρίσματος που είναι παντού διαφανής εκτός των θέσεων των φωτεινών κηλίδων των περιττών τάξεων  $\pm \lambda L/\Lambda_A$ ,  $\pm 3\lambda L/\Lambda_A$ ,  $\pm 5\lambda L/\Lambda_A$  κ.λ.π. Ακριβώς μετά από τη μάσκα το πρότυπο περίθλασης θα είναι λοιπόν ίδιο με του φράγματος Β. Στην οθόνη-5 όπου χωρίς φιλτράρισμα θα εμφανιζόταν το είδωλο του φράγματος Α θα εμφανιστεί τώρα το είδωλο του φράγματος Β. Οι εφαρμογές των χωρικών φίλτρων είναι πολλές. Ένα παράδειγμα φαίνεται στο Σχ. 12. Ενώ η αρχική εικόνα αποτελείται από το φυτό στη γλάστρα μαζί με ένα πλέγμα γραμμών, το τελικό είδωλο μπορεί να περιέχει μόνο τις γραμμές (ακόμη και μόνο τις οριζόντιες ή κατακόρυφες) ή μόνο το φυτό με τη γλάστρα, απλώς και μόνον χρησιμοποιώντας την κατάλληλη μάσκα στο επίπεδο φιλτραρίσματος. Η μαθηματική επεξεργασία των παραπάνω δεν θα αναφερθεί αναλυτικά εδώ.

# 5. Ο Φακός ως Φίλτρο Αποκοπής Υψηλών Τάξεων Περίθλασης

Η θεωρία Abbe για το σχηματισμό των ειδώλων στα μικροσκόπια αποδίδει την απώλεια πληροφορίας στην αποκοπή των υψηλών τάξεων περίθλασης που προκαλεί το διάφραγμα περιορισμού ισχύος (Aperture Stop) του συστήματος. Ακριβέστερα, την αποδίδει στη κόρη εισόδου (entrance pupil). Αντίθετα, ο Rayleigh περιέγραψε το ίδιο φαινόμενο μέσω της αποκοπής πληροφορίας από τη κόρη εξόδου του συστήματος (exit pupil). Οι δύο περιγραφές είναι ισοδύναμες αν και η δεύτερη υιοθετείται περισσότερο σήμερα και είναι αυτή που θα παρουσιάσουμε εδώ. Το ενδιαφέρον σημείο και των δύο προσεγγίσεων του προβλήμα-



τος είναι ότι, όσον αφορά τη περίθλαση, δεν έχουν καμία σημασία οι επιμέρους λεπτομέρειες του συστήματος το οποίο μπορεί να θεωρηθεί ως «μαύρο κουτί». Το μόνο που χρειάζεται να γνωρίζουμε είναι η θέση και το σχήμα είτε της κόρης εισόδου είτε της κόρης εξόδου. Για να γίνουν τα παραπάνω κατανοητά θα χρησιμοποιήσουμε το παράδειγμα του Σχ. 13. Έστω λοιπόν ότι ένα επίπεδο κύμα προσπίπτει σε αδιαφανές διάφραγμα Ο με σημειακή οπή στη θέση του οπτικού άζονα. Ένας (προς το παρόν «μονοδιάστατος») φακός απεικονίζει το σημείο αυτό στο επίπεδο του ειδώλου Ι ενώ, όπως γνωρίζουμε, το επίπεδο φιλτραρίσματος βρίσκεται στο εστιακό επίπεδο F του φακού. Μέσω του διαφράγματος Ο δημιουργήσαμε ένα φωτεινό σημείο, δηλαδή μια σημειακή φωτεινή πηγή ( $\delta(x_{ob})$ ). Εάν ο φακός είχε άπειρη διάμετρο θα συνέλεγε όλο το φως που εκπέμπει η πηγή. Στο επίπεδο φιλτραρίσματος θα είχαμε  $u_F(x_F) = F[\delta(x_{ob})] = 1$ , δηλαδή μια σταθερή κατανομή πεδίου που θα εκτεινόταν σε όλο το επίπεδο F. Έτσι στο επίπεδο του ειδώλου θα είχαμε, από τον δεύτερο μετασχηματισμό,  $u_{im}(x_{im})=F[u_F] \propto \delta(x_{im})$  δηλαδή το είδωλο θα ήταν και αυτό σημειακό (στιγματική απεικόνιση). Όμως, ο φακός έχει πεπερασμένη διάμετρο D και συνεπώς ένα μέρος του φωτός δεν συλλέγεται. Όπως φαίνεται και από το Σχ. 13 αυτό *ισοδυναμεί* με ένα σύστημα φακού «άπειρης» διαμέτρου όπου όπως έχει τοποθετηθεί στο επίπεδο φιλτραρίσματος διάφραγμα διαμέτρου d, τέτοιου ώστε  $t_{Filter}=1$  για  $|x_F| \le d/2$  και  $t_{Filter}=0$  για  $|x_F| > d/2$  (δηλαδή μια απλή σχισμή πλάτους d). Η διάσταση d συνδέεται εύκολα με τη διάμετρο του φακού D μέσω ομοιότητας τριγώνων. Αποδεικνύεται λοιπόν ότι στο επίπεδο του ειδώλου αντί για το αναμενόμενο φωτεινό σημείο θα έχουμε μια φωτεινή κατανομή που, χρησιμοποιώντας την παραξονική προσέγγιση, γράφεται

$$I_{im} \propto \left(\frac{\sin \pi\xi}{\pi\xi}\right)^2 \qquad \qquad \xi \approx \frac{\pi D}{\lambda b} \frac{x_{im}}{M_T} \tag{15}$$

με  $M_T$  την εγκάρσια μεγέθυνση του ειδώλου. Δηλαδή, για αυτό το μονοδιάστατο παράδειγμα θα έχουμε ένα σχηματισμό περίθλασης ίδιο με αυτόν της απλής σχισμής. Εάν είχαμε υποθέσει φακό κυκλικού σχήματος τότε το αποτέλεσμα θα ήταν η κατανομή της σχέσης (12) για κυκλικό άνοιγμα. Παρατηρούμε λοιπόν ότι η οι πραγματικοί κυκλικοί φακοί, ακόμη και χωρίς άλλα σφάλματα, απεικονίζουν τη σημειακή πηγή ως πρότυπο Airy αντί να απεικονίσουν ένα σημείο και αυτό οφείλεται αποκλειστικά στη πεπερασμένη τους διάμετρο που, στο συγκεκριμένο παράδειγμα, είναι ταυτόχρονα διάφραγμα περιορισμού ισχύος, κόρη εισόδου και κόρη εξόδου. Εάν υπήρχε στη διάταξη κάποιο διάφραγμα περιορισμού φωτεινής ισχύος (αντί του φακού) τότε τα συμπεράσματα είναι τα ίδια μόνο που πρέπει να θεωρήσουμε ως D τη διάμετρο της κόρης εξόδου και ως απόσταση b την απόσταση μεταξύ κόρης εξόδου και ειδώλου.

Γίνεται λοιπόν τώρα αντιληπτό ότι τα χαρακτηριστικά του απεικονιστικού συστήματος επηρεάζουν τη διακριτική του ικανότητα. Ο λόγος είναι ο εξής: Έστω ότι προσπαθούμε να απεικονίσουμε δύο κοντινά σημεία. Για το κάθε ένα από αυτά δημιουργείται στο επίπεδο του ειδώλου μια κατανομή Airy. Εάν η επικάλυψη των δύο κατανομών είναι μεγάλη (πολύ μικρή απόσταση Δx<sub>im</sub> – Σχ. 14) είναι πιθανό ο διαχωρισμός τους να μην είναι δυνατός. Υπάρχουν πολλά κριτήρια βάσει των οποίων θεω-



ρούμε ότι τα δύο σημεία-κατανομές διαχωρίζονται. Το συνηθέστερο είναι το **κριτήριο Rayleigh** όπου θεωρούμε ότι δύο κατανομές μόλις που διαχωρίζονται εάν το κύριο μέγιστο την μίας συμπίπτει με το πρώτο περιθλαστικό ελάχιστο της άλλης (Σχ. 14). Συνεπώς, βάσει της (15) και των (9) και (13) έχουμε ότι

$$\Delta x_{im} \approx 1.22 \frac{M_T \lambda b}{D} \approx 1.22 |M_T| \lambda f /\#$$
(16)

όπου ο παράγοντας 1.22 αναφέρεται στο κυκλικό σχήμα του φακού. Η ελάχιστη απόσταση  $\Delta x_{im}$  στην οθόνη παρατήρησης θα αντιστοιχεί σε μία ελάχιστη απόσταση  $\Delta x_{ob}$  μεταξύ δύο σημείων του αντικειμένου (δείτε τη συζήτηση στο κεφάλαιο της Γεωμετρικής Οπτικής, για την ελάχιστη απόσταση  $\varepsilon = \Delta x_{ob}$  μεταξύ δύο σημείων που μπορεί να διαχωρίσει ένα σύνθετο μικροσκόπιο). Λόγω του ότι  $\varepsilon = \Delta x_{ob} = \Delta x_{im}/|M_T|$  έχουμε τελικά,

$$\varepsilon \approx 1.22 \cdot \lambda \cdot f / \# = 2.24 \frac{\lambda}{NA}$$
 (17)

(όπου υποθέσαμε δείκτη διάθλασης *n*=1 και ότι στην παραξονική προσέγγιση NA~2/f/# – Αποδείξτε το). Τα παραπάνω υπογραμμίζουν τη μεγάλη σημασία τόσο του αριθμού f/# όσο και του Αριθμητικού Ανοίγματος στη μικροσκοπία.

# 6. Διακριτική Ικανότητα Φασματοσκοπίου Φράγματος

Ένα οπτικό φασματοσκόπιο περιλαμβάνει μία πηγή φωτός, κάποιο οπτικό στοιχείο ανάλυσης του φωτός της πηγής και ένα σύστημα παρατήρησης ή/και καταγραφής της έντασης του αναλυμένου φωτός ως συνάρτησης του μήκους κύματός του. Το όργανο χρησιμοποιείται για τον φασματικό χαρακτηρισμό της φωτεινής πηγής ενώ για να βαθμονομηθεί απαιτείται συνήθως μια άλλη πηγή με γνωστό φασματικό περιεχόμενο. Αργότερα θα μιλήσουμε για τα φάσματα των ατόμων και των μορίων που δίνουν πληροφορίες για την ενεργειακή τους δομή. Και αυτό διότι τα φάσματα συγκεκριμένων στοιχείων ή μορίων αποτελούν το «δακτυλικό τους αποτύπωμα» και συνεπώς μπορούμε από αυτά να αναγνωρίσουμε ποιο ή ποια στοιχεία υπάρχουν στη φωτεινή πηγή και σε αρκετές περιπτώσεις και σε ποια αναλογία.

Τα οπτικά στοιχεία που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την ανάλυση του φωτός είναι τα πρίσματα (των οποίων η ικανότητα ανάλυσης βασίζεται στο διασκεδασμό κατά τη διάθλαση –  $n(\lambda)$ ) και τα φράγματα περίθλασης. Η χρήση των τελευταίων βασίζεται στο ότι, όπως φαίνεται και από τη σχέση (14), οι γωνίες  $\theta_n$  και συνεπώς και οι θέσεις των φωτεινών κουκίδων στην οθόνη παρατήρησης εξαρτώνται από το μήκος κύματος (δηλαδή το χρώμα). Στα σύγχρονα φασματοσκόπια χρησιμοποιούνται σχεδόν αποκλειστικά τα φράγματα και για το λόγο αυτό εδώ θα ασχοληθούμε μόνο με αυτά.



Θεωρούμε την κλασσική διάταξη φασματοσκοπίου πρίσματος του Σχ. 15. Το φως από την εκτεταμένη φωτεινή πηγή περνά από τη λεπτή σχισμή S. Ο φακός F<sub>1</sub> παραλληλίζει το φως πριν αυτό προσπέσει στο φράγμα κάθετα. Μετά την ανάλυση το φως εστιάζεται από το φακό F<sub>2</sub> σε οθόνη O. Οι φακοί F<sub>1</sub> και F<sub>2</sub> συμβολίζουν στην πραγματικότητα συστήματα φακών (π.χ. τηλεσκόπια ή/και το μάτι) και η οθόνη μπορεί να είναι ο αμφιβληστροειδής χιτώνας του ματιού ή κάποιο άλλο ανιχνευτικό σύστημα. Έστω τώρα ότι η φωτεινή δέσμη περιέχει δύο κοντινά μήκη κύματος λ και  $\lambda + \Delta \lambda$ . Η διαφορά μηκών κύματος θα προκαλέσει μια μικρή διαφορά γωνιών εξόδου από το φράγμα με αποτέλεσμα η δέσμη μήκους κύματος  $\lambda + \Delta \lambda$  να απεικονιστεί σε ένα σημείο της οθόνης, μετατοπισμένο κατά Δx σε σχέση με το σημείο εστίασης της δέσμης μήκους κύματος λ. Αυτό που απεικονίζουμε στην οθόνη είναι η σχισμή S (δημιουργείται ένα είδωλο ανά χρώμα). Θεωρούμε ότι το πλάτος της σχισμής είναι πρακτικά μηδενικό. Λόγω όμως της ύπαρξης των φακών πεπερασμένης διαμέτρου, οι φωτεινές γραμμές δε θα είναι μηδενικού πλάτους. Αντίθετα θα παρατηρήσουμε περίθλαση και οι κατανομές έντασης θα είναι παρόμοιες με αυτές του Σχ. 14. Πρέπει λοιπόν να εφαρμόσουμε και εδώ το κριτήριο Rayleigh. Η δ*ιακριτική ικανότητα* του φασματοσκοπίου ορίζεται ως

Ì

$$R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} \tag{18}$$

με Δλ τη μικρότερη δυνατή διαφορά μηκών κύματος που μπορεί να παρατηρηθεί ευκρινώς στη γειτονιά του μήκους κύματος λ. Μετά από μακροσκελή απόδειξη βρίσκουμε ότι για το φασματοσκόπιο φράγματος ισχύει

$$R=n\cdot\mathcal{N} \tag{19}$$

με Ντον ολικό αριθμό των χαραγών που φωτίζονται. Ο τελευταίος γράφεται ως

$$\mathcal{N} = L/\Lambda$$
 (20)

με L το πλάτος της προσπίπτουσας φωτεινής δέσμης (Σχ. 15). Η (19) δηλώνει ότι η διακριτική ικανότητα του φασματοσκοπίου φράγματος είναι ανεξάρτητη του μήκους κύματος και αυξάνει με την τάξη n.

#### 7. Περίθλαση ακτίνων Χ

Μέχρι τώρα έχουμε εξετάσει της περίθλαση του φωτός από περιοδικές δομές (φράγματα) σε μία (Σχ. 10) ή δύο (Σχ. 12) διαστάσεις (εκτείνονται σε επίπεδο κάθετο στην αρχική διεύθυνση διάδοσης του φωτός). Όπως έχουμε δει, ο αριθμός των μεγίστων έντασης περιορίζεται από τη συνθήκη  $|n| \le \Lambda/\lambda$  και συνεπώς για να υπάρξει η δυνατότητα παρατήρησης μεγίστων σε γωνίες  $\theta \ne 0$  θα πρέπει να ισχύει  $\Lambda > \lambda$ . Οι *τρισδιάστατες* περιοδικές δομές προκαλούν ανάλογη κατανομή περίθλασης με μέγιστα έντασης σε συγκεκριμένες διευθύνσεις. Όμως, τρισδιάστατες δομές με περίοδο  $\Lambda > \lambda$  δεν είναι εύκολα διαθέσιμες ή κατασκευάσιμες για το

ορατό φως (λ~500 nm). Υπάρχουν όμως πλήθος τρισδιάστατων δομών (π.χ. τα διάφορα κρυσταλλικά υλικά όπως ο κρύσταλλος NaCl) όπου η περίοδος Λ είναι της τάξης των αποστάσεων μεταξύ των ατόμων, δηλαδή ~0.1 nm. Συνεπώς, για να παρατηρήσουμε φαινόμενα περίθλασης στη περίπτωση αυτή θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε Η/Μ κύματα με μήκη κύματος της ίδιας τάξης μεγέθους. Αυτά τα μήκη κύματος αντιστοιχούν στις ακτίνες Χ. Στο Σχ. 16 φαίνονται μία διάταξη περίθλασης ακτίνων Χ και σε λεπτομέρεια η κρυσταλλική δομή (που ... σχεδιάζεται σε δύο διαστάσεις...) στην οποία ανακλώνται οι ακτίνες (φράγματα ανάκλασης, σε



αντίθεση με τα φράγματα διέλευσης που παρουσιάσαμε παραπάνω). Παρατηρούμε ότι οι ακτίνες ανακλώνται από οικογένειες ανακλαστικών επιπέδων. Σε έναν κρύσταλλο υπάρχουν πολλές τέτοιες οικογένειες και δύο παραδείγματα φαίνονται στα Σχ. 16(β) και (γ). Στην οικογένεια του Σχ. 16(β) η απόσταση μεταξύ διαδοχικών επιπέδων είναι ίση με Λ=α, (κοντινότερη απόσταση μεταξύ γειτονικών ατόμων) ενώ στο Σχ. 16(γ) έχουμε Λ=asinω. Για δεδομένα Λ και μήκος κύματος λ, ανάκλαση παρατηρείται μόνο σε συγκεκριμένες γωνίες λόγω ενισχυτικής συμβολής. Για όλες τις άλλες γωνίες η συμβολή είναι καταστροφική. Οι γωνίες ενισχυτικής συμβολής, όπου παρατηρούνται μέγιστα έντασης, δίνεται από τον **νόμο του Bragg**,

$$2\Lambda \sin\theta_n = n\lambda, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \tag{21}$$

όπου όμως εδώ οι γωνίες  $\theta_n$  είναι οι συμπληρωματικές των γωνιών πρόσπτωσης όπως τις έχουμε ορίσει στην οπτική μέχρι τώρα.

Εάν η δομή ενός κρυστάλλου είναι γνωστή μπορούμε να βρούμε το μήκος κύματος των ακτίνων Χ και η διάταξη του Σχ. 16(α) λειτουργεί ως φασματοσκόπιο σ' αυτήν τη φασματική περιοχή. Απεναντίας, εάν γνωρίζουμε το μήκος κύματος των ακτίνων Χ μπορούμε να βρούμε τις διάφορες αποστάσεις Λ που χαρακτηρίζουν τα ανακλαστικά επίπεδα και, από αυτές, τη δομή του κρυστάλλου. Σημειώστε ότι ο όρος «κρύσταλλος» δεν πρέπει να ερμηνεύεται αυστηρά. Π.χ. η περίθλαση ακτίνων Χ χρησιμοποιείται ευρέως για την εύρεση της δομής των οργανικών μορίων, όπως το DNA και άλλα μόρια βιολογικής σημασίας.

#### Κ2. Ερωτήσεις/Προβλήματα

1. Απλή σχισμή πλάτους *a*=100 μm φωτίζεται από δέσμη laser μήκους κύματος λ=500 nm (πράσινο) και το αντίστοιχο πρότυπο περίθλασης παρατηρείται σε οθόνη που απέχει από τη σχισμή απόσταση *L*=2 m. Χρησιμοποιώντας την παραξονική προσέγγιση (sin $\theta$ ~tan $\theta$ ~ $\theta$ (rad)) να βρείτε τις αποστάσεις *x<sub>m</sub>* από το κέντρο του σχηματισμού μέχρι τους σκοτεινούς κροσσούς περίθλασης τάξης *m*; Μέχρι ποια τάξη ισχύει η παραξονική προσέγγιση;

2. Απλή σχισμή πλάτους a φωτίζεται από δέσμη laser μήκους κύματος λ και το αντίστοιχο πρότυπο περίθλασης παρατηρείται σε οθόνη που απέχει από τη σχισμή απόσταση L. Εάν λ/a=0.25 πόσους σκοτεινούς κροσσούς περιμένουμε να παρατηρήσουμε σε κάθε πλευρά του κεντρικού μεγίστου της κατανομής;

**3.** Μια ανθρώπινη τρίχα άγνωστου πάχους *a* φωτίζεται από δέσμη laser μήκους κύματος  $\lambda$ =500 nm (πράσινο) και το αντίστοιχο πρότυπο περίθλασης παρατηρείται σε οθόνη που απέχει από τη σχισμή απόσταση *L*=2 m. Το πρότυπο εμφανίζει ένα κεντρικό μέγιστο και μηδενικά ελάχιστα έντασης εκατέρωθεν αυτού. Οι αποστάσεις των ελαχίστων από το μέγιστο είναι  $x_{\pm 1}$ =±1 cm,  $x_{\pm 2}$ =±2 cm, κλπ. Χρησιμοποιώντας την παραξονική προσέγγιση (sin $\theta$ -tan $\theta$ - $\theta$ (rad)) βρείτε το πάχος της τρίχας.

4. Το διπλανό διάγραμμα αναφέρεται σε δύο κατανομές έντασης ακτινοβολίας λόγω περίθλασης από απλή σχισμή. Η μία καμπύ-λη αντιστοιχεί σε πλάτος σχισμής a<sub>1</sub>=4λ, ενώ η άλλη σε πλάτος σχισμής a<sub>2</sub>=8λ. Ποια καμπύλη αναφέρεται σε πλάτος σχισμής a<sub>1</sub> και γιατί? Ποια κατανομή θα περιμένατε ποιοτικά εάν το πλάτος της σχισμής ήταν a=10<sup>7</sup>λ?



5. Κυκλική οπή διαμέτρου D=100 μm φωτίζεται από δέσμη laser μήκους κύματος  $\lambda=500$  nm (πράσινο) και το αντίστοιχο πρότυπο περίθλασης παρατηρείται σε οθόνη που απέχει από τη σχισμή απόσταση L=2 m. Ποια η ακτίνα του δίσκου του Airy; Τι θα συμβεί στην ακτίνα αυτή εάν η διάμετρος τη κυκλικής οπής διπλασιαστεί;

6. Κυκλική οπή διαμέτρου D φωτίζεται από δέσμη laser μήκους κύματος  $\lambda$ =500 nm (πράσινο) και το αντίστοιχο πρότυπο περίθλασης παρατηρείται σε οθόνη που απέχει από τη σχισμή απόσταση L=2 m. Εάν η διάμετρος του δίσκου του Airy είναι ίση με  $r_{Airy}$ =2 mm ποια η διάμετρος της οπής (sin $\theta$ ~tan $\theta$ ~ $\theta$ (rad));

7. Στο διπλανό σχήμα φωτεινή δέσμη που περιέχει δύο μήκη κύματος λ<sub>1</sub> και λ<sub>2</sub> (λ<sub>1</sub>>λ<sub>2</sub>) προσπίπτει κάθετα σε φράγμα περίθλασης. Τα περιθλαστικά μέγιστα πρώτης τάξης που αντιστοιχούν στα δύο μή-



κη κύματος εμφανίζονται στα σημεία Α και Β της οθόνης. Σε ποιο σημείο, το Α ή το Β, φτάνει ακτινοβολία μήκους κύματος λ<sub>1</sub>;

**8.** Περιθλαστικό φράγμα περιόδου Λ=10 μm φωτίζεται κάθετα από δέσμη laser μήκους κύματος λ=400 nm (μπλε) και το αντίστοιχο πρότυπο περίθλασης παρατηρείται σε οθόνη που απέχει από τη σχισμή απόσταση L=1 m. Χρησιμοποιώντας την παραξονική προσέγγιση (sinθ~tanθ~θ(rad)), να βρείτε τις αποστάσεις  $x_n$  από το κέντρο του σχηματισμού μέχρι τις φωτεινές κηλίδες τάξης  $n=\pm1$  και  $\pm2$ .

9. Στο διάγραμμα φαίνεται διάταξη χωρικού οπτικού φίλτρου. Επίπεδο μονοχρωματικό κύμα φωτίζει μια διαφάνεια (το αντικείμενο Ο) που αποτελείται από μια εικόνα κατασκευασμένη από περιθλαστικά φράγματα διαφόρων διευθύνσεων. Η διαφάνεια βρίσκεται σε απόσταση 2f από λεπτό συγκλίνοντα φακό εστιακής απόστασης f. Στο επίπεδο όπου εμφανίζεται το πρότυπο περίθλασης του αντικειμένου υπάρχει περιστρεφόμενη σχισμή. Η σχισμή φιλτράρει το πρότυπο και το φιλτραρισμένο είδωλο εμφανίζεται στην οθόνη S. (A) Σε ποιες αποστάσεις από το φακό πρέπει να βρίσκεται το φίλτρο F και η οθόνη S;



(B) Στο δεύτερο σχήμα είναι σχεδιασμένα τα φιλτραρισμένα είδωλα του αντικειμένου Ο που θα εμφανιστούν στην οθόνη S ανάλογα με τη διεύθυνση της σχισμής. Αντιστοιχίστε τις θέσεις 1, 2, 3 και 4 της σχισμής με τα είδωλα (α), (β), (γ) και (δ). Δικαιολογήστε την απάντησή σας χρησιμοποιώντας το σχηματισμό περίθλασης που θα εμφανιστεί στο επίπεδο φιλτραρίσματος F.

**10.** Ένα φράγμα περίθλασης περιόδου Λ φωτίζεται κάθετα με παράλληλη φωτεινή δέσμη laser μήκους κύματος λ Το φράγμα απέχει απόσταση *a* από φακό εστιακής απόστασης *f* ενώ το είδωλο του φράγματος εμφανίζεται σε απόσταση *b* από αυτόν. (*a*) Εάν  $\lambda/\Lambda$ =0.01 ποιος ο μέγιστος αριθμός  $n_{max}$  φωτεινών κηλίδων που περιμένουμε να παρατηρήσουμε σε κάθε πλευρά της κηλίδας μηδενικής τάξης στο εστιακό επίπεδο του φακού; (β) Τι περιμένετε να παρατηρήσετε στην οθόνη παρατήρησης του ειδώλου εάν στο εστιακό επίπεδο του φακού αποκόψουμε όλες τις φωτεινές κηλίδες (συμπεριλαμβανομένης και της μηδενικής τάξης) εκτός από αυτές των τάξεων περίθλασης  $n=\pm1$ . (γ) Τι περιμένετε να παρατηρήσετε στην οθόνη παρατήρησης του ειδώλου εάν η διάμετρος του φακού δεν είναι αρκετά μεγάλη ώστε να συλλέξει όλες τις ± $n_{max}$  τάξεις περίθλασης;

11. Ένας φακός απεικονίζει σε οθόνη Ι ένα αντικείμενο Ο. Στο εστιακό επίπεδο του φακού F εμφανίζεται το πρότυπο περίθλασης που αντιστοιχεί στο αντικείμενο. Ποιος είναι ο ρόλος της (ι) μηδενικής τάξης περίθλα-

σης (ιι) των μικρών τάξεων (γωνιών) περίθλασης και (ιιι) των μεγάλων τάξεων περίθλασης στην «κατασκευή» του ειδώλου από το επίπεδο F στο επίπεδο I;

12. Δύο φωτεινά σημεία απέχουν μεταξύ τους απόσταση ε. Το επίπεδο στο οποίο βρίσκονται τα σημεία απέχει απόσταση a από λεπτό φακό κυκλικού σχήματος, διαμέτρου D=1 mm και εστιακής απόστασης f=1 cm. Παρατηρείται ότι σε απόσταση b=2 m από το φακό σχηματίζονται τα είδωλα των δύο σημείων. Όμως, λόγω της πεπερασμένης διαμέτρου του φακού, τα είδωλα αυτά δεν είναι σημειακά αλλά κατανομές Airy. (α) Εάν το μήκος κύματος του φω

 $\varepsilon$ 

b

τός είναι  $\lambda$ =500 nm, ποια η μικρότερη απόσταση  $\Delta r$  για την οποία μόλις που διαχωρίζονται τα μέγιστα των δύο κατανομών, σύμφωνα με το κριτήριο Rayleigh (sin $\theta$ ~tan $\theta$ ~ $\theta$ (rad)); (β) Σε ποια απόσταση ε αντιστοιχεί αυτή η  $\Delta r$ ;

13. Σε φασματοσκόπιο φράγματος τα δύο μήκη κύματος  $\lambda_1$ =589.0 nm και  $\lambda_2$ =589.6 nm μόλις που διαχωρίζονται στην τρίτη τάξη περίθλασης. Για την τάξη αυτή και το μήκος κύματος  $\lambda_1$  η αντίστοιχη γωνία περίθλασης βρέθηκε να είναι 10°. (α) Ποια η διακριτική ικανότητα του φασματοσκοπίου στη τρίτη τάξη περίθλασης; (β) Ποιο το μήκος της φωτισμένης περιοχής του φράγματος; (γ) Τι θα συμβεί εάν καλύψουμε με αδιαφανές πέτασμα τη μισή φωτισμένη περιοχή;

14. Ακτίνες Χ μήκους κύματος λ προσπίπτουν σε κρύσταλλο Ni όπως στο σχήμα.
Εάν είναι γνωστό ότι a=0.1 nm και ότι η γωνία ενισχυτικής συμβολής στην πρώτη τάξη περίθλασης είναι θ<sub>1</sub>=45°, ποιο το μήκος κύματος λ;

**15.** Ακτίνες X μήκους κύματος  $\lambda$ =0.28 nm προσπίπτουν όπως στο σχήμα σε κρύσταλλο άγνωστης πλευράς *a*. Εάν η γωνία ενισχυτικής συμβολής στην πρώτη τάξη περίθλασης είναι  $\theta_1$ =45°, ποιο το *a*;

16. Ακτίνες Χ άγνωστου μήκους κύματος λ προσπίπτουν σε κρύσταλλο Νι όπως στο σχήμα. Εάν είναι γνωστό ότι *a*=0.215 nm και  $\omega$ =25° και ότι η γωνία ενισχυτικής συμβολής στην πρώτη τάξη περίθλασης είναι  $\theta_1$ =65°, ποιο το μήκος κύματος λ; <sup>1</sup>

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Παντού, το δεκαδικό μέρος ενός αριθμού διαχωρίζεται από το ακέραιο μέρος του με μία τελεία. Π.χ. 10.000=10





Μέρος Β

# Σύγχρονη, Ατομική & Μοριακή Φυσική

# **Κ3.** Εισαγωγικό σημείωμα στη Φυσική του 20<sup>ου</sup> αιώνα +

# 1. Η Κλασσική Φυσική στο Γύρισμα του 19<sup>ου</sup> προς 20° Αιώνα

Στο τέλος του 19<sup>ου</sup> αιώνα, αυτό που ονομάζουμε σήμερα Κλασσική Φυσική είχε φτάσει στο απόγειό της. Το οικοδόμημα αυτό, βασισμένο στους τρεις πυλώνες του - Κλασσική Μηχανική, Θεωρία Πεδίων και Κλασσική Στατιστική Μηχανική – εξηγούσε το σύνολο σχεδόν των φαινομένων του μακρόκοσμου. Η Κλασσική Μηχανική έχει ως βάση το νόμο του Νεύτωνα ( $\vec{F} = m\vec{a}$  ή σωστότερα  $\vec{F} = d\vec{p}/dt$ ), η Θεωρία Πεδίων αφορούσε τότε το πεδίο βαρύτητας και το ηλεκτρομαγνητικό (H/M) πεδίο (Εξισώσεις Maxwell) και η Κλασσική Στατιστική Φυσική συνδέει το μικρόκοσμο με το μακρόκοσμο, εισάγοντας τις μη-αντιστρεπτές διαδικασίες και τον ανεξάρτητο θεμελιώδη νόμο της αύξησης της Εντροπίας. Η Κλασσική Μηχανική έχει ως

σκοπό την περιγραφή των κινήσεων των σωμάτων κάτω από την επίδραση δυνάμεων. Ασχολείται επίσης και με τη σχετική κίνηση των δομικών μονάδων ενός συνεχούς μέσου κάτω από την επίδραση αμοιβαίων δυνάμεων, με εφαρμογή στη μηχανική των ρευστών και την κυματική. Ειδικά για την τελευταία, η λεγόμενη κυματική εξίσωση που περιγράφει τα μηχανικά κύματα, εξάγεται επίσης από την εξίσωση του Νεύτωνα. Συνεπώς, όπως λεγόταν τότε, «...σε τελευταία ανάλυση όλα τα κύματα είναι μηχανικές ταλαντώσεις κάποιου υλικού μέσου...» (Σχ. 1) και, επακόλουθα, η διάδοση των κυμάτων απαιτεί την ύπαρξη κάποιου μέσου διάδοσης. Το πρόβλημα που προέκυψε από αυτή τη θεώρηση αφορούσε το φως μια και, π.χ., το φως που προέρχεται από τα μακρινά άστρα φαινόταν να διαδίδεται στο κενό. Για τη λύση του προ-





Σχήμα 1.

βλήματος αυτού εντός του πλαισίου της Νευτώνειας Μηχανικής προτάθηκε ότι το φως διαδίδεται σε κάποιο υλικό μέσο που ονομάστηκε αιθέρας και «γεμίζευ» το σύμπαν. Πειραματικές μετρήσεις όμως έδειξαν ότι αιθέρας δεν υπάρχει. Η τελική λύση στο τότε παράδοξο δόθηκε από τον Maxwell και τις εξισώσεις του που προβλέπουν ότι το φως είναι Η/Μ κύμα και μπορεί να διαδίδεται και στο κενό, απουσία δηλαδή κάποιου υλικού μέσου. Συνεπώς οι εξισώσεις του ηλεκτρομαγνητισμού είναι ανεξάρτητες του Νόμου του Νεύτωνα. Οι συνέπειες όμως αυτής της ανεξαρτησίας είναι σημαντικές. Συγκεκριμένα, οδήγησε τους φυσικούς ώστε να θεωρήσουν δύο ξεχωριστές και αμοιβαία αποκλειόμενες φυσικές οντότητες:

(ι) Τα Σωματίδια, που χαρακτηρίζονται από καλά καθορισμένες τροχιές και έχουν ενέργεια και ορμή εντοπισμένες στο χώρο που καταλαμβάνουν. Επίσης, τα φυσικά μεγέθη που τα χαρακτηρίζουν, όπως η ενέργεια, η ορμή, η στροφορμή κλπ, μπορούν να πάρουν όλες τις δυνατές τιμές εντός επιτρεπόμενων διαστημάτων (συνεχές πεδίο τιμών).

και

(**u**) Τα Κύματα (**H**/**M**), τη διάδοση δηλαδή διαταραχών, όπου δεν υφίστανται καλά καθορισμένες τροχιές και η ενέργεια και η ορμή που μεταφέρεται από αυτά δεν είναι εντοπισμένες στο χώρο. Το πεδίο τιμών των καθα-

ρά κυματικών μεγεθών (συχνότητα, μήκος κύματος) όπως και της ενέργειας και της ορμής είναι και εδώ συνεχές... εκτός από μερικές περιπτώσεις όπου συναντούμε διάκριτες επιτρεπτές τιμές τους (π.χ. στάσιμα κύματα).

Συμπεριλαμβάνοντας λοιπόν και την Κλασσική Στατιστική Μηχανική καθώς και την Θεωρία της Σχετικότητας, τις οποίες δε θα παραθέσουμε εδώ, στα τέλη του 19<sup>συ</sup> αιώνα η επιτυχία της Κλασικής Φυσικής είναι πλήρης μια και εξηγεί όλα τα μέχρι τότε πειραματικά δεδομένα. Τα δεδομένα αυτά όμως αφορούν μόνο το μακρόκοσμο και όχι το μικρόκοσμο. Από τη στιγμή που το πείραμα θα «ακουμπήσει» το μικρόκοσμο εμφανίζονται αδικαιολόγητες και μη αναμενόμενες... «παραφωνίες». Οι τελευταίες οδήγησαν στην αναθεώρηση των απόψεών μας για τη λειτουργία του μικρόκοσμου και στην ανακάλυψη μιας πληρέστερης θεωρίας γι' αυτόν, την Κβαντική Μηχανική. Οι κυριότερες «παραφωνίες» αφορούν την ακτινοβολία μέλανος (μαύρου) σώματος, το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο, το φαινόμενο Compton, το πείραμα Davisson-Germer και τα φασματοσκοπικά δεδομένα των στοιχείων (αερίων). Παρακάτω θα ασχοληθούμε με μερικά από αυτά τα φαινόμενα. Είναι όμως χρήσιμο να συνοψίσουμε από τώρα το βασικό συμπέρασμα που προέκυψε από την επιτυχή θεωρητική ερμηνεία τους και οδήγησαν στη γένεση των Κβαντομηχανικής, ότι δηλαδή **στο μικρόκοσμο τα σωματίδια μπορούν να εμφανίσουν κυματική συμπεριφορά και, αντίστοιχα, τα κύματα σωμ<b>ατιδιακή**. Προφανώς, αυτό έρχεται σε πλήρη αντίθεση με τον παραπάνω κλασσικό διαχωρισμό σε σωματίδια και κύματα.

# 2. Παράδειγμα Σωματιδιακής Συμπεριφοράς Η/Μ Κυμάτων: Το Φωτοηλεκτρικό Φαινόμενο

Αν και ιστορικά το πρώτο φαινόμενο που έδειξε την ανεπάρκεια της Κλασικής Φυσικής στην ερμηνεία των φαινομένων αλληλεπίδρασης ύλης-ακτινοβολίας ήταν αυτό του μέλανος σώματος (που ερμηνεύτηκε από τον M Planck), εδώ δεν θα ασχοληθούμε με αυτό, λόγω του ότι απαιτεί αρκετές έννοιες της Στατιστικής Μηχανικής με τις οποίες το πιθανότερο είναι ότι δεν είστε εξοικειωμένοι. Θα περάσουμε λοιπόν απευθείας στο φωτοηλεκτρικό φαινόμενο το οποίο απαιτεί και πολύ απλούστερα μαθηματικά. Με τον όρο φωτοηλεκτρικό φαινόμενο εννοούμε την εκπομπή ηλεκτρονίων από ένα μέταλλο που προκαλείται από την πρόσπτωση ακτινοβολίας (κυρίως υπεριώδους) στην επιφάνειά του. Η σχετική πειραματική διάταξη φαίνεται στο Σχ. 2. Ένα γυάλινος θάλαμος κενού περιέχει δύο ηλεκτρόδια, εκ των οποίων το ένα κατασκευασμένο από το υπ' όψη μέταλλο. Το ηλεκτρόδιο αυτό φωτίζεται με φως συχνότητας ν και έντασης *Ι*. Τα παραγόμενα ηλεκτρόνια εξαναγκάζονται να κινηθούν προς το άλλο ηλεκτρόδιο και να συλλεχθούν από αυτό μέσω



της εφαρμογής διαφοράς δυναμικού V κατάλληλης πολικότητας μεταξύ των ηλεκτροδίων (το ηλεκτρόδιοσυλλέκτης είναι συνδεδεμένο με το θετικό πόλο της πηγής). Το πλήθος των ηλεκτρονίων που συλλέγονται στη μονάδα του χρόνου (ρυθμός συλλογής) είναι ανάλογο του μετρούμενου ηλεκτρικού ρεύματος *i*. Για αρκετά μεγάλες τάσεις επέρχεται κορεσμός του φωτορεύματος και συνεπώς συλλέγεται το σύνολο των ηλεκτρονίων που παράγονται με διάφορες κινητικές ενέργειες. Υπάρχει όμως κάποια μέγιστη κινητική ενέργεια

 $K_{\text{max}}$ , πέραν της οποίας δεν παράγεται κανένα ηλεκτρόνιο. Η ύπαρξη ορίου στη μέγιστη αρχική κινητική ενέργειά τους αποδεικνύεται μέσω της αντιστροφής της πολικότητας της πηγής (ηλεκτρόδιο-συλλέκτης συνδεδεμένο με τον αρνητικό πόλο) και της αύξησης της τάσης κατ' απόλυτη τιμή. Τα ηλεκτρόνια τότε απωθούνται από το συλλέκτη και μπορούν να φτάσουν σε αυτόν μόνον εάν η αρχική κινητική τους ενέργεια είναι μεγαλύτερη από e|V| (e είναι το φορτίο του ηλεκτρονίου κατ' απόλυτη τιμή). Παρατηρείται λοιπόν ότι από κάποια τάση αποκοπής  $|V_s|$  και μετά το ρεύμα μηδενίζεται. Πειραματικά καταγράφονται οι καμπύλες i(V) (Σχ. 3). Από αυτές προκύπτουν τα παρακάτω πειραματικά δεδομένα:



1. Το φωτορεύμα αυξάνει ανάλογα με τη φωτεινή ένταση, δηλαδή  $i \propto I.$  (Σχ. 3).

 Η μέγιστη ταχύτητα (κινητική ενέργεια K<sub>max</sub>) των εκπεμπόμενων ηλεκτρονίων δεν εξαρτάται από τη φωτεινή ένταση αλλά μόνο από τη συχνότητα ν της ακτινοβολίας.

**3.** Φωτορεύμα εμφανίζεται μόνο για συχνότητες ν μεγαλύτερες ή ίσες μιας ελάχιστης τιμής ν<sub>0</sub> (Σχ. 4), χαρακτηριστικής για κάθε μέταλλο.

4. Το φωτορεύμα εμφανίζεται σχεδόν ταυτόχρονα με την πρόσπτωση της φωτεινής δέσμης στο μέταλλο.

Πριν παρουσιάσουμε την ερμηνεία του φαινομένου από τον Α Einstein, θα παρουσιάσουμε την ερμηνεία (ή, μάλλον, απόπειρα ερμηνείας) στα πλαίσια της Κλασικής Φυσικής ώστε να αντιληφθούμε τα προβλήματα που προκύπτουν. Κατ' αρχήν λοιπόν, στα πλαίσια της ηλεκτρομαγνητικής θεωρίας, το προσπίπτον Η/Μ κύμα ασκεί δύναμη ( $\vec{\mathbf{F}} = -e\vec{\mathbf{E}}$ ) στα ηλεκτρόνια μεταβιβάζοντας τους ενέργεια, η οποία όταν ξεπεράσει

μια ορισμένη τιμή οδηγεί στην απόσπασή τους από το μέταλλο. Άρα το φαινόμενο κατ' αρχήν προβλέπεται. Στη συνέχεια, εφόσον  $I \propto E_{\text{max}}^2$ , αύξηση της I σημαίνει αύξηση του πλάτους  $E_{\text{max}}$  του πεδίου, συνεπώς και αύξηση του μέτρου F της  $\vec{\mathbf{F}}$ . Όμως, μεγαλύτερη δύναμη σημαίνει και μεγαλύτερος ρυθμός εξαγωγής (δηλαδή μεγαλύτερο φωτορεύμα *i*). Συνεπώς το πρώτο πειραματικό δεδομένο εξηγείται από τη κλασσική θεωρία. Για τα υπόλοιπα όμως υπάρχει ασυμφωνία με το πείραμα. Συγκεκριμένα, μεγαλύτερη I σημαίνει μεγα-



λύτερο E<sub>max</sub>, μεγαλύτερη F, μεγαλύτερη επιτάχυνση, συνεπώς και μεγαλύτερη ταχύτητα και κινητική ενέργεια (σε αντίθεση με το σημείο 2). Αντίθετα, η συχνότητα v της ακτινοβολίας δεν φαίνεται να παίζει κανένα ρόλο και, επακόλουθα, δεν προβλέπεται οριακή συχνότητα v<sub>o</sub> (σε αντίθεση με το σημείο

3). Τέλος, προβλέπεται ότι η μεταβίβαση της ενέργειας από το πεδίο στα ηλεκτρόνια είναι βαθμιαία και υπολογίζοντας την απαιτούμενη χρονική διάρκεια βρίσκουμε ότι θα πρέπει να κυμαίνεται από μερικά λεπτά έως και μερικές ώρες (σε αντίθεση με το σημείο 4).

Στα 1905 ο A Einstein δημοσίευσε την εργασία που εξηγεί τα παραπάνω δεδομένα. Από την εργασία αυτή διαβάζουμε ότι «...Σύμφωνα μέ την παραδοχή που προτείνεται εδώ, ή ενέργεια μιας φωτεινής ακτίνας, που εκπέμπεται από μία σημειακή πηγή, δεν είναι συνεχώς κατανεμημένη στο χώρο, αλλά αποτελείται από ένα πεπερασμένο αριθμό ενεργειακών κβάντων, που είναι τελείως εντοπισμένα στο χώρο, χωρίς να διαιρούνται και τα οποία μπορούν να παραχθούν και να απορροφηθούν μόνο ως ολόκληρες μονάδες...». Τα ενεργεια-

κά κβάντα του φωτός ονομάστηκαν έκτοτε φωτόνια. Πράγματι, με αυτήν την παραδοχή και με τη βοήθεια του Σχ. 5 το φαινόμενο επιδέχεται μια πολλή απλή και κομψή εξήγηση. Το ηλεκτρόνιο πριν απορροφήσει ένα φωτόνιο είναι δεσμευμένο στο μέταλλο λόγω των δυνάμεων που του ασκούνται. Μιλώντας στη γλώσσα της ενέργειας οι δυνάμεις αυτές αντιστοιχούν σε ένα πηγάδι δυναμικής ενέργειας στον πυθμένα του οποίου βρίσκεται εγκλωβισμένο το ηλεκτρόνιο. Το βάθος του πηγαδιού ονομάζεται έργο εξόδου και θα το συμβολίσουμε με w. Το έργο εξόδου είναι χαρακτηριστικό του κάθε μετάλλου. Για να απελευθερωθεί το ηλεκτρόνιο



θα πρέπει να του προσφέρουμε ενέργεια ίση ή μεγαλύτερη του w. Εάν του προσφέρουμε ενέργεια μεγαλύτερη από w τότε η επιπλέον ενέργεια θα μετατραπεί σε κινητική (προφανώς, εάν του προσφερθεί ενέργεια ίση με w τότε θα απελευθερωθεί με μηδενική κινητική ενέργεια). Τώρα, σύμφωνα με την παραπάνω παραδοχή, η ενέργεια του Η/Μ πεδίου προσφέρεται με τη μορφή φωτονίων, το καθένα εκ των οποίων είτε απορροφάται εξ' ολοκλήρου, είτε δεν απορροφάται καθόλου. Η δε ενέργειά του κατά Einstein (και κατά Planck πριν από αυτόν) είναι ίση με,

$$E_{\phi} = hv = \hbar\omega \tag{1}$$

όπου h η λεγόμενη (παγκόσμια) σταθερά του Planck και  $\hbar = h/2\pi = 1.054 \times 10^{-34}$  J·s. Εάν λοιπόν  $E_{\varphi} < w$  το φωτόνιο δεν απορροφάται καθόλου. Εάν όμως  $E_{\varphi} \ge w$  απορροφάται εξ' ολοκλήρου και η κινητική ενέργεια με την οποία παράγεται το ηλεκτρόνιο δίνεται από την ακόλουθη πολλή απλή σχέση:

$$K_{\max} = E_{\varphi} - w. \tag{2}$$

Η συχνότητα αποκοπής βρίσκεται από την (2) εάν θέσουμε  $K_{max}=0$  ( $E_{\varphi}=w$ ), οπότε και έχουμε ότι

$$v_0 = w/h \tag{3}$$

η δε  $K_{\rm max}$  συνδέεται με την τάση αποκοπής μέσω της σχέσης

$$K_{\max} = e|V_{\rm s}|. \tag{4}$$

Με βάση τη φωτονική θεωρία έχουμε τις παρακάτω προβλέψεις:

 Αύξηση της φωτεινής έντασης σημαίνει αύξηση του αριθμού των φωτονίων που προσπίπτουν στην επιφάνεια του μετάλλου στη μονάδα του χρόνου και συνεπώς αύξηση του αριθμού των ηλεκτρονίων που εξάγονται από αυτό (*i∝I*).

**2.** Η  $K_{\text{max}}$  δεν εξαρτάται από τη φωτεινή ένταση αλλά μόνο από τη συχνότητα ν.

**3.** Προβλέπεται ελάχιστη τιμή *v*<sub>0</sub>, που προσδιορίζεται μόνο από το έργο εξαγωγής *w* του εκάστοτε μετάλλου.

4. Η απορρόφηση ενός φωτονίου πραγματοποιείται "ακαριαία" (ακριβέστερα εντός <1 ns= $10^{-9}$  s).

Προφανώς, όλες οι προβλέψεις είναι σύμφωνες με τα πειραματικά δεδομένα. Να σημειώσουμε ότι η φωτεινή ένταση δίνεται στα πλαίσια της φωτονικής θεωρίας από τη σχέση

$$I = \frac{n(\hbar\omega)}{S \cdot \Delta t} \tag{5}$$

είναι ίση δηλαδή με την ενέργεια των  $n \ge 0$  φωτονίων που πέρασαν από κάποια επιφάνεια S στο χρονικό διάστημα  $\Delta t$ , διαιρεμένης με την S και το  $\Delta t$  (ενέργεια ανά μονάδα επιφάνειας και χρόνου). Ο αριθμός n είναι προφανώς ακέραιος. Εισάγεται εδώ για πρώτη φορά η έννοια της κβάντωσης ενός φυσικού μεγέθους (εδώ η ενέργεια της H/M ακτινοβολίας) μια και δεν είναι δυνατόν να έχουμε π.χ. 0.7ħω ή 1.2ħω. Στο φωτόνιο λοιπόν είναι συγκεντρωμένη όλη του η ενέργεια, όπως συμβαίνει και με τα σωματίδια και σε αντίθεση με τα τυπικά χαρακτηριστικά ενός H/M κύματος (απεντοπισμός ενέργειας και ορμής).

# Δεύτερο Παράδειγμα Σωματιδιακής Συμπεριφοράς Η/Μ Κυμάτων: Το Φαινόμενο Compton

Όπως είπαμε, τόσο η ενέργεια όσο και η ορμή ενός σωματιδίου είναι συγκεντρωμένες στο γώρο που καταλαμβάνει. Θα μπορούσε να πει κάποιος ότι η εισαγωγή της έννοιας του φωτονίου για την εξήγηση του φωτοηλεκτρικού φαινομένου μπορεί να θεωρηθεί ως «τέχνασμα» μέσω του οποίου εξηγούνται φαινομενολογικά τα πειραματικά δεδομένα. Η αποδοχή της φωτονικής θεωρίας απαιτούσε περαιτέρω επιβεβαίωση μέσω και άλλων πειραμάτων που θα υποστήριζαν ότι τα φωτόνια μπορούν πράγματι να θεωρηθούν ως σωματίδια, έχουν δηλαδή και ορμή, εκτός από ενέργεια. Στα 1919 ο Einstein έγραψε: «...εάν μια δέσμη ακτινοβολίας προκαλεί στο μόριο την εκπομπή ή απορρόφηση μιας ποσότητας ενέργειας hv, τότε μεταφέρεται στο μόριο ορμή μεγέθους hv/co κατά την κατεύθυνση της προσπίπτουσας δέσμης, όταν πρόκειται για απορρόφηση, και αντίθετα προς αυτήν όταν πρόκειται για εκπομπή....». Ακόμη και ο ίδιος που πρότεινε της ιδέα όμως δεν συνέγισε προς την κατεύθυνση αυτή. Η επιβεβαίωση της παραπάνω πρότασης ήλθε το 1923 από τα πειράματα του Compton που ασχολήθηκε με τη σκέδαση Η/Μ ακτινοβολίας (ακτίνες X) από ελεύθερα ηλεκτρόνια. Η πειραματική διάταξη φαίνεται σχηματικά στο Σχ. 6(α) και τα πειραματικά δεδομένα στο Σχ. 6(β). Ακτίνες Χ συχνότητας  $v_i$  (δηλαδή μήκους κύματος  $\lambda_i = c_0/v_i$ ) σκεδάζονται από ένα πολύ λεπτό φύλλο άνθρακα (το πηγάδι δυναμικής ενέργειας στο οποίο είναι εγκλωβισμένα τα ηλεκτρόνια του στόχου είναι πολύ μικρό σε σχέση με την ενέργεια ενός φωτονίου των ακτίνων Χ, με αποτέλεσμα αυτά να μπορούν να θεωρηθούν με πολλή καλή προσέγγιση «ελεύθερα»). Τα μετρούμενα μεγέθη είναι η συχνότητα ν<sub>(</sub>(ακριβέστερα, το μήκος κύματος  $\lambda_{f} = c_0/v_f$ ) και η ένταση της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας ως συνάρτηση της γωνίας θ μεταξύ αρχικής και τελικής διεύθυνσης της δέσμης (Σχ. 6(α)). Παρατηρείται λοιπόν ότι για κάθε γωνία θ, εκτός από την ακτινοβολία συχνότητας  $v_i$ , υπάρχει ένα σκεδαζόμενο κύμα μικρότερης συχνότητας  $v_i < v_i$  ( $\lambda_i > \lambda_i$ ), η τιμή της οποίας εξαρτάται από τη  $\theta$  (Σχ. 6(β)).



Δεν θα παραθέσουμε εδώ το σκεπτικό της Κλασικής Φυσικής. Όπως ίσως μαντεύετε, η ερμηνεία της είναι ανεπαρκής. Στην προσπάθεια ερμηνείας μέσω της φωτονικής θεωρίας οι P Debye και A Compton γράφουν το 1923: «...τα πειραματικά αποτελέσματα μπορούν να εξηγηθούν εάν θεωρήσουμε τα φωτόνια ως σημειακά σωματίδια ενέργειας hv και ορμής hv/c<sub>0</sub>, και εφαρμόσουμε την αρχή διατήρησης της σχετικιστικής ενέργειας και ορμής για το ζεύγος φωτονίου-ηλεκτρονίου...». Πράγματι, εάν θεωρήσει κανείς τη σκέδαση ως ένα πρόβλημα κρούσης μεταξύ δύο σωματιδίων (φωτονίου – ηλεκτρονίου – Σχ. 7) και εφαρμόσει τις αρχές διατήρησης ενέργειας και ορμής, αναπαράγει επακριβώς τα πειραματικά δεδομένα που υπακούουν στην σχέση,

$$\Delta \lambda \equiv \lambda_f - \lambda_i = \lambda_c (1 - \cos\theta), \qquad \lambda_c = \frac{h}{m_e c_o}$$
(6)

όπου,  $\lambda_c$  το λεγόμενο «μήκος κύματος Compton» και  $m_e$  η μάζα (ηρεμίας) του ηλεκτρονίου. Η απόδειξη της (6) είναι εύκολη, ακόμη και για μαθητές της θετικής κατεύθυνσης της Γ' Λυκείου, αρκεί όμως να χειριστού-

με το πρόβλημα σχετικιστικά. Π.χ., λαμβάνοντας υπ' όψη την ειδική θεωρία της σχετικότητας, μετά την κρούση η ενέργεια του (αρχικά ακίνητου) ηλεκτρονίου γράφεται ως  $E_{\rm e} = \sqrt{p_{\rm e}^2 c_{\rm o}^2 + m_{\rm e}^2 c_{\rm o}^4}$ .

Αυτήν την ενέργεια πρέπει να χρησιμοποιήσουμε αντί για την πιο γνώριμή μας, αμιγώς κινητική ενέργεια  $m_e v^2/2$  (= $p_e^2/(2m_e)$ ), που θα χρησιμοποιούσαμε εάν η ταχύτητα του σωματιδίου ήταν πολύ μικρότερη από  $c_0$ . Από την άλλη, τα φωτόνια «τρέχουν» με τη ταχύτητα του φωτός, οπότε πρέπει και για αυτά να χρησιμοποιήσουμε την παραπάνω σχέση. Όμως τα φωτόνια έχουν μηδενική



μάζα ηρεμίας και συνεπώς η σχέση αυτή στην περίπτωσή τους απλοποιείται και γράφεται ως  $E_{\varphi}=p_{\varphi}c_{o}$ . Από την τελευταία, η ορμή του φωτονίου εκφράζεται ως  $p_{\varphi}=hv/c_{o}$  όπως αναφέρθηκε και παραπάνω.

# 4. Ο Κυματοσωματιδιακός Δυϊσμός & η Υπόθεση de Broglie

Λαμβάνοντας υπ' όψη τα παραπάνω, μπορεί να αναρωτηθούμε: Τι είναι τελικά το φως; Κύμα ή ρεύμα σωματιδίων (φωτονίων); Και εάν αποτελείται από σωματίδια τι νόημα έχει να μιλάμε για καθαρά κυματικά χαρακτηριστικά όπως η συχνότητα ή το μήκος κύματος; Για να απαντήσουμε στα παραπάνω ερωτήματα θα πρέπει να θυμηθούμε ότι διαχωρισμός υπάρχει μόνον από τη σκοπιά της Κλασικής Φυσικής και της καθημερινής μας, μακροσκοπικής, εμπειρίας όπου κύματα και σωματίδια αντιμετωπίζονται ως «...δύο ξεχωριστές και αμοιβαία αποκλειόμενες φυσικές οντότητες...». Για να δούμε πως συνδυάζονται ο κυματικός και σωματιδιακός χαρακτήρας του φωτονίου θα ανατρέξουμε στο πείραμα συμβολής του Young το οποίο παρουσιάσαμε προηγουμένως χρησιμοποιώντας την κυματική «ταυτότητα» των Η/Μ κυμάτων. Εδώ θα δούμε τον τρόπο με τον οποίο το ίδιο τελικό, πειραματικό, αποτέλεσμα αναπαράγεται μέσω της σωματιδιακής φύ-

σης τους. Φανταστείτε λοιπόν μία φωτεινή πηγή της οποίας την ένταση ελαττώνουμε σε τέτοιο βαθμό ώστε σε κάθε στιγμή να εκπέμπει μόνο ένα φωτόνιο τη φορά. Το φωτόνιο περνά από μία από τις δύο σχισμές (χωρίς να γνωρίζουμε ποια είναι αυτή) και τελικά φτάνει μέχρι την οθόνη παρατήρησης όπου και ανιχνεύεται. Οι φωτο-



ανιχνευτές, που είναι κατανεμημένοι κατά μήκος (και πλάτος) της οθόνης παρατήρησης, ανιχνεύουν το κάθε φωτόνιο ένα-προς-ένα. Σε κάθε άφιξη φωτονίου προσθέτουν μία μονάδα στον αριθμό φωτονίων που έχουν ήδη ανιχνεύσει προηγουμένως. Στη αρχή του πειράματος τα λίγα αρχικά φωτόνια ανιχνεύονται σε θέσεις που φαίνονται να είναι τυχαίες (Σχ. 8). Λίγο αργότερα παρατηρούμε ότι σχηματίζεται σιγά-σιγά η γνωστή μας εικόνα συμβολής, παρουσιάζοντας όμως ακόμα μια κάποια «διακριτότητα». Όταν όμως μετρηθεί ένας τεράστιος αριθμός φωτονίων η «διακριτότητα» δίνει τη θέση της στην ομαλή εικόνα συμβολής που προβλέπεται από την Η/Μ θεωρία. Το πείραμα αυτό εκτελέστηκε για πρώτη φορά επιτυχώς από τον G I Taylor το 1909.

Τα συμπεράσματα που εξάγονται από πειράματα όπως το παραπάνω είναι ότι (ι) τα φωτόνια ανιχνεύονται ως σωματίδια, δηλαδή αλληλεπιδρούν ως μονάδες με την ύλη (π.χ. φωτο-ανιχνευτές) και (ιι) εμφανίζουν και κυματική φύση εφόσον παράγουν καθαρά κυματικά φαινόμενα, όπως η συμβολή και η περίθλαση, ειδικά όταν ο αριθμός τους είναι πολύ μεγάλος (μακροσκοπικός). Αυτός είναι ένα τρόπος να διατυπώσει κανείς την **αρχή του κυματοσωματιδιακού δυϊσμού** (wave-particle duality principle). Μπορούμε να πούμε ότι το τελικό πρότυπο συμβολής μας δίνει απλώς την πιθανότητα να ανιχνευτεί κάποια στιγμή ένα φωτόνιο σε κάποια συγκεκριμένη θέση της οθόνης. Με το θέμα αυτό όμως θα ασχοληθούμε λεπτομερέστερα παρακάτω. Προς το παρόν παρατηρούμε ότι οι διαδικασίες αλληλεπίδρασης ύλης-ακτινοβολίας στο μικρόκοσμο μας προτρέπουν να υιοθετήσουμε μια πιο ευέλικτη και ευμετάβλητη «εικόνα» για το φως, όπου τόσο η κυματική όσο και η σωματιδιακή φύση του είναι απαραίτητες και συμπληρωματικές. Μάλιστα, το 1923 ο L de Broglie προχώρησε ένα βήμα παραπέρα και έγραψε: «Εφόσον τα φωτόνια εμφανίζουν τόσο κυματικά όσο και σωματιδιακά χαρακτηριστικά, ίσως όλες οι μορφές της ύλης έχουν, εκτός από σωματιδιακές, και κυματικές ιδιότητες». Η υπόθεση de Broglie επεκτείνει λοιπόν την αρχή του κυματοσωματιδιακού δυϊσμού σε όλα τα σωματίδια και δεν την περιορίζει μόνο στα φωτόνια (με τη διαφορά ότι τα σωματίδια έχουν μάζα (ηρεμίας), σε αντίθεση με τα φωτόνια). Η επέκταση αυτή συνεπάγεται ότι οι σχέσεις,

$$E = hv = \hbar\omega \tag{7a}$$

$$p = h/\lambda = \hbar k \tag{7\beta}$$

ισχύουν για όλα τα σωματίδια και συνδέουν την (εντοπισμένη) ενέργεια και ορμή κάθε σωματιδίου με τα καθαρά κυματικά χαρακτηριστικά συχνότητα και μήκος κύματος. Έκτοτε, υιοθετήθηκε η ιδέα ότι κάθε σωματίδιο συνδέεται με ένα κύμα. Όχι όμως ένα Η/Μ κύμα, που αφορά μόνο με τα φωτόνια, αλλά ένα κύμα ύλης, όπως ονομάστηκε. Όπως και τα μηχανικά κύματα (που έχουν ανάγκη μέσου διάδοσης) καθώς και τα Η/Μ κύματα, τα κύματα ύλης περιγράφονται από μία συνάρτηση, την λεγόμενη κυματοσυνάρτηση για την οποία θα μιλήσουμε σε λίγο.

# 5. Παράδειγμα Κυματικής Συμπεριφοράς Σωματιδίων: Περίθλαση Ηλεκτρονίων

Εντυπωσιάζει το γεγονός ότι ο de Broglie διατύπωσε την υπόθεση χωρίς να υπάρχουν τη στιγμή εκείνη πειραματικά δεδομένα που να τη στηρίζουν. Για να επαληθευτεί η υπόθεση έπρεπε να παρατηρηθούν καθαρά κυματικά φαινόμενα χρησιμοποιώντας όμως σωματίδια αντί για φως. Η υπόθεση επαληθεύτηκε για πρώτη φορά από τα δεδομένα του πειράματος Davisson-Germer οι οποίοι (μάλλον τυχαία) πρόσεξαν ότι όταν ηλεκτρόνια προσπέσουν σ' έναν κρύσταλλο Ni παρατηρείται περίθλαση Bragg. Σχηματικό διάγραμμα



της διάταξης φαίνεται στο Σχ. 9(α) και τα πειραματικά δεδομένα στο Σχ. 9(β). Ηλεκτρόνια πρακτικά μηδενικής κινητικής ενέργειας παράγονται από ένα θερμαινόμενο σύρμα (θερμοηλεκτρικό φαινόμενο) και επιταχύνονται μέσω της τάσης V που εφαρμόζεται σε ένα ηλεκτρόδιο. Η κινητική ενέργειά τους μετά το ηλεκτρόδιο είναι ίση με eV. Η δέσμη ηλεκτρονίων προσπίπτει στη συνέχεια σε ένα κρύσταλλο Ni και σκεδάζεται. Στο πείραμα μετριέται ο αριθμός (ρεύμα) των ηλεκτρονίων ως συνάρτηση της γωνία φ. Παρατηρείται ότι, εκτός από το κύριο μέγιστο (φ=0) υπάρχουν και άλλα, αλλά σε συγκεκριμένες μόνο γωνίες. Το Σχ. 10 σε συνδυασμό με την υπόθεση de Broglie δίνει την εξήγηση του φαινομένου. Το σχήμα είναι ολόιδιο με αυτό που συναντήσαμε όταν μιλήσαμε για την περίθλαση Bragg. Η μετρούμενη γωνία φ συνδέεται με τη γωνία Bragg μέσω της σχέσης  $2\theta+\varphi=180^\circ$ . Ακόμη, από πειράματα ακτίνων X (φως) ήταν ήδη γνωστό ότι η πλευρά α του κρυστάλλου είναι ίση με a=0.215 nm και ότι η γωνία  $ω=25^\circ$ . Συνεπώς, η απόσταση μεταξύ διαδοχικών ανακλαστικών επιπέδων, είναι  $\Lambda=asin\omega=0.091$  nm. Οι Davisson και Germer βρήκαν πειραματικά ότι, για ηλεκτρόνια κινητικής ενέργειας 54 eVolts (1 eVolt =



1.602×10<sup>-19</sup> J), το πρώτο μέγιστο περίθλασης (*n*=1) εμφανίζεται στη γωνία  $\varphi$ =50°. Συνδυάζοντας τα παραπάνω και χρησιμοποιώντας τον νόμο του Bragg (2Λsin $\theta_n$ =*n*λ), βρίσκουμε για τις παραπάνω συνθήκες το μήκος κύματος de Broglie ίσο με λ=0.165 nm. Συμφωνεί αυτό το πειραματικό δεδομένο με την υπόθεση de Broglie; Η απάντηση είναι ναι. Συγκεκριμένα, η κινητική ενέργεια *K*(=*E*) των (μη-σχετικιστικών) ηλεκτρονίων γράφεται,

$$K = \frac{1}{2}m_e \upsilon^2 = \frac{p_e^2}{2m_e} = \frac{h^2}{2m_e \lambda^2}$$
(8)

οπότε λύνοντας ως προς λ έχουμε,

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_eK}} \,. \tag{9}$$

Αντικαθιστώντας τις τιμές των σταθερών και της κινητικής ενέργειας που αναφέρθηκε παραπάνω βρίσκουμε







Ηλεκτρόνια ~ίδιου μήκους κύματος

ότι λ=0.167 nm! Οι Davisson και Germer επανέλαβαν το πείραμα βάλλοντας με ένα ηλεκτρόνιο τη φορά (όπως και στο πείραμα συμβολής του Young με φωτόνια) και κατέγραψαν τα ίδια αποτελέσματα. Έκτοτε, παρατηρήθηκε περίθλαση ή συμβολή και με νετρόνια, άτομα He και μόρια C<sub>60</sub>. Για τον χαρακτηρισμό υλικών και βιολογικών μορίων, η περίθλαση Bragg χρησιμοποιείται πλέον τόσο με ακτίνες X όσο και με ηλεκτρόνια μια και, εάν προσπέσουν επί του ιδίου στόχου και έχουν το ίδιο μήκος κύματος, παράγουν τον ίδιο σχηματισμό περίθλασης (Σχ. 11). Επίσης, ηλεκτρόνια πολύ μικρού μήκους κύματος de Broglie μπορούν (ι) να παραχθούν σχετικά εύκολα και (ιι) οι δέσμες τους να καθοδηγηθούν και να εστιαστούν από ηλεκτροστατικούς και μαγνητοστατικούς φακούς (όπως και το φως από φακούς κατασκευασμένους από διαφανή υλικά). Για το λόγο αυτό τα *ηλεκτρονικά μικροσκόπια* έχουν διακριτική ικανότητα της τάξης των 0.01-10 nm, δηλαδή πολύ μεγαλύτερη από τα συνήθη σύνθετα μικροσκόπια που λειτουργούν με φως (όπου περιορίζεται στα ~1000 nm).

# 6. Συνέπειες του Κυματοσωματιδιακού Δυϊσμού: Αρχή της Απροσδιοριστίας

Όπως είπαμε παραπάνω, η υπόθεση de Broglie και η πειραματική επιβεβαίωσή της οδήγησε στην ιδέα ότι κάθε σωματίδιο συνδέεται και μπορεί να περιγραφεί από ένα κύμα ύλης. Εκείνη την εποχή η φύση των κυμάτων αυτών ήταν ακόμη ασαφής και, το χειρότερο, δημιούργησε, αρχικά, επιπλέον ερωτήματα. Το κυριότερο είναι το ακόλουθο: Τα σωματίδια είναι περιορισμένα στο χώρο ενώ τα κύματα εκτεταμένα. Ειδικά, ένα αρμονικό κύμα (π.χ. ένα επίπεδο μονοχρωματικό κύμα) της μορφής  $y(z,t)=y_{\max}\sin(\omega t - kx)$  εκτείνεται από το  $-\infty$ . έως το  $+\infty$  (Σχ. 12(α)). Πως ένα τέτοιο κύμα, μίας μόνο συγνότητας, μπορεί να περιγράψει ένα εντοπισμένο σωματίδιο; Η απάντηση δίνεται, εν μέρει, από την ίδια τη Φύση στην οποία δεν συναντούμε αρμονικά κύματα (που αποτελούν εξιδανίκευση και απλούστευση για την ευκολότερη μελέτη κυματικών φαινομένων) αλλά τις λεγόμενες κυματομάδες. Οι τελευταίες μπορούν να παραχθούν από



την υπέρθεση πολλών αρμονικών κυμάτων με διαφορετικές συχνότητες (άρα και μήκη κύματος λ, κυματάριθμους k και επακόλουθα και ορμές p). Επίσης, τα επιμέρους κύματα μπορούν να έχουν και διαφορετικό πλάτος το καθένα. Η υπέρθεση (άθροισμα ή ολοκλήρωμα για συνεχή πεδία τιμών) έχει ως αποτέλεσμα τον περιορισμό της χωρικής έκτασης της συνιστάμενης κυματομορφής. Παράδειγμα αυτής της συμπεριφοράς βλέπουμε στα Σχ. 12(β)-(ε). Παρατηρούμε ότι όσο περισσότερα κύματα διαφορετικών κυματάριθμων k προσθέτουμε, τόσο περισσότερο στενεύουμε τη χωρική έκταση της κυματομορφής, που διαδίδεται κατά τη διεύθυνση x. Διατυπώνοντας λίγο διαφορετικά, όσο αυξάνουμε το εύρος κυματάριθμων Δk τόσο στενεύουμε το χωρικό εύρος Δx (και αντίστροφα). Θυμηθείτε ότι κάτι ανάλογο είδαμε και στην περίθλαση: όσο μικραίνουμε τις διαστάσεις της οπής στη οποία προσπίπτει ένα κύμα τόσο απλώνει χωρικά το πρότυπο περίθλασης (και το αντίστροφο). Θέτοντας την παραπάνω συμπεριφορά σε μαθηματική μορφή, η κυματική προβλέπει ότι το ζεύγος Δk και Δx ικανοποιεί τη σχέση Δk·Δx≥1. Όμως, από την υπόθεση de Broglie έχουμε ότι Δk=Δp<sub>x</sub>/h οπότε και η σχέση αυτή γράφεται ως,

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \ge \hbar \tag{10}$$

και συνοψίζει τη Αρχή της Απροσδιοριστίας (ή Αβεβαιότητας) του Heisenberg (1927). Διατυπώνοντάς την με λόγια: Η θέση x και η ορμή  $p_x$  ενός σωματιδίου δεν μπορούν να είναι γνωστά με οποιαδήποτε ακρίβεια. Οσο καλύτερα γνωρίζουμε το ένα μέγεθος τόσο μεγαλύτερη είναι η αβεβαιότητά μας για το άλλο. Η αρχή του Heisenberg δεν εκφράζει κάποια πειραματική αδυναμία ταυτόχρονης μέτρησης αλλά μια εγγενή (από τη φύση της) αδυναμία ταυτόχρονης ύπαρξης συγκεκριμένης θέση και ορμής στο μικρόκοσμο. Προκύπτει από την κυματική συμπεριφορά των σωματιδίων, διότι για τα κύματα είναι αδύνατος ο ταυτόχρονος περιορισμός των Δx και Δk πέραν ενός κατώτατου ορίου. Τι γίνεται στις δύο ή τρεις διαστάσεις του χώρου; Στην περίπτωση αυτή ισχύει επίσης ότι Δy·Δp<sub>y</sub>≥ħ, και Δz·Δp<sub>z</sub>≥ħ, ενώ δεν τίθεται περιορισμός για δύο διαφορετικές διευθύνσεις, π.χ. Δy·Δp<sub>x</sub>≥0. Τέλος, ακολουθώντας έναν ανάλογο συλλογισμό, αλλά στο χρόνο και όχι στο χώρο, η αρχή της απροσδιοριστίας προβλέπει επίσης ότι,

# $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar \tag{11}$

όπου Δ*E* είναι η αβεβαιότητα με την οποία είναι γνωστή η ενέργεια ενός συστήματος και Δ*t* ο χρόνος εξέλιξής του (δηλαδή ο χρόνος που χρειάζεται για να παρατηρηθεί κάποια αισθητή μεταβολή στις ιδιότητές του). Με αυτά υπ' όψη μπορούμε να πούμε ότι όσο πιο αργά μεταβάλλεται ένα σύστημα (Δ*t* μεγάλο) τόσο πιο καλά καθορισμένη είναι η ενέργειά του (Δ*E* μικρό) και αντίστροφα. Πχ. είναι γνωστό ότι άτομα που είναι διεγερμένα σε κάποια κατάσταση, αποδιεγείρονται μετά από κάποιο χρονικό διάστημα (χρόνος ζωής) που αποτελεί στην περίπτωση αυτήν την «απροσδιοριστία χρόνου» Δ*t*. Αυτό συνεπάγεται ότι η ενέργεια της διεγερμένης κατάστασης θα είναι γνωστή με αβεβαιότητα Δ*E* ≥ħ/Δ*t*. Μόνο για την ενεργειακά χαμηλότερη κατάσταση ισχύει ότι Δ*E*=0 λόγω του ότι το σύστημα, εάν δεν διαταραχθεί, θα παραμείνει εκεί επ' άπειρον (Δ*t*→∞).

Συνοψίζοντας, αυτό που εκφράζει η αρχή της απροσδιοριστίας (σχέση (10)) είναι ότι στο μικρόκοσμο η σωματιδιακή φύση του φωτός και η κυματική φύση της ύλης δεν μπορεί να αγνοηθεί, με συνέπεια η διαταραχή που εισάγεται από μια διαδικασία μέτρησης να μην μπορεί να γίνει αυθαίρετα μικρή (αντίθετα προς την κλασσική αντίληψη). Μερικά παραδείγματα εφαρμογής της θα δοθούν υπό τη μορφή ασκήσεων ενώ άλλα θα συναντήσουμε παρακάτω, όταν θα προσπαθήσουμε να εξηγήσουμε φαινόμενα του μικρόκοσμου που είναι αντίθετα με την καθημερινή μας εμπειρία.

# 7. Η Εξίσωση Schrödinger & ο Παράξενος αλλά & Συναρπαστικός Κβαντικός Μικρόκοσμος

## 7.1 Η εξίσωση Schrödinger & η Κυματοσυνάρτηση

Στις σημειώσεις του, που αφορούν τις εξελίξεις στη Φυσική περί τα 1926, ο F Bloch αναφέρει ότι κάποια στιγμή ο E Schrödinger έδωσε μία ομιλία στους συναδέλφους του όπου παρουσίασε λεπτομερώς την υπόθεση de Broglie. Στο τέλος της ομιλίας ο P Debye σχολίασε ότι αυτός ο τρόπος περιγραφής των σωματιδίων του μικρόκοσμου με κύματα του φαινόταν κάπως παιδιάστικος. Αυτός, ως μαθητής του Sommerfeld, είχε μάθει ότι για να μιλήσει κανείς σωστά για τα κύματα πρέπει να έχει μια κυματική εξίσωση. Ύστερα από μερικές εβδομάδες ο Schrödinger έδωσε άλλη μία ομιλία, την οποία άρχισε ως εξής: «Ο συνάδελφος Debye είπε ότι πρέπει να έχει κανείς μια κυματική εξίσωση. Ε λοιπόν, βρήκα μία». Παρουσίασε λοιπόν τη φερώνυμη εξίσωση, που, στη μία διάσταση (x), έχει την ακόλουθη μορφή:

$$i\hbar \frac{d\Psi(x,t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(x,t)}{dx^2} + U(x,t)\Psi(x,t).$$
(12)

Παρατηρούμε ότι είναι μια διαφορική εξίσωση της οποίας λύση είναι η λεγόμενη κυματοσυνάρτηση Ψ, που εξαρτάται από τη θέση και το χρόνο. Στη (12) με U(x,t) συμβολίζουμε τη δυναμική ενέργεια του σωματιδίου που περιγράφει τις δυνάμεις που του ασκούνται και η οποία είναι επίσης, γενικά, συνάρτηση τόσο του χώρου όσο και του χρόνου. Εάν η U είναι ανεξάρτητη του χρόνου, η (12) μπαίνει στη μορφή,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$
(13)

όπου *E* η συνολική (μηχανική) ενέργεια του σωματιδίου. Προφανώς, εδώ δεν θα ασχοληθούμε με τη λύση είτε της (12) είτε της (13) αλλά θα δώσουμε έτοιμα κάποια αποτελέσματα που θα μας χρειαστούν παρακάτω. Ακόμα και όταν η *U* είναι ανεξάρτητη του χρόνου, οι κυματοσυναρτήσεις  $\Psi$  της (12) και  $\psi$  της (13) δεν είναι ίδιες. Συνδέονται μέσω της σχέσης  $\Psi(x,t)=\psi(x)\cdot e^{-iEt/\hbar}$  και συνεπώς ισχύει ότι  $|\Psi|=|\psi|$ . Από τη (12) καταλαβαίνουμε ότι η  $\Psi$  είναι οπωσδήποτε μιγαδική ενώ η  $\psi$  μπορεί να είναι είτε μιγαδική είτε πραγματική συνάρτηση. Ακόμα, η  $\psi$  είναι προφανώς ανεξάρτητη του χρόνου όπως και η *U*. Στην περίπτωση αυτή, η κατάσταση του σωματιδίου που περιγράφει η  $\psi$  ονομάζεται στάσιμη κατάσταση. Τα προβλήματα που εξετάζουμε εδώ αφορούν στάσιμες καταστάσεις.

Δεν γνωρίζουμε (αλλά μπορούμε να υποθέσουμε) πως ο Schrödinger κατέληξε στις εξισώσεις αυτές. Με την κυματική εξίσωση που περιγράφει π.χ. τα Η/Μ κύματα έχουν πράγματι ομοιότητες αλλά και χτυπητές διαφορές. Ενώ όμως η κυματική εξίσωση των Η/Μ κυμάτων (που δεν χρειάζεται να αναφέρουμε εδώ) εξάγεται από τις εξισώσεις του Maxwell (ηλεκτρομαγνητισμού) η εξίσωση Schrödinger δεν αποδεικνύεται. Είναι η θεμελιώδης εξίσωση της *Κβαντομηχανικής* και η «αλήθεια» της ελέγχεται από τη δυνατότητα να κάνει προβλέψεις σε συμφωνία με το πείραμα. Μας λέει δηλαδή το «πώς» λειτουργεί η Φύση αλλά όχι και το «γιατί».
Η εξίσωση Schrödinger μας δίνει λοιπόν την κυματοσυνάρτηση, μέσω της οποίας μπορούμε να περιγράψουμε την κατάσταση ενός σωματιδίου (ή συστήματος σωματιδίων). Αρχικά, η αντίδραση των Φυσικών απέναντι στη Ψ ήταν διστακτική και ο κυριότερος λόγος είναι ο ακόλουθος: Ποια μπορεί να είναι η φυσική σημασία μιας μιγαδικής κυματοσυνάρτησης μέσω της οποίας προσπαθούμε να περιγράψουμε ένα πραγματικό σωματίδιο; Απάντηση στο ερώτημα δόθηκε λίγο αργότερα από τον M Born. Η ίδια η Ψ ή η ψ λοιπόν δεν έχουν φυσική σημασία. Τα μεγέθη που έχουν σημασία είναι οι  $|\Psi|^2$  και  $|\psi|^2$  που ονομάζουμε πυκνότητες πιθανότητας (Υπενθύμιση: Εάν z ένας μιγαδικός αριθμός και z<sup>\*</sup> ο συζυγής του, τότε  $|z|^2=z\cdot z^*$ ). Συγκεκριμένα, η ποσότητα  $P(x,t)=|\Psi(x,t)|^2 dx$  αποτελεί την πιθανότητα να βρίσκεται το σωματίδιο στο διάστημα μεταξύ x και x+dx τη χρονική στιγμή t. Αντίστοιχα, η  $P(x)=|\psi(x)|^2 dx$  μας δίνει απλώς την πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο στο διάστημα μεταξύ x και x+dx (η οποία εφόσον δεν εξαρτάται από τον χρόνο παραμένει συνεχώς η ίδια). Στη μονοδιάστατη περίπτωση, ένα σωματίδιο μπορεί να βρεθεί στο διάστημα θέσεων x από το -∞ έως το +∞. Η συνολική πιθανότητα να το βρούμε κάπου σε αυτό το διάστημα είναι προφανώς μονάδα. Συνεπώς, θα πρέπει να ισχύει,

$$P_{tot} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = 1 \tag{14}$$

(Ερώτηση: Ποιες είναι οι διαστάσεις της  $|\psi|$ ;). Εάν ενδιαφερόμαστε για την πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο σε κάποιο πεπερασμένο διάστημα  $[\alpha,\beta]$ , τότε τα όρια του ολοκληρώματος ±∞ της (14) πρέπει να αντικατασταθούν από τα α και β. Εφόσον η  $\psi$  σχετίζεται με πιθανότητες, θα πρέπει να υπακούει και σε μια σειρά άλλων συνθηκών. Π.χ. θα πρέπει να είναι πεπερασμένη (η πιθανότητα δεν απειρίζεται) και μονότιμη (η πιθανότητα δεν μπορεί να έχει πάνω από μία τιμή για κάθε θέση). Θα πρέπει επίσης να είναι παντού ομαλή, τόσο η ίδια όσο και η πρώτη της παράγωγος, και να μην έχει ασυνέχειες («άλματα» πιθανότητας).

Μέσω της πιθανότητας P(x) μπορούμε να βρούμε τη μέση τιμή οποιουδήποτε μεγέθους μας ενδιαφέρει. Π.χ. η μέση τιμή της θέσης x του σωματιδίου γράφεται,

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x)|^2 dx$$
(15)

και αντίστοιχα για οποιοδήποτε άλλο μέγεθος f(x).

# 7.2 Δέσμιες Καταστάσεις & Καταστάσεις του Συνεχούς

Θεωρήστε την καμπύλη της δυναμικής ενέργειας του Σχ. 13 (που έχει τη μορφή ενός πηγαδιού). Από τη λύση της (13) για την καμπύλη αυτή ή παρόμοιες προκύπτουν τα ακόλουθα γενικά συμπεράσματα: (1) Για  $E < U(\infty)$  το σωματίδιο κινείται σε πεπερασμένο χώρο (φραγμένη κίνηση) και οι στάσιμες καταστάσεις του αντιστοιχούν σε ορισμένες διάκριτες τιμές ενέργειας  $E_1$ ,  $E_2$ ,  $E_3$ ,... (διάκριτο φάσμα ενεργειών, κβάντωση ενέργειας). Και τούτο διότι μόνο για αυτές τις τιμές η λύση της (13) παράγει φυσικά αποδεκτές κυματοσυναρτήσεις  $\psi_1$ ,  $\psi_2$ ,  $\psi_3$ ..., αυτές δηλαδή που προβλέπουν τη φραγμένη κίνηση του σωματιδίου (δέσμιες καταστάσεις) και δεν απειρίζονται. Η ύπαρξη διάκριτων ενεργειακών τιμών για ένα πρόβλημα όπως αυτό δεν προβλέπεται από την Κλασσική Μηχανική όπου το επιτρεπτό φάσμα ενεργειών στη φραγμένη περιοχή είναι συνεχές, αρκεί να ισχύει ότι  $E \ge U_{min}$ (διότι εάν ίσχυε  $E < U_{min}$ , και εφόσον E = U + K, η κινητική ενέργεια θα ήταν αρνητική, K < 0!). (2) Σύμφωνα με την Κλασσική Μηχανική και για δεδομένη ενέργεια E, επιτρέπεται στο σωματίδιο να κινείται μόνο στις περιοχές του χώρου όπου η κινητική ενέργεια  $K = E - U \ge 0$ . Αντίθετα, στο Σχ. 13 βλέπουμε ότι οι πυκνότητες πιθανότητας  $|\psi_i|^2$ , δεν είναι εν γένει μηδενικές στις κλασσικά απαγορευμένες περιοχές. Οι τιμές τους όμως μειώνονται εκθετικά



καθώς προχωρούμε βαθύτερα στις περιοχές αυτές. Η συμπεριφορά αυτή οφείλεται στον κυματικό χαρακτήρα της κίνησης του σωματιδίου και εξηγείται μέσω της αρχής της Απροσδιοριστίας. Εάν λοιπόν πραγματοποιήσουμε μία μέτρηση μέσω της οποίας προσπαθήσουμε να εντοπίσουμε το σωματίδιο σε κλασικά απαγορευμένη περιοχή, θα το διαταράξουμε σε τέτοιο βαθμό ώστε αυτό να βρεθεί σε κλασσικά επιτρεπτή περιοχή του χώρου.

(3) Η χαμηλότερη δυνατή διάκριτη ενέργεια (που αντιστοιχεί στη λεγόμενη θεμελιώδη κατάσταση) είναι πάντα μεγαλύτερη από την ελάχιστη δυναμική,  $E_1 > U_{min}$ . Τούτο διότι εάν το σωματίδιο είχε ενέργεια  $E=U_{min}$ , η κινητική του ενέργεια θα ήταν μηδενική - θα παρέμενε ακίνητο. Επακόλουθα, τόσο η θέση του ( $x=x_0 - \Sigma \chi$ . 13) όσο και η ταχύτητά του, συνεπώς και η ορμή του ( $p_x=0$ ), θα ήταν γνωστές με μηδενικές αβεβαιότητες,  $\Delta x=0$  και  $\Delta p_x=0$ . Άρα θα είχαμε  $\Delta x \Delta p_x=0$ , με αποτέλεσμα την παραβίαση της αρχής της Απροσδιοριστίας (γεγονός που δεν συμβαίνει). Συμπερασματικά, τα κβαντικά σωματίδια δεν πέφτουν ποτέ στον πυθμένα του πηγαδιού και δεν είναι ποτέ ακίνητα. Η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης ονομάζεται και ενέργεια μηδενικού σημείου.

(4) Για  $E>U(\infty)$  το σωματίδιο δεν περιορίζεται σε πεπερασμένο χώρο (αν και κλασικά απαγορευμένες περιοχές του χώρου μπορεί να υπάρχουν και σε αυτήν την περίπτωση). Η κίνησή του είναι λοιπόν δεν είναι φραγμένη, το σωματίδιο μπορεί να διαφύγει και οι στάσιμες καταστάσεις του έχουν συνεχές φάσμα ενεργειών (καταστάσεις του συνεχούς), όπως και στην Κλασσική Μηχανική.

#### 7.3 Ανακλαστικότητα και Διαπερατότητα σε ένα Σκαλοπάτι Δυναμικού

Θεωρήστε το φράγμα δυναμικού με τη μορφή σκαλοπατιού του Σχ. 14, όπου η δυναμική ενέργεια είναι μηδενική για  $x < x_0$  και έχει μια σταθερή τιμή  $U_{max} > 0$  για  $x \ge x_0$ . Θεωρήστε επίσης ότι ένα σωματίδιο μάζας m πλησιάζει το φράγμα από τα αριστερά στο σχήμα. Η συμπεριφορά του (και η κυματοσυνάρτησή του) εξαρτάται από την τιμή της ενέργειάς του  $E \ge 0$  σε σχέση με το ύψος του φράγματος: (a) Εάν  $E < U_{max}$  (Σχ. 14(a)), το σωμάτιο θα ανακλαστεί οπωσδήποτε, όπως άλλωστε προβλέπεται και από την Κλασσική Μηχανική. Κβαντομηχανικά προβλέπεται συντελεστής ανακλαστικότητας (πιθανότητα ανάκλασης) R=1, παρ' όλο που, όπως βλέπουμε, υπάρχει κάποια μικρή πιθανότητα διείσδυσης, για μικρό χρονικό διάστημα, στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή ( $x \ge x_o$ ).

(β) Για  $E \ge U_{\text{max}}$  (Σχ. 14(β)), συναντούμε ένα μάλλον πιο ενδιαφέρον φαινόμενο, με την έννοια ότι δεν προβλέπεται από την Κλασσική Μηχανική και δεν το συναντούμε στην καθημερινή μας μακροσκοπική εμπειρία. Και αυτό γιατί κλασσικά αναμένουμε ότι το σωματίδιο θα περάσει οπωσδήποτε το φράγμα και θα συνεχίσει την πορεία του προς τα δεξιά. Το μόνο που θα διαφοροποιηθεί είναι η ταχύτητά του, εφόσον για  $x < x_0$  η κινητική του ενέργεια είναι K = E (U=0) ενώ για  $x \ge x_0$  έχουμε  $K = E - U_{max}$ . Κβαντομηχανικά, μπορούμε να υπολογίσουμε τις πιθανότητες ανάκλασης και διέλευσης του σωματιδίου που εκφράζονται μέσω των συντελεστών ανάκλασης και διέλευσης R και T. Προφανώς, οι δύο συντελεστές συνδέονται μέσω της σχέσης

$$R+T=1$$
 (16)

(το σωματίδιο ή θα διέλθει ή θα ανακλαστεί). Κβαντικά λοιπόν, προβλέπεται ότι ο συντελεστής ανάκλασης δίνεται από τη σχέση,

$$R = \frac{(k_{\rm I} - k_{\rm II})^2}{(k_{\rm I} + k_{\rm II})^2}, \qquad k_{\rm I} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \qquad k_{\rm II} = \frac{\sqrt{2m(E - U_{\rm max})}}{\hbar}$$
(17)

1

2

0

δηλαδή δεν είναι μηδενικός. Υπάρχει συνεπώς πιθανότητα το σωματίδιο να ανακλαστεί, ακόμη και όταν ενεργειακά του επιτρέπεται να διέλθει. Στο Σχ. 15 σχεδιάζεται η σχέση (17) ως συνάρτηση της Ε. Παρατηρούμε ότι το φαινόμενο είναι τόσο εντονότερο όσο η ενέργεια του σωματιδίου πλησιάζει (εκ των άνω) το ύψος του φράγματος  $U_{\text{max}}$ .

#### 7.4 Το Φαινόμενο & το Μικροσκόπιο Σήραγγας

1

 $U_{\rm max}$ Θεωρήστε τώρα το φράγμα δυναμικού του Σχ. 16, όπου η δυναμική ενέργεια είναι μηδενική παντού εκτός από μία περιοχή μήκους L όπου έχει τη σταθερή τιμή Umax>0. Υποθέτουμε ότι ένα σωματίδιο μάζας m και ενέργειας  $E < U_{\text{max}}$  πλησιάζει το φράγμα από τα αριστερά στο σχήμα. Όπως συζητήσαμε και παραπάνω, η κλασσική πρόβλεψη είναι ότι θα ανακλαστεί οπωσδήποτε προς τα πίσω. Κβαντικά όμως προβλέπεται και μια μικρή πιθανότητα διείσδυσης στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή (όπως φαίνεται και στο Σχ. 14(α)). Η πιθανότητα αυτή μειώνεται εκθετικά και σε μεγάλες αποστάσεις διείσδυσης είναι πρακτικά αμελητέα. Εάν

E

Σχήμα 15.



όμως το μήκος του φράγματος δεν είναι πολύ μεγάλο, η πυκνότητα πιθανότητας δεν προλαβαίνει να «σβήσει» τελείως και στην έξοδο από την κλασσικά απαγορευμένη περιοχή έχει μη-μηδενική τιμή. Αυτήν την τιμή θα συνεχίσει να την έχει και στα δεξιά του φράγματος. Συνεπώς, θα υπάρχει μη-μηδενική πιθανότητα να βρεθεί εκεί το σωματίδιο έχοντας διαπεράσει το φράγμα. Για ένα σχετικά



ευρύ και ψηλό φράγμα ο συντελεστής διέλευσης δίνεται προσεγγιστικά από τη σχέση,

$$T \sim e^{-2\frac{\sqrt{2m(U_{\max}-E)}}{\hbar}L}.$$
(18)

Από τη (18) αντιλαμβανόμαστε ότι το φαινόμενο σήραγγας παρουσιάζει τεράστια (εκθετική) ευαισθησία στο μήκος του φράγματος L, τη μάζα του σωματιδίου m και τη διαφορά ενέργειας U<sub>max</sub>-E. Και τα τρία αυτά

μεγέθη θα πρέπει να είναι μικρά ώστε ο συντελεστής *T* να μην είναι αμελητέος. Το μέτρο αυτής της «μικρότητας» (μικρόκοσμος) είναι η παγκόσμια σταθερά του Planck, *ħ*. Επακόλουθα, κάθε προσπάθεια να επιχειρήσει κάποιος φοιτητής/τρια να διαπεράσει έναν τοίχο δεν συνιστάται! Στον μικρόκοσμο όμως το φαινόμενο σήραγγας είναι σύνηθες. Π.χ εξηγεί πλήρως την πυρηνική διάσπαση μέσω της εκπομπής σωματιδίων *α* (πυρήνες He) και το δεσμό Υδρογόνου στα μόρια. Έχει ακόμα και πάρα πολλές πρακτικές εφαρμογές. Μία τέτοια εφαρμο-



Σχήμα 17.

γή είναι και το **μικροσκόπιο σήραγγας** (Binnig και Rohrer, Βραβείο Nobel 1986), η αρχή λειτουργίας του οποίου φαίνεται στο Σχ. 17. Τα ηλεκτρόνια ενός υλικού είναι εγκλωβισμένα σε αυτό (πηγάδι δυναμικής ενέργειας βάθους ίσου με το έργο εξόδου). Πλησιάζοντας μια μεταλλική ακίδα στην επιφάνεια του υλικού, ο

χώρος μεταξύ αυτού και της ακίδας δημιουργεί ένα φράγμα δυναμικής ενέργειας (επιφάνεια-κενό μήκους L-επιφάνεια). Η πιθανότητα να διαπεράσουν τα ηλεκτρόνια το φράγμα (και συνεπώς και το ανιχνευόμενο ρεύμα) εξαρτάται εκθετικά από την απόσταση ακίδας-επιφάνειας. Σαρώνοντας την ακίδα κατά μήκος της επιφάνειας, η μεταβολή του ρεύματος αποτυπώνει και "χαρτογραφεί" την επιφάνεια αυτή. Με την τεχνική αυτή καταγράφηκε η εικόνα του Σχ. 18, όπου βλέπουμε 48 άτομα σιδή-



ρου σε κυκλικό σχηματισμό επάνω σε μια επιφάνεια χαλκού. Να σημειωθεί ότι κάθε άτομο μεταφέρθηκε στη θέση του από την ίδια ακίδα που, πέραν του κύριο ρόλου της που είναι η «χαρτογράφηση», ασκεί, επιπλέον, μια μικρή δύναμη στα άτομα. Οι εσωτερικοί κυματισμοί της εικόνας αντιστοιχούν σε κύματα de Broglie ηλεκτρονίων που είναι παγιδευμένα στο λεγόμενο «κβαντικό μαντρί».

# Κ3. Ερωτήσεις/Προβλήματα

**1.** Συγκρίνετε τη συχνότητα και την ενέργεια ενός φωτονίου στο ορατό φάσμα ( $\lambda$ =500 nm) με αυτή ενός φωτονίου ακτίνων X ( $\lambda$ =10 pm). Οι ενέργειες να εκφραστούν σε eV.

**2.** Η φωτεινή ισχύς που εκπέμπει μια φωτεινή πηγή είναι  $10^{-6}$  W. Εάν με ένα φακό εστιάσουμε τη δέσμη σε ένα κυκλικό δίσκο ακτίνας 20 μm ποια η ένταση του φωτός; Εκφράστε την ισχύ σε αριθμό φωτονίων ανά μονάδα χρόνου για μήκος κύματος εκπομπής 500 nm. Εκφράστε και την ένταση σε φωτόνια/(s·m<sup>2</sup>)

**3.** Λεπτό φύλλο Καλίου (Κ) απέχει απόσταση r=3.5 m από σημειακή πηγή ισχύος 1.5 W που εκπέμπει σφαιρικά κύματα. Το έργο εξόδου του Κ είναι 2.2 eV. Υποθέστε ότι η φωτεινή ενέργεια της πηγής που φτάνει στο φύλλο απορροφάται από αυτό σταδιακά και συνεχώς, δηλαδή σύμφωνα με τη Κλασσική Η/Μ θεωρία και όχι σύμφωνα με τη Φωτονική Θεωρία. Υποθέστε επίσης ότι το φύλλο απορροφά πλήρως το προσπίπτων φως και ότι η «ενεργός επιφάνεια» εντός της οποίας το ηλεκτρόνιο απορροφά φως είναι μια κυκλική περιοχή ακτίνας  $5 \times 10^{-11}$  m (ατομική ακτίνα). Σε πόσο χρόνο το φύλλο θα απορροφήσει ενέργεια αρκετή ώστε να αποβάλει ένα ηλεκτρόνιο; Παίζει κάποιο ρόλο το μήκος κύματος της ακτινοβολίας;

**4.** Ένα μεταλλικό φύλλο ακτινοβολείται με φως κάποιου συγκεκριμένου μήκους κύματος. Ποιο ή ποια από τα επόμενα θα καθορίσουν εάν ηλεκτρόνια θα εξαχθούν του μετάλλου; (α) Η ένταση του φωτός, (β) ο χρόνος έκθεσης στο φως, (γ) η θερμική αγωγιμότητα του φύλλου, (δ) η επιφάνεια του φύλλου, (ε) το είδος του μετάλλου.

**5.** Κάποιο μέταλλο έχει έργο εξαγωγής 4.2 eV. Βρείτε τη συχνότητα και το μήκος κύματος ακτινοβολίας κατωφλίου για το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο. Υπολογίστε τη μέγιστη κινητική ενέργεια των φωτοηλεκτρονίων εάν φωτίσουμε το μέταλλο με φως μήκους κύματος 200 nm.

**6.** Σε διάταξη μελέτης του φωτοηλεκτρικού φαινομένου διαπιστώνεται ότι όταν η μεταλλική επιφάνεια φωτίζεται με μονοχρωματική δέσμη φωτός μήκους κύματος 300 nm, η μέγιστη κινητική ενέργεια των φωτοηλεκτρονίων είναι 1.2 eV. Προσδιορίστε το έργο εξόδου του υλικού και το μήκος κύματος κατωφλίου.

7. Θέλουμε να μελετήσουμε το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο χρησιμοποιώντας το μέγιστο εκπομπής του ηλιακού φωτός. Το μήκος κύματος όπου εμφανίζεται το μέγιστο αυτό είναι ~500 nm. Τα έργα εξόδου των μετάλλων Li, Be και Hg είναι 2.3, 3.9 και 4.5 eV αντίστοιχα. Ποιο μέταλλο πρέπει να χρησιμοποιήσουμε για να παρατηρήσουμε φωτοηλεκτρόνια;

**8.** Ακτίνες Χ μήκους κύματος 10 pm σκεδάζονται από στόχο άνθρακα. Η σκεδαζόμενη δέσμη παρατηρείται στις 90°. (α) Ποια η μετατόπιση Compton Δλ; (β) Ποια η % μείωση της ενέργειας του φωτονίου;

9. Ελεύθερο ηλεκτρόνιο έχει ενέργεια 4 eV. Βρείτε τη συχνότητα και το μήκος κύματος de Broglie που του αντιστοιχεί.

10. Σωματίδιο μάζας *m* είναι εγκλωβισμένο σε μια περιοχή διαστάσεων *L*. Εντός της περιοχής αυτής δεν του ασκούνται δυνάμεις. Σύμφωνα με την υπόθεση de Broglie τα σωματίδια συνδέονται με κύματα ύλης. Θεωρήστε λοιπόν δύο κύματα ύλης, ένα που περιγράφει την κίνηση του σωματιδίου προς τα αριστερά και ένα που περιγράφει την κίνησή του προς τα δεξιά. Τα δύο αυτά κύματα συμβάλλουν δημιουργώντας ένα στάσιμο κύμα με δεσμούς στα άκρα της περιοχής εγκλωβισμού. Χρησιμοποιώντας τα παραπάνω, βρείτε τις επιτρεπτές τιμές της μηχανικής ενέργειας του σωματιδίου. Βρείτε επίσης την ταχύτητά του στη θεμελιώδη κατάσταση.

Εφαρμογή: (α) *m*=1 g, *L*=1 cm (μακροσκοπικό σώμα και περιοχή εγκλωβισμού), (β) *m*≈9×10<sup>-31</sup> kg, *L*≈1×10<sup>-10</sup> m (ηλεκτρόνιο εγκλωβισμένο στις διαστάσεις ενός ατόμου). Τι παρατηρείτε;

11. Ένα ηλεκτρόνιο έχει κατά προσέγγιση ταχύτητα ίση με 10<sup>6</sup> m/sec. Πόσο είναι κατά προσέγγιση το μήκος κύματος de Broglie; Η αβεβαιότητα στη ταχύτητά του είναι 3×10<sup>5</sup> m/sec. Πόση είναι κατά προσέγγιση η αβεβαιότητα στη θέση του;

12. Ένα ηλεκτρόνιο είναι εγκλωβισμένο εντός ενός «πηγαδιού» δυναμικής ενέργειας ατομικών διαστάσεων. Κάποιος μας λέει ότι βρίσκεται στη θέση όπου η δυναμική ενέργεια παρουσιάζει ελάχιστο και ότι είναι ακίνητο. Τον πιστεύετε ή όχι και γιατί;

**13.** Σωματίδιο μάζας *m* είναι εγκλωβισμένο σε μια περιοχή διαστάσεων *L*. Εντός της περιοχής αυτής δεν του ασκούνται δυνάμεις. Χρησιμοποιώντας την Αρχή της Απροσδιοριστίας βρείτε το κατώτατο όριο της μηχανικής του ενέργειας. Εφαρμογή: (α) *m*=1 g, *L*=1 cm (σώμα και περιοχή εγκλωβισμού μακροσκοπικά), (β)  $m\approx9\times10^{-31}$  kg,  $L\approx10^{-10}$  m (ηλεκτρόνιο εγκλωβισμένο στις διαστάσεις ενός ατόμου).

**14.** Η αβεβαιότητα στην ορμή ενός ηλεκτρονίου που κινείται σε μια διάσταση είναι  $\Delta p_x = 10^{-25}$  kg·m/sec. Πόση είναι περίπου η διάσταση του μικρότερου «κουτιού» στο οποίο μπορούμε να το περιορίσουμε;

**15.** Ποια η ελάχιστη κινητική ενέργεια του πρωτονίου όταν βρίσκεται εγκλωβισμένο εντός ενός ατομικού πυρήνα τυπικών διαστάσεων  $\sim 10^{-14}$  m;  $m_p \approx 1.7 \times 10^{-27}$  kg.

16. Για ένα κβαντικό σύστημα η δυναμική ενέργεια U(x) έχει τη μορφή του διπλανού σχήματος. Τι περιμένετε για τις επιτρεπτές τιμές της ενέργειας E εάν (α)  $E < U_{max}$  και (β)  $E > U_{max}$ ;



17. Σωμάτιο μάζας *m* και ενέργειας *E* κατευθύνεται προς ορθογώνιο σκαλοπάτι δυναμικής ενέργειας ύψους  $U_{\text{max}}$ . Βρείτε τους συντελεστές ανάκλασης *R* και διέλευσης *T* όταν  $U_{\text{max}}=3E/4$ . Δίδεται ότι  $R = (k_{\text{I}} - k_{\text{II}})^2 / (k_{\text{I}} + k_{\text{II}})^2$  όπου  $k_{\text{I}}=(2mE)^{1/2}/\hbar$  και  $k_{\text{II}} ==[2m(E-U_{\text{max}})]^{1/2}/\hbar$  οι κυματάριθμοι των κυμάτων ύλης που περιγράφουν το σωμάτιο όταν U=0 και  $U=U_{\text{max}}$  αντίστοιχα.

**18.** Σωματίδιο μάζας *m* και κινητικής ενέργειας *K*=*E* πλησιάζει σε ορθογώνιο φράγμα δυναμικού πάχους *L* και ύψους *U*<sub>max</sub>. Ποια θα είναι η κινητική του ενέργεια εάν διέλθει του φράγματος μέσω του φαινομένου σήραγγας; Ποια η κινητική του ενέργεια εάν ανακλαστεί;

Να βρείτε το συντελεστή διέλευσης Τ στις παρακάτω περιπτώσεις:

(a) Πρωτόνιο ( $m_p = \approx 1.7 \times 10^{-27}$  kg) κινητικής ενέργειας 3 MeV, L = 10 fm και  $U_{max} = 10$  MeV (πυρηνική διάσπαση α).

(β) Πρωτόνιο κινητικής ενέργειας 0.5 eV, L=10 pm και  $U_{max}=0.6$  eV (δεσμός Υδρογονου).

(γ) Ηλεκτρόνιο ( $m_e \approx 9.1 \times 10^{-31}$  kg) κινητικής ενέργειας 0.5 eV, L=10 pm και  $U_{max}=0.6$  eV.

(δ) Σώμα μάζας 1 g, ενέργειας 1 mJ, L=1 cm και  $U_{\text{max}}=2$  mJ.

Δίδεται ότι 
$$T \sim \exp\left(-2L\sqrt{2m(U_{\text{max}}-E)}/\hbar\right)$$
.

**19.** Σωμάτιο μάζας *m* και ενέργειας *E* κατευθύνεται προς ορθογώνιο φράγμα δυναμικής ενέργειας ύψους  $U_{\text{max}}$  και πάχους *L*. Γνωρίζουμε ότι για  $E=5U_{\text{max}}/6$  ο συντελεστής διέλευσης είναι ίσος με  $T=45\times10^{-6}$ . Υπολογίστε τη ποσοστιαία σχετική μεταβολή  $100\times\Delta T/T=100\times(T-T')/T$  του συντελεστή διέλευσης εάν (α) το πάχος του φράγματος, (β) η μάζα του σωματιδίου και (γ) το ύψος του φράγματος αυξηθεί κατά 1%. [Κάθε φορά μεταβάλλεται ένα μέγεθος ενώ τα υπόλοιπα παραμένουν αμετάβλητα].

# Κ4. Στοιχεία Ατομικής Φυσικής

# 1. Προϊστορία

Στην Αρχαία Ελλάδα (~4°<sup>5</sup> αιώνας π.Χ.) υπήρξαν πολλές θεωρίες που αφορούσαν τη σύσταση των σωμάτων, δηλαδή την ύλη. Οι θεωρίες αυτές ήταν κατά βάση φιλοσοφικές και δεν στηρίζονταν σε κανένα πειραματικό δεδομένο, πλησιέστερη δε στη σημερινή μας αντίληψη ήταν η ατομική θεωρία των Δημόκριτου και Λεύκιππου που υποστήριζαν ότι: (•) Η ύλη είναι ασυνεχής (Σωστό), αποτελείται από άτομα (Σ), δηλαδή άτμητα σωματίδια (Λάθος). (•) Τα άτομα διαφέρουν κατά το σχήμα και κατά το μέγεθος (~Σ). (•) Δεν καταστρέφονται (~Λ) και δεν δημιουργούνται εκ του μηδενός (Σ). (•) Βρίσκονται σε συνεχή κίνηση (Σ), τα δε φυσικά και χημικά φαινόμενα οφείλονται στην κίνηση των ατόμων (~Σ) και, τέλος, (•) οι χημικές ενώσεις προέρχονται από ένωση ατόμων (Σ!) και η διάσπαση των χημικών ενώσεων οφείλεται στον αποχωρισμό των ατόμων (Σ!). Η θεωρία αυτή, παρ' όλο που όπως βλέπουμε περιέχει αρκετά αληθή σημεία, καταπολεμήθηκε έντονα από τους Πλάτωνα και Αριστοτέλη και έπεσε στην αφάνεια έως τις αρχές του 19<sup>ω</sup> αιώνα. Την περίοδο αυτή οι χημικοί είχαν πλέον στα χέρια τους σειρά πειραματικών δεδομένων που την υποστήριζαν. Συγκεκριμένα, γνώριζαν ότι:

(α) Η ύλη αποτελείται από άτομα.

(β) Τα άτομα είναι ηλεκτρικά ουδέτερα.

(γ) Τα άτομα έχουν δομή (δεν είναι άτμητα) και μάλιστα περιέχουν ηλεκτρόνια που είναι αρνητικά φορτισμένα. Συνεπώς πρέπει να περιέχουν και ίση ποσότητα θετικού φορτίου.

(δ) Το θετικά φορτισμένο τμήμα του ατόμου πρέπει να συγκεντρώνει το σύνολο σχεδόν της μάζας του ατόμου διότι η μάζα των ατόμων (προσεγγιστικά γνωστή από τη Χημεία) είναι πολύ μεγαλύτερη αυτής των ηλεκτρονίων.

(ε) Το μέγεθος των ατόμων είναι, πάλι από τη Χημεία, προσεγγιστικά γνωστό (~10<sup>-10</sup> m).

Στα σημεία (γ) και (δ) καθοριστική ήταν η συνεισφορά του J J Thomson που έδειξε πειραματικά ότι οι λεγόμενες τότε καθοδικές ακτίνες είναι δέσμες ηλεκτρονίων και βρήκε το λόγο  $e/m_e$ . Συγκρίνοντας το λόγο αυτό με τον αντίστοιχο για τα ιόντα Υδρογόνου (γνωστού από την ηλεκτρόλυση), βρήκε ότι η μάζα των ηλεκτρο-

νίων είναι ~1000 φορές μικρότερη. Βασισμένος στα δεδομένα αυτά, πρότεινε το Σχήμα 1 γνωστό μας σήμερα ατομικό μοντέλο του «σταφιδόψωμου» (Σχ. 1), σύμφωνα με το οποίο τα άτομα αποτελούνται από μια σφαιρική, ομοιόμορφη κατανομή θετικού φορτίου +Ze στην οποία τα Z τον αριθμό ηλεκτρόνια είναι ομοιόμορφα ενσωματωμένα. Παρόλο που σήμερα φαίνεται απλοϊκό, το μοντέλο μπορεί να «μαθηματικοποιηθεί» και να κάνει συγκεκριμένες προβλέψεις. Η κυριότερη είναι ότι εάν τα-



χέα, βαριά και φορτισμένα σωματίδια (όπως είναι π.χ. οι πυρήνες  $He^{++}$ ) σκεδαστούν από τα άτομα, θα παρατηρηθεί μικρή άπωση κοντά στο άτομο και πεπερασμένη άπωση στο εσωτερικό του. Σε κάθε περίπτωση η γωνία σκέδασης θα είναι μικρή (~1°) ακόμη και μετά από πολλαπλή σκέδαση. Με άλλα λόγια, τα σωματίδια θα πρέπει περάσουν σχεδόν ανεπηρέαστα από τα άτομα, αποκλίνοντας ελάχιστα ή καθόλου από την πορεία τους. Το 1911 ο E Rutherford και οι συνεργάτες του θα ελέγξουν πειραματικά την πρόβλεψη αυτή και θα την απορρίψουν διότι παρατηρούν σκέδαση και σε πολύ μεγάλες γωνίες (έως και ~180<sup>°</sup>, δηλαδή σχεδόν πλήρη αντιστροφή της πορείας των σωματιδίων). Τα δεδομένα εξηγούνται εάν υποθέσουμε ότι οι διαστάσεις του θετικά φορτισμένου τμήματος του ατόμου (που όπως είπαμε συγκεντρώνει το σύνολο της μάζας του) είναι ~10<sup>-14</sup> m, δηλαδή είναι περίπου 10000 φορές μικρότερες από τις διαστάσεις του ίδιου του ατόμου. Με αυτήν την εικόνα ως αφετηρία ο Rutherford προτείνει ένα πιο βελτιωμένο «πλανητικό» μοντέλο για το άτο-

μο (Σχ. 2) σύμφωνα με το οποίο το θετικά φορτισμένο τμήμα του (ο πυρήνας) είναι στο κέντρο και τα ηλεκτρόνια περιστρέφονται γύρω του όπως οι πλανήτες γύρω από τον Ήλιο. Η ελκτική δύναμη που τα συγκρατεί και τα εξαναγκάζει σε κυκλική τροχιά είναι η ηλεκτρική (Coulomb) που δρα ως κεντρομόλος. Το μοντέλο άφηνε αναπάντητα ερωτήματα όσον αφορά τη σύσταση και σταθερότητα του πυρήνα. Π.χ. εάν στον πυρήνα υπάρχουν μόνο θετικά φορτία, πως συγκρατούνται σε αυτόν; (ένδειξη ύπαρξης δύναμης πολύ ισχυρότερης της ηλεκτρικής) και, επίσης, τι είναι η άλλη μισή (και πλέον) μάζα των πυρήνων; Τα ερωτήματα αυτά θα απαντηθούν με την ανακάλυψη του νετρονίου και της ισχυρής πυρηνικής δύναμης. Αλλά και

όσον αφορά το άτομο, το μοντέλο έχει χτυπητές αδυναμίες, με κυριότερες τις εξής: Η κυκλική κίνηση των ηλεκτρονίων είναι επιταχυνόμενη (κεντρομόλος) και, επακόλουθα θα εκπέμπει Η/Μ ακτινοβολία συχνότητας ίσης με τη συχνότητα περιφοράς του (γεγονός που προβλέπεται από τις εξισώσεις του Maxwell και είναι επιβεβαιωμένο πειραματικά ήδη από το 1888). Ως αποτέλεσμα της εκπομπής, χάνει ενέργεια με συνέπεια τη

σταδιακή μείωση της ακτίνας του, οπότε τελικά θα χάσει όλη την ενέργειά του και θα πέσει στον πυρήνα (αυτοκαταστροφή της ύλης). Αντίθετα, τα άτομα είναι αποδεδειγμένα πολύ σταθερές δομές. Πέραν αυτού, η σταδιακή μείωση της ακτίνας συνεπάγεται και τη σταδιακή αύξηση της συχνότητας περιφοράς και εκπομπής. Αυτό σημαίνει ότι θα εκπέμπει συνεχώς και πρακτικά όλες τις συχνότη-

τες (Σχ. 3). Το φάσμα της εκπεμπόμενης Η/Μ ακτινοβολίας, θα πρέπει δηλαδή να είναι συνεχές. Η πρόβλεψη αυτή έρχεται σε πλήρη αντίθεση με τα πειραματικά δεδομένα τα οποία θα παρουσιάσουμε συνοπτικά παρακάτω.

# 2. Τα Γραμμικά Φάσματα των Ατομικών Αερίων

# 2.1 Συνεχή και Γραμμικά Φάσματα Απορρόφησης & Εκπομπής

Η γνωστότερη φωτεινή πηγή που εκπέμπει συνεχές φάσμα θεωρείται ότι είναι ο Ήλιος. Όταν μετά τη βροχή το ηλιακό φως περνά από τις σταγόνες που βρίσκονται στην ατμόσφαιρα, *αναλύεται* σε μια συνεχή ταινία χρωμάτων (ουράνιο τόξο) λόγω του φαινομένου του διασκεδασμού (δείκτης διάθλασης που εξαρτάται από το μήκος κύματος). Στο εργαστήριο, για την ανάλυση του φωτός χρησιμοποιούμε σήμερα φασματοσκό-





πια (όπως το φασματοσκόπιο φράγματος που παρουσιάσαμε στην οπτική). Η ένταση (ή αριθμός φωτονίων ανά μονάδα χρόνου και επιφάνειας) για κάθε χρώμα είναι βέβαια διαφορετική. Εάν σχεδιάσουμε σε ένα διάγραμμα την φωτεινή ένταση ως συνάρτηση της συχνότητας θα έχουμε το συνεχές φάσμα του Ήλιου (Σχ. 4). Εκτός από τον Ήλιο, συνεχή φάσματα εκπέμπουν και π.χ. οι λάμπες πυράκτωσης και γενικότερα όλα τα διάπυρα στερεά.



Με τα άτομα στην αέρια φάση τα πράγματα είναι

διαφορετικά. Διακρίνουμε, καταρχήν, δύο κύρια είδη φασματοσκοπίας, τη φασματοσκοπία απορρόφησης και τη φασματοσκοπία εκπομπής. Κατά την πρώτη, το συνεχές φάσμα μιας πηγής περνά μέσα από κάποιο θάλαμο που περιέχει το προς μελέτη άτομο. Το φάσμα που εξέρχεται του θαλάμου είναι ίδιο με αυτό της πηγής, εκτός από κάποιες φασματικές περιοχές όπου η ένταση έχει μειωθεί επειδή το αέριο απορρόφησε επιλεκτικά φως στις περιοχές αυτές (Σχ. 5). Από την άλλη, κατά την φασματοσκοπία εκπομπής δημιουργούμε μία εκκένωση στο θάλαμο όπου βρίσκεται το αέριο (π.χ. λάμπες Neon), οπότε τα άτομα διεγείρονται. Στη



συνέχεια, τα άτομα αυτά αποδιεγείρονται, εκπέμποντας φως το οποίο αναλύουμε με ένα φασματοσκόπιο (Σχ. 6). Το κύριο χαρακτηριστικό των φασμάτων των αερίων είναι ότι, είτε οι σκοτεινές φασματικές περιοχές σε φωτεινό υπόβαθρο (φάσματα απορρόφησης) είτε οι φωτεινές φασματικές περιοχές σε σκοτεινό υπόβαθρο (φάσματα εκπομπής) είναι πολύ στενές και ονομάζονται **φασματικές γραμμές** και τα φάσματά τους *γραμμικά*. Ήδη από τον 19<sup>ου</sup> αιώνα είχε ήδη παρατηρηθεί ότι οι συχνότητες (ή μήκη κύματος) απορρόφησης



και εκπομπής του ιδίου αερίου συμπίπτουν (αν και τα φάσματα δεν ταυτίζονται αναγκαστικά). Επίσης είχε παρατηρηθεί ότι τα γραμμικά φάσματα του κάθε στοιχείου το χαρακτηρίζουν. Είναι το "δακτυλικό του αποτύπωμα" και δεν υπάρχουν στη Φύση δύο στοιχεία με τα ίδια γραμμικά φάσματα. Μερικά μάλιστα στοιχεία, όπως το Rb και το Cs, ανακαλύφθηκαν μέσω της μελέτης των φασμάτων τους. Σήμερα η φασματοσκοπία έχει πολλές εφαρμογές όπως είναι π.χ. τη στοιχειακή ανάλυση αστέρων και άλλων δειγμάτων (π.χ. τροφίμων). Κλείνουμε αυτή την αναφορά μας στον διαχωρισμό των φασμάτων με την παρατήρηση ότι ακόμα και το φάσμα του Ήλιου είναι τελικά γραμμικό. Αυτό διαπιστώθηκε για πρώτη φορά το 1814 από το Fraunhofer, που ανακάλυψε την ύπαρξη ~1000 σκοτεινών γραμμών. Ο Kirchoff, σωστά τις απέδωσε στην απορρόφηση από άτομα (όπως το Na) που βρίσκονται στα εξωτερικά στρώματα του Ήλιου.

#### 2.2 Γραμμικά Φάσματα του Υδρογόνου

Το 1885 ο Balmer αναλύει τις τότε γνωστές τέσσερις φασματικές γραμμές του ορατού φάσματος του Υδρογόνου και ανακαλύπτει μια εμπειρική σχέση που αναπαράγει πιστά τις φασματικές θέσεις τόσο αυτών όσο και ακόμη δέκα γραμμών που είχαν ανακαλυφθεί εν τω μεταξύ (Σχ. 7). Προτείνει επίσης την επέκταση της σχέσης του για την πρόβλεψη και άλλων σειρών από φασματικές γραμμές σε διάφορες περιοχές μηκών κύματος (μακρινό υπεριώδες, υπέρυθρο κλπ). Οι σειρές αυτές θα παρατηρηθούν πράγματι και θα αποτελέσουν, μαζί με την εμπειρική σχέση του Balmer, το ελάχιστο πειραματικό δεδομένο που θα πρέπει οπωσδήποτε να



αναπαράγει κάθε μελλοντική ατομική θεωρία ώστε να θεωρείται άξια λόγου. Είναι προφανές ότι το πλανητικό μοντέλο του Rutherford δεν μπορεί να αναπαράγει ούτε το φάσμα του απλούστερου στοιχείου (Υδρογόνου) ούτε κανενός άλλου, εφόσον, όπως είπαμε και παραπάνω, προβλέπει συνεχές και όχι γραμμικό φάσμα εκπομπής. Τελικά, το μόνο που αξίζει να κρατήσουμε από το μοντέλο αυτό είναι ότι η μάζα του ατόμου είναι συγκεντρωμένη στον πυρήνα.

#### 3. Τα Μοντέλο του Bohr για το Άτομο του Υδρογόνου με ...Ολίγη Υπόθεση de Broglie

Η πρώτη αξιόλογη θεωρητική μελέτη του ατόμου του Υδρογόνου ανήκει στο N Bohr που ξεπέρασε τα προβλήματα του μοντέλου του Rutherford αξιοποιώντας τις ιδέες των Planck και Einstein για τα φωτόνια και κάνοντας κάποιες αξιωματικές (χωρίς απόδειξη ή αιτιολόγηση) παραδοχές. Συγκεκριμένα, αποδέχθηκε κατ' αρχήν, όπως και ο Rutherford, ότι οι τροχιές του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα είναι κυκλικές και ότι η δύναμη Coulomb δρα ως κεντρομόλος (Σχ. 2). Στη συνέχεια όμως, δέχθηκε αξιωματικά ότι υπάρχουν μόνο επιτρεπτές τροχιές στις οποίες το ηλεκτρόνιο δεν εκπέμπει Η/Μ ακτινοβολία και δεν χάνει ενέργεια (η πρόταση αυτή έρχεται σε πλήρη αντίθεση με την Κλασσική Φυσική). Η συχνότητα της ακτινοβολίας που εκπέμπει ή απορροφά το άτομο λοιπόν δε σχετίζεται με τη συχνότητα περιφοράς του. Αντί γι' αυτό, πρότεινε ότι το άτομο απορροφά ή εκπέμπει φωτόνια μόνο κατά τη μετάβαση από μία επιτρεπτή τροχιά σε μια άλλη (τα λεγόμενα κβαντικά άλματα). Η ενέργεια (συχνότητα) του φωτονίου που απορροφάται ή εκπέμπεται δίδεται από τη σχέση,

$$hv_{if} = |E_f - E_i| \tag{1}$$

όπου  $E_f$  και  $E_i$  είναι, αντίστοιχα, η μηχανική ενέργεια της τροχιάς στην οποία το ηλεκτρόνιο κατέληξε (τελική κατάσταση – final state) και της τροχιάς στην οποία βρισκόταν πριν από τη μετάβαση (αρχική κατάσταση – initial state). Αποδεχόμενος τα παραπάνω, αυτό που απέμενε ήταν η εύρεση αυτών των τροχιών (καταστάσεων) και οι μηχανικές ενέργειες που τους αντιστοιχούν. Για να το επιτύχει αυτό ο Bohr έκανε ακόμη μία ανεξήγητη στην εποχή του παραδοχή, ότι δηλαδή η στροφορμή του ηλεκτρονίου δεν μπορεί να πάρει συνεχείς αλλά μόνο κάποιες διάκριτες τιμές (;!). Εδώ θα προτιμήσουμε να «αποδείξουμε» αυτή τη **συνθήκη** 

**κβάντωσης** μέσω της υπόθεσης de Broglie. Η «απόδειξη» αυτή είναι ιστορικά μεταγενέστερη του μοντέλου του Bohr αλλά παρ' όλα αυτά θα την προτιμήσουμε γιατί αναδεικνύει την κυματική συμπεριφορά των ηλεκτρονίων. Ας θυμηθούμε λοιπόν πρώτα ότι σε μια χορδή κιθάρας στερεωμένη σε ακλόνητα άκρα, όπως και να τη διεγείρουμε αρχικά, θα επιβιώσουν μόνο εκείνα τα στάσιμα κύματα που αντιστοιχούν σε δεσμούς στα άκρα και μήκος χορδής ίσο με ακέραιο αριθμό ημικυμάτων. Κατ' αντιστοιχία, ο de Broglie πρότεινε ότι όποιες και εάν είναι οι αρχικές συν-



θήκες εκκίνησης της περιφοράς του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα θα επιβιώσουν μόνο εκείνες οι τροχιές των οποίων οι περιφέρειες αντιστοιχούν σε ακέραιο αριθμό μηκών κύματος των κυμάτων ύλης (Σχ. 8). Θα έχουμε δηλαδή ότι,

$$2\pi r_n = n\lambda_n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \tag{2}$$

όπου *r<sub>n</sub>* οι ακτίνες των τροχιών και λ<sub>n</sub> τα μήκη κύματος de Broglie του ηλεκτρονίου στις επιτρεπτές τροχιές. Το κάθε λ<sub>n</sub> μπορεί να συνδεθεί με την ορμή του ηλεκτρονίου εφόσον,

$$p = m_e v = h/\lambda. \tag{3}$$

Συνδυάζοντας τις δύο παραπάνω σχέσεις βρίσκουμε ότι

$$m_e \cdot \upsilon_n \cdot r_n = n \frac{h}{2\pi} = n \cdot \hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$
(4)

Το μέγεθος  $\mathcal{L}=m_e \cdot v \cdot r$  είναι πράγματι το μέτρο της (τροχιακής, όπως λέγεται) στροφορμής του ηλεκτρονίου. Υπενθυμίζουμε ότι, όπως γνωρίζουμε και από το Λύκειο, η τροχιακή στροφορμή είναι ένα διανυσματικό μέγεθος  $\vec{L}$ , μέτρου  $\mathcal{L}$ , διεύθυνσης κάθετης στο επίπεδο της τροχιάς και κατεύθυνσης που δίνεται από τον κανόνα του δεξιού γεριού. Η διεύθυνση και φορά του διανύσματος αυτού λοιπόν μας

δίνει πληροφορίες τόσο για το επίπεδο της τροχιάς όσο και για τη φορά περιστροφής του σωματιδίου (Σχ. 9). Τώρα, με τη βοήθεια της (4) μπορούμε να προχωρήσουμε στον υπολογισμό των τροχιών. Το μέτρο της δύναμης Coulomb μεταξύ του πυρήνα, φορτίου +e, και του ηλεκτρονίου (-e) (Σχ. 2) γράφεται ως  $ke^2/r^2$  με





k≈9×10<sup>9</sup> N·m<sup>2</sup>/Cb<sup>2</sup> μια σταθερά. Εφόσον, η δύναμη αυτή δρα ως κεντρομόλος θα πρέπει είναι ίση με  $m_e \alpha_\kappa = m_e v^2/r$  όπου  $\alpha_\kappa = v^2/r$  η κεντρομόλος επιτάχυνση. Άρα,

$$k\frac{e^2}{r^2} = m_e \frac{\upsilon^2}{r}$$
(5)

από όπου έχουμε μία σχέση μεταξύ ταχύτητας και ακτίνας. Μας χρειάζεται άλλη μία σχέση μεταξύ των δύο αυτών μεγεθών (σύστημα δύο εξισώσεων με δύο αγνώστους) που δεν είναι άλλη από τη συνθήκη κβάντωσης (4). Συνδυάζοντας αυτές τις δύο σχέσεις βρίσκουμε ότι οι επιτρεπτές ακτίνες γράφονται ως,

$$r_n = a_0 n^2 \tag{6}$$

όπου,

$$a_{\rm o} = \frac{\hbar^2}{m_e k e^2} = 0.53 \times 10^{-10} \,\mathrm{m} \tag{7}$$

η λεγόμενη **ακτίνα του Bohr** που ακόμη και σήμερα χρησιμοποιείται ως ατομική μονάδα μέτρησης μήκους. Οι δε ταχύτητες του ηλεκτρονίου στις επιτρεπτές τροχιές γράφονται,

$$\upsilon_n = \frac{\hbar}{m_e r_n} n = \frac{\hbar}{m_e a_0} \frac{1}{n}.$$
(8)

Με τις ταχύτητες και ακτίνες γνωστές, μπορούμε να βρούμε την κινητική και δυναμική ενέργεια του ηλεκτρονίου σε κάθε τροχιά. Η κινητική ενέργεια, μέσω της (8) γράφεται

$$K = \frac{1}{2}m_e v^2 = \frac{1}{2}k\frac{e^2}{r}$$
(9)

και η δυναμική (φορτίο ηλεκτρονίου επί δυναμικό Coulomb),

$$U = -eV = -k\frac{e^2}{r}$$
(10)

Συνεπώς η μηχανική ενέργει<br/>α $E{=}U{+}K$ για κάθε κατάσταση γράφεται

$$E_{n} = -\frac{1}{2} k \frac{e^{2}}{r_{n}} = -\frac{Ryd}{n^{2}}$$
(11)

όπου,

$$Ryd = \frac{ke^2}{2a_0} = 13.6 \,\mathrm{eV}$$
 (12)

η λεγόμενη σταθερά Rydberg. Το ενεργειακό διάγραμμα που αποδίδει την ενεργειακή δομή (ενεργειακές θέσεις των καταστάσεων) του ατόμου του Υδρογόνου, όπως περιγράφεται από τη σχέση (11), φαίνεται στο Σχ. 10. Παρατηρούμε ότι για E<0 αποτελείται από μια ακολουθία διάκριτων ενεργειακών επιπέδων (κβάντωση ενέργειας) που χαρακτηρίζονται από τον λεγόμενο κύριο κβαντικό αριθμό n. Η αρνητική ενέργεια που έχουν, κατά σύμβαση, όλες αυτές οι δέσμιες καταστάσεις με κβαντικούς αριθμούς από n=1 έως και  $n\rightarrow\infty$  σημαίνει ότι όταν το ηλεκτρόνιο βρίσκεται αρχικά σε μία από αυτές και θέλουμε να το διεγείρουμε σε ενεργειακά υψηλότερες (διεγερμένες) καταστάσεις ή και να το απομακρύνουμε εντελώς από το άτομο θα πρέπει να προσφέρουμε ενέργεια. Στην ενεργειακή θέση E=0 έχουμε το κατώφλι ιονισμού. Για E>0 το άτομο είναι ιονισμένο οπότε το σύστημα αποτελείται από ένα ελεύθερο ηλεκτρόνιο και ένα θετικά φορτισμένο ιόν (ειδικά για το Υδρογόνο ένα πρωτόνιο). Η ενεργειακή διαφορά μεταξύ της θεμελιώδους κατάστασης ( $n = 1, E_1 = -Ryd$ ) και του κατωφλίου ιονισμού ονομάζεται ενέργεια (ή δυναμικό) ιονισμού. Εάν το άτομο βρίσκεται στη θεμελιώδη κατάσταση και του προφέρουμε ενέργεια ίση με την ενέργεια ιονισμού,



τότε το ηλεκτρόνιο απελευθερώνεται με μηδενική κινητική ενέργεια. Εάν προσφέρουμε ενέργεια μεγαλύτερη από την ενέργεια ιονισμού το ηλεκτρόνιο θα απελευθερωθεί με κινητική ενέργεια ίση με τη διαφορά της ενέργειας που προσφέραμε και της ενέργειας ιονισμού, όπως και στο φωτοηλεκτρικό φαινόμενο. Όπως συζητήσαμε και στο προηγούμενο κεφάλαιο, η περιοχή θετικών ενεργειών ονομάζεται **συνεχές**. Μία μετάβαση από μια δέσμια κατάσταση (E<0) σε μια κατάσταση του συνεχούς (E>0) είναι, γενικά, πάντα επιτρεπτή. Το φωτόνιο δηλαδή απορροφάται πάντα και το άτομο ιονίζεται. Αντίθετα, η μετάβαση από μία δέσμια κατά σταση σε μία άλλη δέσμια κατάσταση πραγματοποιείται μόνον εάν η ενέργεια του φωτονίου είναι ίση με την ενεργειακή διαφορά των δύο καταστάσεων (σχέση (1)). Διαφορετικά η μετάβαση δεν πραγματοποιείται. Στο παράδειγμα του Σχ. 11 φαίνεται η εκπομπή ή απορρόφηση ενός φωτονίου μεταξύ δύο δέσμιων καταστάσεων. Εισάγοντας την (11) στην (1) η συχνότητα του φωτονίου υπακούει στη σχέση,

$$h v_{if} = Ryd \left| -\frac{1}{n_f^2} + \frac{1}{n_i^2} \right|$$
(13)

από όπου τα μήκη κύματος της ακτινοβολίας βρίσκονται μέσω της σχέσης  $\lambda_{ij} = c_0 / v_{if}$ .

Η (13) προβλέπει ότι το φάσμα του ατόμου του Υδρογόνου θα είναι γραμμικό και το αναπαράγει σωστά. Αναπαράγει επίσης και την εμπειρική σχέση του Balmer και εξηγεί γιατί δεν ταυτίζονται τα φάσμα-

τα εκπομπής και απορρόφησης. Το γεγονός αυτό λοιπόν οφείλεται στο ότι σε θερμοκρασία δωματίου τα άτομα βρίσκονται στη θεμελιώδη κατάσταση μια και κατά τις κρούσεις μεταξύ ατόμων ανταλλάσσεται ενέργεια ~k<sub>B</sub>T όπου k<sub>B</sub> η σταθερά Boltzmann και T η απόλυτη θερμοκρασία του αερίου. Υπενθυμίζουμε ότι διέγερ-



ση μπορεί σε προκληθεί και μέσω κρούσεων, αλλά σε θερμοκρασία δωματίου η ποσότητα  $k_{\rm B}$ T είναι της τάξης των μερικών δεκάδων meV (=10<sup>-3</sup> eV) που δεν αρκούν ώστε να διεγείρουν τα άτομα από τη θεμελιώδη κατάσταση στην πρώτη διεγερμένη, εφόσον γι' αυτό απαιτούνται μερικά eV (Σχ. 10). Άρα, κατά την απορρόφηση φωτός στις συνθήκες αυτές, αρχική κατάσταση είναι πάντα η θεμελιώδης. Αντίθετα, όταν τα άτομα είναι διεγερμένα (είτε με φως είτε μέσω κρούσεων με τα ενεργητικά ηλεκτρόνια που υπάρχουν σε μια ηλεκτρική εκκένωση) υπάρχουν περισσότερες αρχικές καταστάσεις με αποτέλεσμα να μπορούν να απορροφήσουν και να εκπέμψουν και σε άλλα μήκη κύματος.

Το μοντέλο του Bohr μπορεί επίσης να εφαρμοστεί για όλα τα υδρογονοειδή θετικά ιόντα, δηλαδή τα ιονισμένα άτομα στα οποία έχει απομείνει μόνο ένα ηλεκτρόνιο, όπως για παράδειγμα το  $He^+$  και το  $Li^{++}$ . Για τα θετικά ιόντα όμως οι ενέργειες θα δίνονται από την (11) αφού πολλαπλασιαστεί το δεξιό μέλος της επί  $Z^2$ , με +Ze το θετικό φορτίο του πυρήνα (π.χ. Z=2 για το He και Z=3 για το Li, Z ο ατομικός αριθμός). Όπως είναι φυσικό, έχοντας περάσει τις εξετάσεις όσον αφορά τις θέσεις των φασματικών γραμμών το μοντέλο καλείται να προβλέψει και τις διαφορετικές εντάσεις με τις οποίες εμφανίζονται οι γραμμές αυτές στα φάσματα. Στο σημείο αυτό αποτυγχάνει. Αποτυγχάνει επίσης σε όλες τις προβλέψεις που αφορούν τα γραμμικά φάσματα των ατόμων που είναι περιπλοκότερα των υδρογονοειδών αλλά και τη χρονική εξέλιξη των ατομικών συστημάτων. Το μεγαλύτερο όμως πρόβλημα του μοντέλου είναι ότι πρόκειται για ένα ετερόκλητο μίγμα από μη-κλασσικές παραδοχές, διατυπωμένες σε ένα καθαρά κλασσικό εννοιολογικό πλαίσιο. Ότι αξίζει να κρατήσουμε από το μοντέλο αυτό είναι (ι) οι σχέσεις (1), (7) και (11)-(13), (ι) τα  $\Sigma\chi$ . 10 και 11 και οι ορισμοί που δώσαμε (π.χ. για το κατώφλι ιονισμού), (ιιι) η συζήτηση της παραπάνω παραγράφου και (ιιι) η αναγκαιότητα εισαγωγής κάποιων συνθηκών κβάντωσης. Οι τελευταίες εισάγονται στα πλαίσια του μοντέλου αξιωματικά. Η εξαγωγή τους μέσω της υπόθεσης de Broglie που παρουσιάσαμε παραπάνω, υποδηλώνει μεν ότι η ατομική ενεργειακή δομή οφείλεται στον κυματικό χαρακτήρα που εμφανίζουν τα σωματίδια του μικρόκοσμου, αλλά, από την άλλη, είναι σε μεγάλο βαθμό εξίσου αξιωματική. Τα προβλήματα αυτά θα λυθούν μόνον με την αυστηρή κβαντομηχανική περιγραφή του ατόμου.

# 4. Κβαντομηχανική Περιγραφή του Ατόμου του Υδρογόνου

#### 4.1 Προβλέψεις της Εξίσωσης Schrödinger

Ο κβαντομηχανικός χειρισμός του ατόμου του Υδρογόνου, όπως και κάθε άλλου ατόμου ή κβαντικού συστήματος, έχει ως αφετηρία την εξίσωση Schrödinger. Για ένα απομονωμένο άτομο μας χρειάζεται συγκεκριμένα η εξίσωση που είναι ανεξάρτητη του χρόνου (στάσιμες καταστάσεις). Η διαφορά σε σχέση με τα όσα είπαμε προηγουμένως έγκειται στο γεγονός ότι εδώ έχουμε να κάνουμε με ένα πρόβλημα τριών διαστάσεων (*x*,*y*,*z*), ενώ στο *K*3 μιλήσαμε μόνο



για τη μονοδιάστατη εξίσωση. Σε κάθε περίπτωση αυτό που χρειαζόμαστε για να λύσουμε την εξίσωση είναι να εισάγουμε σε αυτήν τη δυναμική ενέργεια του συστήματος πυρήνα (μάζας M και φορτίου +e) και ηλεκτρονίου (μάζας  $m_e$  και φορτίου -e) που, όπως είπαμε και παραπάνω, γράφεται ως

$$U(r) = -\mathbf{k} \cdot \frac{e^2}{r} \,. \tag{14}$$

Στην (11) υποθέσαμε ότι το σύστημα συντεταγμένων βρίσκεται επάνω στον πυρήνα και ότι το μέτρο  $r=[x^2+y^2+z^2]^{1/2}$  του διανύσματος θέσης  $\vec{\mathbf{r}}$  δίνει την απόσταση πυρήνα-ηλεκτρονίου (Σχ. 12). [Αυστηρά, για ένα αρχικά αυθαίρετα επιλεγμένο σύστημα αναφοράς, όπου οι θέσεις του πυρήνα και του ηλεκτρονίου είναι  $\vec{\mathbf{r}}_1$  και  $\vec{\mathbf{r}}_2$  αντίστοιχα, το σημείο αναφοράς θα πρέπει να βρίσκεται στο κέντρο μάζας  $\vec{\mathbf{r}}_{cm} = (M \vec{\mathbf{r}}_1 + M \vec{\mathbf{r}}_2)$  $m_e \vec{\mathbf{r}}_2$ )/(M+m\_e) του συστήματος ηλεκτρονίου-πυρήνα που έχει αναγμένη μάζα μ=(M·m\_e)/(M+m\_e). Όμως, επειδή  $M >> m_e$  έχουμε  $\vec{\mathbf{r}}_{cm} \approx \vec{\mathbf{r}}_1$  και μ $\approx m_e$ , δηλαδή το σημείο αναφοράς πρακτικά συμπίπτει με τη θέση του πυρήνα και η μάζα του συστήματος με αυτή του ηλεκτρονίου]. Παρατηρούμε ότι η δυναμική ενέργεια που περιγράφει της ελκτική δύναμη μεταξύ των δύο αυτών σωμάτων εξαρτάται μόνον από την ακτίνα, είναι δηλαδή η ίδια επάνω σε οποιοδήποτε σημείο μιας σφαίρας ακτίνας r. Λέμε σε αυτή την περίπτωση ότι η δυναμική ενέργεια είναι σφαιρικά συμμετρική (δεν εξαρτάται από τις γωνίες που σχηματίζει το  $\vec{\mathbf{r}}$  με τους άξονες x, y και z). Ας επικεντρώσουμε τώρα την προσογή μας μόνο στις δέσμιες καταστάσεις (E<0) όπου το ηλεκτρόνιο δεν μπορεί να διαφύγει από την έλξη του πυρήνα, πρέπει να κινηθεί σε πεπερασμένο χώρο και η κίνησή του είναι φραγμένη. Για να είναι φυσικά αποδεκτές οι κυματοσυναρτήσεις που προκύπτουν από τη λύση της εξίσωσης Schrödinger πρέπει να συμμορφώνονται με την παραπάνω απαίτηση. Όπως προκύπτει τελείως αβίαστα (και καθόλου αξιωματικά) μέσα από την ίδια τη λύση της εξίσωσης, τέτοιες κυματοσυναρτήσεις υπάρχουν μόνο για τις διάκριτες τιμές της ενέργειας που ικανοποιούν τη σχέση (11) του Bohr και εξαρτώνται από τον κύριο κβαντικό αριθμό n. Επιπλέον, εφόσον έχουμε ένα τρισδιάστατο πρόβλημα έχουμε και τρεις βαθμούς ελευθερίας. Συνεπώς θα περιμέναμε να έχουμε και τρεις κβαντικούς αριθμούς. Πράγματι, εκτός του n, προκύπτουν και άλλοι δύο κβαντικοί αριθμοί. Ο ένας είναι ο κβαντικός αριθμός της τρογιακής στροφορμής  $\ell$  και ο άλλος ο αζιμουθιακός (ή μαγνητικός) κβαντικός αριθμός  $m_{\ell}$ . Δεδομένου ότι ο nμπορεί να πάρει τιμές

$$n=1,2,3,\ldots\infty$$
 (15a)

*K*4-9

για δεδομένη τιμή του n, o l μπορεί να πάρει τιμές,

$$\ell = 0, 1, \dots, n-1$$
 (15β)

και για δεδομένο  $\ell$ ,

$$m_{\ell} = -\ell, -\ell + 1, \dots, +\ell. \tag{15\gamma}$$

Στο σημείο αυτό, θα χρησιμοποιήσουμε μια εικόνα από την Κλασσική Φυσική για να εξηγήσουμε τη φυσική σημασία των  $\ell$  και  $m_{\ell}$ . Πρέπει να υπογραμμίσουμε όμως ότι η εικόνα αυτή χρησιμοποιείται για καθαρά εποπτικούς λόγους και δεν είναι καθόλου αυστηρή στα πλαίσια της Κβαντομηχανικής. Μπορούμε λοιπόν να

πούμε ότι ο  $\ell$  μας δίνει το μέτρο του διανύσματος της τροχιακής στροφορμής (που αποδεικνύεται ότι είναι ίσο με  $\mathcal{L}=\hbar[\ell(\ell+1)]^{1/2}$  αντί για  $\mathcal{L}=n\hbar$  που χρησιμοποίησε ο Bohr) και ο  $m_{\ell}$  την προβολή του διανύσματος αυτού (που αποδεικνύεται ότι είναι ίση με  $\hbar m_{\ell}$ ) σε κάποια κατεύθυνση αναφοράς. Στο Σχ. 13 φαίνεται η περίπτωση για  $\ell=1$  οπότε το  $m_{\ell}$  μπορεί να πάρει τις τιμές +1, 0 και –1. Ως κατεύθυνση αναφοράς διαλέγουμε τη θετική κατεύθυνση του άξονα z, συνεπώς οι τρείς τιμές του  $m_{\ell}$  αντιστοιχούν σε τρεις κατευθύνσεις του διανύσμα-



τος σε σχέση με αυτή («πάνω», «κάθετη» και «κάτω»). Όπως είπαμε και παραπάνω, πάλι κλασσικά, η κατεύθυνση του διανύσματος καθορίζει το επίπεδο της τροχιάς του ηλεκτρονίου. Παρατηρούμε λοιπόν ότι η εξίσωση Schrödinger προβλέπει κβάντωση (διακριτοποίηση) τόσο της ενέργειας όσο και του μεγέθους αλλά και της κατεύθυνσης της τροχιακής στροφορμής.

Είναι αξιοσημείωτο ότι η ενέργεια του συστήματος εξαρτάται μόνον από τον αριθμό n. Αυτό σημαίνει ότι οι καταστάσεις με ίδιο n αλλά διαφορετικές τιμές των  $\ell$  και  $m_\ell$  θα έχουν την ίδια ενέργεια, θα είναι δηλαδή ενεργειακά εκφυλισμένες. Αυτό φαίνεται στο ενεργειακό διάγραμμα του Σχ. 14 όπου έχουμε σημειώσει και τον φασματοσκοπικό συμβολισμό των καταστάσεων με τις αντιστοιχίες  $\ell=0$ -s,  $\ell=1$ -p,  $\ell=2$ -d,  $\ell=3 \rightarrow f$ ,  $\ell=4 \rightarrow g \kappa \lambda \pi$ . Etgi  $\pi.\chi$ .  $\eta$  κατάσταση 2s (με  $m_{\ell}=0$ ) θα είναι εκφυλισμένη με τις τρεις καταστάσεις 2p, κάθε μία εκ των οποίων αντιστοιχεί και σε διαφορετικό  $m_{\ell}$ =+1,0,-1 (σύνολο τέσσερις καταστάσεις). Λέμε ότι η τάξη του εκφυλισμού είναι 4. Στη γενικότερη περίπτωση είναι  $n^2$ . Ο εκφυλισμός ως προς το  $\ell$  είναι χαρακτηριστικό του ατόμου του Υδρογόνου και μόνο. Αίρεται στα βαρύτερα άτομα όπου η ενέργεια εξαρτάται και από αυτόν τον κβαντικό αριθμό. Αντίθετα ο εκφυλισμός ως προς το  $m_\ell$ , που ονομάζουμε περιστροφικό εκφυλισμό, επιβιώνει και στα περιπλοκότερα άτομα. Οφείλεται στο ότι η ενέργεια του συστήματος δε μπορεί να εξαρτάται από τον προσανατολισμό του ατόμου στο χώρο εφόσον η δυναμική ενέργεια U είναι σφαιρικά συμμετρική. Αίρεται μόνον όταν αίρεται και η σφαιρική συμμετρία και υπάρχει κάποια προτιμητέα διεύθυνση στο χώρο. Αυτό μπορούμε να το επιτύχουμε εάν π.χ. τοποθετήσουμε το άτομο σε ένα ηλεκτρικό ή μαγνητικό πεδίο. Οι κυματοσυναρτήσεις κάθε κατάστασης γράφονται  $\psi_{n,\ell,m_\ell}(\vec{\mathbf{r}})$ , ονομάζονται **ατο**μικά τροχιακά (για να τις διαφοροποιήσουμε από την έννοια της ατομικής τροχιάς) και εξαρτώνται και από τους τρεις κβαντικούς αριθμούς (που χαρακτηρίζουν κάθε κατάσταση). Η πυκνότητα πιθανότητας  $|\psi_{n,\ell,m_{\ell}}(\vec{\mathbf{r}}\,)|^2$ 



όμως δεν εξαρτάται από το πρόσημο του  $m_{\ell}$ . Στο Σχ. 15 φαίνονται οι πυκνότητες πιθανότητας για μερικές υδρογονικές καταστάσεις, χαρακτηρισμένες ως προς την τριάδα κβαντικών αριθμών  $(n, \ell, |m_{\ell}|)$ . Όλες «σβήνουν» σε μεγάλες αποστάσεις αφού το ηλεκτρόνιο είναι εγκλωβισμένο στο άτομο. Αν και δεν είναι σχεδιασμένες υπό κλίμακα, μπορούμε να αντιληφθούμε ότι όσο αυξάνει το n, τόσο αυξάνει και η πιθανότητα να



βρούμε το ηλεκτρόνιο σε μεγαλύτερες αποστάσεις από τον πυρήνα. Μεταξύ του πυρήνα και των μεγάλων αποστάσεων όπου η πυκνότητα πιθανότητας έχει πρακτικά μηδενιστεί, υπάρχουν και κάποιες άλλες περιοχές (*n-l-1* τον αριθμό) μηδενισμού της πιθανότητας (κοιτάξτε π.χ. τις κατανομές (2,0,0) και (3,0,0) όπου εμφανίζονται ένας και δύο εσωτερικοί δακτύλιοι μηδενικής πιθανότητας αντίστοιχα). Βλέπουμε επίσης ότι οι καταστάσεις *ns* είναι σφαιρικά συμμετρικές αλλά δεν ισχύει το ίδιο για l>0. Παρ' όλα αυτά, υπολογίζοντας τη μέση ακτίνα  $\langle r \rangle_{n\ell|m_l|}$  της κάθε κατανομής (με τον ίδιο τρόπο που υπολογίζουμε τη μέση τιμή  $\langle x \rangle$  στη μονοδιάστατη περίπτωση – σχέση (15) του *K*3) βρίσκουμε ότι είναι πολύ κοντά (αλλά όχι ακριβώς) σε αυτήν που προβλέπεται για τις ακτίνες των κυκλικών τροχιών του μοντέλου του Bohr για το ίδιο *n* (σχέση (6) που μπορούμε λοιπόν να χρησιμοποιούμε για εκτιμήσεις τάξεων μεγέθους του ατόμου σε κάθε *n*).

#### 4.2 Δεν Είναι Όλες οι Μεταβάσεις Επιτρεπτές – Κανόνες Επιλογής

Τα πολύ διαφορετικά σχήματα των ατομικών τροχιακών του Σχ. 15, μερικά εκ των οποίων είναι και αρκετά περίπλοκα, μας υποβάλουν στην ιδέα ότι πιθανόν να μη μπορούν να πραγματοποιηθούν μεταβάσεις μεταξύ δύο οιονδήποτε καταστάσεων, ακόμη και όταν η σχέση (13) ικανοποιείται. Πιθανόν δηλαδή τα σχήματα και, γενικότερα, οι ιδιότητες κάποιων τροχιακών «να μην ταιριάζουν» μεταξύ τους. Πράγματι η Κβαντομηχανική προβλέπει ότι κάποιες μεταβάσεις είναι απαγορευμένες και κάποιες επιτρεπτές. Για τις τελευταίες, μας λέει επίσης πόσο έντονες θα πρέπει να είναι στο φάσμα εκπομπής ή απορρόφησης (σε αντίθεση με το μοντέλο του Bohr που όπως είπαμε αδυνατεί να κάνει τέτοιες προβλέψεις). Ένας από τους λεγόμενους **κανόνες επιλογής** μας λέει ότι για να είναι επιτρεπτή μια μετάβαση θα πρέπει να ισχύει ότι,

$$\Delta \ell \equiv \ell_f - \ell_i = \pm 1 \tag{16}$$

ότι δηλαδή η διαφορά των κβαντικών αριθμών ℓ της αρχικής και τελικής κατάστασης πρέπει να είναι ίση είτε με +1 είτε με −1. Μερικές επιτρεπτές μεταβάσεις φαίνονται στο Σχ. 16. Π.χ. ηλεκτρόνιο που βρίσκεται

архіка́ отпу ката́отаоп  $n_i$ р µпореі́ va µеталпо́п́оєі єі́те ое ката́отаоп  $n_i$ s ( $\Delta \ell = -1$ ) єі́те ое ката́отаоп  $n_i$ d ( $\Delta \ell = +1$ ). Στην περі́πτωση όπου архіка́ то ηλектро́уіо βрі́окетаι ое ката́отаоп s профачώς іσχύει µо́уо  $\Delta \ell = +1$  (εφόσον  $\ell \ge 0$ ). Άρα τα s-ηλεκτρόνια µеталηδούν µо́уо σе р катаота́оеіς. Δηµιουργείται λοιπόν η εξής аπорі́а: οι катаота́оеіς s έχουν µηδενική στροφορµή (εφόσον, кβαντικά, το µέτρο της τροχιακής στροφορµής είναι ίσο µε  $\mathcal{L}=\hbar[\ell(\ell+1)]^{1/2}$ ,  $\ell=0\rightarrow \mathcal{L}=0$ ) ενώ οι катаота́оеіς p і́оп µе  $\hbar 2^{1/2}$ 



 $(\hbar[\ell(\ell+1)]^{1/2}$  με  $\ell=1)$ . Που βρήκε το άτομο την επιπλέον στροφορμή; Η απάντηση είναι ότι του την πρόσφερε το φωτόνιο το οποίο εκτός από ενέργεια και ορμή έχει και στροφορμή και μάλιστα ίση με  $\hbar 2^{1/2}$ . Στην

πραγματικότητα, ο κανόνας επιλογής (16) εκφράζει απλώς τη διατήρηση της στροφορμής του συστήματος άτομο-φωτόνιο και ισχύει και στα άτομα που είναι περιπλοκότερα του Υδρογόνου.

#### 4.3 Το Σπιν του Ηλεκτρονίου

Θεωρήστε την κλασσική εικόνα του Σχ. 17(α) όπου είναι σχεδιασμένη μια κυκλική τροχιά ενός ηλεκτρονίου. Η κίνηση αυτή ισοδυναμεί με ένα ηλεκτρικό ρεύμα *i* σε κυκλικό ρευματοφόρο αγωγό. Μόνο που, κατά σύμβαση και για ιστορικούς λόγους, το ρεύμα έχει αντίθετη φορά από τη φορά περιφοράς του ηλεκτρονίου. Είναι δε γνωστό από τον ηλεκτρομαγνητισμό ότι γύρω από ρευματοφόρο αγωγό δημιουργείται μαγνητικό πεδίο. Στην περί-



πτωση του κυκλικού βρόχου του Σχ. 17(α) το πεδίο αυτό είναι μορφολογικά πανομοιότυπο με αυτό ενός φυσικού μαγνήτη (Σχ. 17(β)) που αποτελεί ένα μαγνητικό δίπολο (βόρειος πόλος (N) και νότιος πόλος (S) σε κάποια απόσταση μεταξύ τους). Τα μαγνητικά δίπολα χαρακτηρίζονται από τη μαγνητική τους ροπή  $\vec{\mu}$  που έχει φορά από το νότιο προς το βόρειο πόλο. Η ροπή είναι δηλαδή παράλληλη στο μαγνητικό πεδίο στο εσωτερικό του μαγνήτη ή, στο παράδειγμα της περιφοράς του ηλεκτρονίου, στο κέντρο της τροχιάς του. Στο σημείο αυτό το μαγνητικό πεδίο  $\vec{B}$  είναι κάθετο στο επίπεδο της τροχιάς και η κατεύθυνσή του δίνεται από τον κανόνα του δεξιού χεριού ως προς το ρεύμα *i*. Η φορά του δηλαδή θα είναι αντίθετη της φοράς της τροχιακής στροφής του ηλεκτρονίου. Το μέτρο *B* του πεδίου μπορεί να βρεθεί από το νόμο Biot-Savart (που εξάγεται από τις εξισώσεις Μαxwell) και είναι ανάλογο του ρεύματος *i* ενώ το μέροτης του γινομένου του ρεύματος επί το εμβαδόν της κυκλικής τροχιάς. Αποδεικνύεται λοιπόν εύκολα ότι  $\vec{B}_{L} \propto \vec{\mu}_{L} \propto - \vec{L}$ . Ειδικά για τη ροπή, ισχύει ότι,

$$\vec{\mu}_{\mathcal{L}} = -\frac{e}{2c_{o}m_{e}}\vec{\mathcal{L}}$$
(17)

To συμπέρασμα που μπορεί να εξαχθεί από τα παραπάνω είναι ότι, *όταν η τροχιακή στροφορμή του ατόμου* είναι μη-μηδενική, τα άτομα συμπεριφέρονται σαν μικροί μαγνήτες. Επακόλουθα, αλληλεπιδρούν με άλλα μαγνητικά πεδία εντός των οποίων μπορούν να βρεθούν (όπως είναι π.χ. το πεδίο ενός άλλου μαγνήτη στη γειτονιά τους). Έστω λοιπόν ότι έχουμε μία δέσμη ατόμων Υδρογόνου που όλα βρίσκονται στην κατάσταση  $n\ell$ . Έστω επίσης ότι η δέσμη διαδίδεται ευθύγραμμα και περνά από μια περιοχή όπου υπάρχει (ανομοιογενές) μαγνητικό πεδίο. Λόγω των όσων είπαμε παραπάνω, περιμένουμε αποκλίσεις από την ευθύγραμμη διάδοση. Συγκεκριμένα, αποδεικνύεται ότι περιμένουμε διαχωρισμό της δέσμης σε  $2\ell+1$  τον αριθμό διαφορετικές δέσμες (μία για κάθε τιμή του  $m_\ell$ ). Π.χ. για  $\ell=1$  περιμένουμε να διαχωριστεί σε τρεις δέσμες (Σχ. 18(α)), μία για  $m_\ell=+1$  («επάνω»), μία για  $m_\ell=0$  («κέντρο») και μία για  $m_\ell=-1$  («κάτω»)). Οι μόνες καταστάσεις όπου δεν περιμένουμε διαχωρισμό είναι οι καταστάσεις ns ( $\ell=0$ ), όπως π.χ. η θεμελιώδης 1s ( $\ell=0\rightarrow \mathcal{L}=0-\Sigma$ χ. 18(β)). Και όμως, το πείραμα μας λέει ότι ακόμα και δέσμες με άτομα στη θεμελιώδη κατάσταση 1s διαχωρίζονται σε δύο («επάνω» και «κάτω» - Σχ. 17(γ)). Για να εξηγηθεί το δεδομένο αυτό πρέπει αναγκαστικά να



(α) Αναμενόμενος διαχωρισμός μιας δέσμης ατόμων Υδρογόνου σε κατάσταση p, όταν διέρχεται μέσα από μια περιοχή ανομοιογενούς μαγνητικού πεδίου.





(γ) Ακόμα όμως και γι' αυτές τις καταστάσεις η δέσμη διαχωρίζεται σε δύο («επάνω» και «κάτω»).

# Σχήμα 18.

δεχθούμε ότι το ηλεκτρόνιο έχει δική του στροφορμή που θα ονομάσουμε σπιν (spin) και θα συμβολίσουμε με  $\vec{s}$ . Η αγγλική ονομασία της υποδηλώνει «περιστροφή» του ηλεκτρονίου γύρω από τον εαυτό του («ιδιοπεριστροφή»), το οποίο όμως δεν είναι σωστό. Μπορούμε να πούμε ότι το σπιν είναι ενδογενής ιδιότητα του ηλεκτρονίου (και άλλων σωματιδίων όπως το φωτόνιο), δε συνδέεται με την κλασσική έννοια της περιστροφής αλλά συμπεριφέρεται και εκδηλώνεται ως στροφορμή. Π.χ. η στροφορμή  $\vec{L}$  είναι διαφορετική για τις

διάφορες καταστάσεις  $n\ell$ . Αντίθετα, το σπιν του ηλεκτρονίου  $\vec{s}$  είναι s=1/2 z'το ίδιο σε κάθε κατάσταση και δεν εξαρτάται από τις χωρικές συντεταγμένες (x,y,z). Όπου και να βρεθεί το ηλεκτρόνιο, το σπιν παραμένει το ίδιο. Κατ' αναλογία όμως με την τροχιακή στροφορμή, το μέτρο του κβαντικά θα είναι ίσο με  $\hbar[s(s+1)]^{1/2}$  όπου s είναι ο κβαντικός αριθμός του σπιν. Αντίστοιχα δε με την  $\vec{L}$ , θα υπάρχει και ένας άλλος κβαντικός αριθμός  $m_s$  που θα παίρνει τιμές  $m_s=+s,s-1,...,-s$ , δηλαδή σύνολο 2s+1 τιμές. Εφόσον το πείραμα μας λέει ότι έχουμε διαχωρισμό της αρχικής δέσμης (με άτομα στην 1s) σε δύο δέσμες θα έχουμε ότι 2s+1=2 και συνεπώς,



$$s = 1/2, \qquad m_s = \pm 1/2.$$
 (17)

Όπως φαίνεται στο Σχ. 19, ο κβαντικός αριθμός  $m_s$  μας δίνει την προβολή του  $\vec{s}$  στον άξονα z (διεύθυνση αναφοράς). Αποδεικνύεται ότι η αντίστοιχη μαγνητική ροπή δίνεται από τη σχέση,

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{c_o m_e} \vec{\mathbf{s}}$$
(18)

και προφανώς υπάρχει ένα μαγνητικό πεδίο που σχετίζεται με αυτή. Παρατηρήστε ότι ο παράγοντας της αναλογίας μεταξύ ροπής και σπιν είναι διπλάσιος αυτού της τροχιακής στροφορμής.

#### 4.4 Μερικές Πρώτες Συνέπειες της Υπαρζης του Σπιν του Ηλεκτρονίου

Η ύπαρξη του σπιν έχει πολλές και σημαντικές συνέπειες στην ατομική δομή. Κατ' αρχήν, σε κάθε μία κατάσταση  $(n, \ell, m_{\ell})$  όπως την περιγράψαμε μέχρι τώρα, το ηλεκτρόνιο θα μπορεί να έχει σπιν «επάνω» ή σπιν «κάτω». Συνεπώς, κάθε κατάσταση του ηλεκτρονίου θα χαρακτηρίζεται πλέον από **τέσσερις κβαντι**κούς αριθμούς  $(n, \ell, m_{\ell}, m_{s})$ . Κανονικά θα έπρεπε να συμπεριλάβουμε και τον αριθμό *s* αλλά δεν τον αναφέρουμε διότι παραμένει πάντα ο ίδιος. Για κάθε τιμή του *n* λοιπόν ο *εκφυλισμός διπλασιάζεται* και από  $n^{2}$  γίνεται  $2n^{2}$ . Στην πραγματικότητα αποδεικνύεται ότι εφόσον έχουμε τώρα δύο «μαγνητάκια», ένα που σχετίζεται με το  $\vec{L}$  και ένα με το  $\vec{s}$ , η αναμενόμενη μεταξύ τους αλληλεπίδραση προκαλεί μερική άρση του εκφυλισμού (δηλαδή κάποιες καταστάσεις ίδιου *n* θα έχουν ελαφρά διαφορετική ενέργεια από αυτή που προβλέπεται από την (11)). Εδώ όμως δεν θα ασχοληθούμε με το θέμα αυτό.

#### 5. Πολυηλεκτρονιακά Άτομα

#### 5.1Εισαγωγικές Παρατηρήσεις

Σε αντίθεση με το άτομο του Υδρογόνου, στα πολυηλεκτρονιακά άτομα η ακριβής λύση της εξίσωσης Schrödinger είναι από πολύ δύσκολη έως αδύνατη. Η αιτία μπορεί να γίνει κατανοητή μέσω του Σχ. 20 που αφορά το άτομο του He, δηλαδή το απλούστερο άτομο μετά το Η. Το άτομο αυτό έχει δύο ηλεκτρόνια ενώ ο πυρήνας του έχει ατομικό αριθμό Z=2 (δύο πρωτόνια). Κάθε ηλεκτρόνιο έλκεται από τον πυρήνα όπως και στο άτομο του Η. Οι έλξεις αυτές περιγράφονται από σφαιρικά συμμετρικές δυναμικές ενέργειες,



$$U_{1} = -\mathbf{k} \cdot \frac{2e^{2}}{r_{1}} \quad \text{kat} \quad U_{2} = -\mathbf{k} \cdot \frac{2e^{2}}{r_{2}}.$$
 (19)

όπως και στο Η. Από την άλλη όμως, τα δύο ηλεκτρόνια απωθούνται μεταξύ τους, οπότε η δυναμική ενέργεια του συστήματος ( $U_{tot}=U_1+U_2+U_{ee}$ ) θα περιέχει και τον απωστικό όρο,

$$U_{ee} = +\mathbf{k} \cdot \frac{e^2}{r_{12}}$$
 (20)

ο οποίος δεν είναι σφαιρικά συμμετρικός (το μέτρο  $r_{12}$  του  $\vec{\mathbf{r}}_{12}$  - Σχ. 20 - εξαρτάται από τις γωνίες που σχηματίζουν τα  $\vec{\mathbf{r}}_1$  και  $\vec{\mathbf{r}}_2$  με τους άξονες x, y και z). Είναι ακριβώς αυτός ο όρος που δεν επιτρέπει την ακριβή επίλυση του προβλήματος. Έτσι καταφεύγουμε σε προσεγγιστικές λύσεις όπου η συνολική δυναμική ενέργεια γράφεται στη μορφή  $U_{\text{tot}} \approx \overline{U_1} + \overline{U_2}$  και οι όροι  $\overline{U_1}$  και  $\overline{U_2}$ είναι μεν σφαιρικά συμμετρικοί, εμπεριέχουν δε την  $U_{ee}$  υπό τη μορφή «μέσης τιμής». Εδώ δεν μπορούμε να επεκταθούμε περισσότερο στο θέμα. Θα πούμε απλώς ότι με τη διαδικασία αυτή βρίσκουμε την ενέργεια της κατάστασης όπου βρίσκεται κάθε ηλεκτρόνιο. Η κατάσταση αυτή χαρακτηρίζεται και πάλι από τους τέσσερις κβαντικούς αριθμούς  $(n, \ell, m_t, m_s)$ , οι δυνατές τιμές των οποίων συνεχίζουν να δίνονται από τις (15α-γ) και (17). Μόνο που τώρα η ενέργεια της κάθε κατάστασης εξαρτάται τόσο από το *n* όσο και από το  $\ell$ . Η συνολική δε ενέργεια του ατόμου είναι το άθροισμα των ενεργειών όλων των ηλεκτρονίων του.

#### 5.2 Η Απαγορευτική Αρχή του Pauli & η Ατομική Δομή

Το πρώτο μεγάλο στοίχημα της προσεγγιστικής μεθόδου που αναφέραμε παραπάνω είναι ο ακριβέστερος δυνατός υπολογισμός της δομής και ενέργειας της θεμελιώδους (χαμηλότερης ενεργειακά) κατάστασης του ατόμου και, από αυτήν, της ενέργειας ιονισμού του (δηλαδή της ελάχιστης ενέργειας που πρέπει να προσφέρουμε στο άτομο ώστε να του αποσπάσουμε ένα ηλεκτρόνιο). Στο σημείο αυτό προκύπτει το ερώτημα: Σε ποια κατάσταση βρίσκεται κάθε ηλεκτρόνιο; Θα μπορούσαν άραγε όλα τα ηλεκτρόνια να βρίσκονται π.χ. στην 1s και να έχουν όλα σπιν με κατεύθυνση «επάνω»; Η απάντηση είναι ότι δεν μπορούν και αυτό οφείλεται στην **Απαγορευτική Αρχή του Pauli** που δηλώνει ότι σε ένα άτομο:

# «Δεν μπορούν να υπάρξουν δύο ή περισσότερα ηλεκτρόνια με την ίδια τετράδα κβαντικών αριθμών (n,l,m,ms)»

Παρόλο που η λέξη «Αργή» υποδηλώνει ότι η παραπάνω πρόταση είναι αξιωματική, στην πραγματικότητα αποδεικνύεται θεωρητικά, τόσο αυτή όσο και η αναγκαιότητα ύπαρξης του ηλεκτρονιακού σπιν. Η απόδειξη όμως απαιτεί το «πάντρεμα» της Κβαντικής θεωρίας με τη θεωρία της Σχετικότητας. Από την άλλη, αυτό που ενδιαφέρει εδώ είναι οι συνέπειες της Αρχής. Ας πάρουμε ξανά ως παράδειγμα το άτομο του He. Στη θεμελιώδη κατάσταση το ένα ηλεκτρόνιο θα βρίσκεται στην κατάσταση 1s και έστω ότι έχει σπιν «επάνω». Η κατάστασή του χαρακτηρίζεται από τους κβαντικούς αριθμούς  $(n, \ell, m_\ell, m_s) = (1, 0, 0, +1/2)$ . Το άλλο ηλεκτρόνιο μπορεί να βρίσκεται και αυτό στην 1s αλλά, εφόσον οι κβαντικοί αριθμοί  $n=1, \ell=0$  και  $m_\ell=0$  θα είναι οι ίδιοι με του πρώτου ηλεκτρονίου, θα πρέπει αναγκαστικά να έχει σπιν «κάτω», δηλαδή να χαρακτηρίζεται από την τετράδα  $(n, \ell, m_t, m_s) = (1, 0, 0, -1/2)$ . Για το άτομο του Li που έχει τρία ηλεκτρόνια (Z=3) τα δύο θα βρίσκονται στην 1s (το ένα με σπιν «επάνω» και το άλλο με «κάτω») και, εφόσον η 1s δεν χωράει άλλα ηλεκτρόνια (δεν έχει παρά μόνο μία τιμή για το  $m_{\ell}=0$ ), το τρίτο ηλεκτρόνιο θα αναγκαστεί να καταλάβει την αμέσως ενεργειακά υψηλότερη κατάσταση 2s. Όσο για την κατεύθυνση του σπιν του, παραθέτουμε εδώ ως μνημονικό κανόνα ότι τα «αζευγάρωτα» ηλεκτρόνια έχουν πάντα το σπιν «επάνω». Στο Σχ. 21 μπορούμε να παρακολουθήσουμε τη σταδιακή συμπλήρωση των διαφόρων τροχιακών των ατόμων (στοιχείων) όσο αυξάνει το Z από το 1 έως και το 18. Η συμπλήρωση πραγματοποιείται κατά υποφλοιούς (που χαρακτηρίζονται από το  $\ell$ ) ο καθένας εκ των οποίων ανήκει σε ένα φλοιό (που χαρακτηρίζεται από το n). Η χωρητικότητα κάθε υποφλοιού είναι 2·(2· $\ell$ +1) (δύο κατευθύνσεις του σπιν επί 2 $\ell$ +1 τιμές του  $m_{\ell}$ ) ενώ κάθε φλοιού  $2n^2$ . Άρα τα τροχιακά s συμπληρώνονται με 2 ηλεκτρόνια, τα p με 6 ηλεκτρόνια, τα d με 10, τα f με 14 κλπ. Πρώτα λοιπόν συμπληρώνεται η κατάσταση 1s (φλοιός και υποφλοιός συμπίπτουν) και στη συνέχεια η 2s.

Σχήμα 21.														
Ζ	Στοιχείο	1s	2s		2p		3s	3p			Ηλεκτρονιακή Διάταξη			
		$m_\ell=0$	0	+1	0	-1	0	+1 0 -1		-1				
1	Н	<b>↑</b>									1s			
2	Не	$\uparrow \downarrow$									$1s^2$			
Φλοιός n=1 και υποφλοιός s συμπληρωμένος														
3	Li	$\uparrow \downarrow$	1								$1s^22s$			
4	Be	$\uparrow \downarrow$	↑↓								$1s^22s^2$			
Υποφλοιός s συμπληρωμένος														
5	В	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow\downarrow$	1							$1s^22s^22p$			
6	С	$\uparrow \downarrow$	↑↓	Ť	1						$1s^22s^22p^2$			
7	Ν	$\uparrow\downarrow$	↑↓	1	1	1					$1s^22s^22p^3$			
8	0	$\uparrow \downarrow$	↑↓	↑↓	1	1					$1s^22s^22p^4$			
9	F	$\uparrow \downarrow$	↑↓	↑↓	↑↓	1					$1s^22s^22p^5$			
10	Ne	$\uparrow \downarrow$	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓					$1s^22s^22p^6$			
			Φλα	οιός <i>n</i> =	=2 και	Υποφ	λοιοί	s, p σι	ομπλη	οωμέν	01			
11	Na	↑↓	$\uparrow\downarrow$	↑↓	↑↓	↑↓	1				$1s^22s^22p^63s$			
12	Mg	$\uparrow \downarrow$	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓				$1s^22s^22p^63s^2$			
Υποφλοιός s συμπληρωμένος														
13	Al	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	↑↓	↑↓	↑↓	1			1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 3s <sup>2</sup> 3p			
14	S	↑↓	$\uparrow\downarrow$	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	1	$\uparrow$ $\uparrow$		$1s^22s^22p^63s^23p^2$			
15	Р	$\uparrow \downarrow$	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	1	$\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $1s^22s^22r$		$1s^22s^22p^63s^23p^3$			
16	S	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	↑↓	↑↓	↑↓	$\uparrow \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow$		1	$1s^{2}2s^{2}2p^{6}3s^{2}3p^{4}$			
17	Cl	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	↑↓	↑↓	↑↓	$\uparrow \downarrow$	↑↓	$1s^{2}2s^{2}2p^{6}3s^{2}3p^{5}$				
18	Ar	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$1s^22s^22p^63s^23p^6$			
	Υποφλοιοί s, p συμπληρωμένοι													

Μόλις συμπληρωθεί και αυτή αρχίζει να γεμίζει ο υποφλοιός 2p. Με τη συμπλήρωση του 2p συμπληρώνεται και ο φλοιός n=2. Παρατηρήστε επίσης στο Σχ. 21 ότι π.χ. για Z=5, 6 και 7 τα ηλεκτρόνια προτιμούν να έχουν διαφορετικές τιμές του  $m_\ell$  και παράλληλα σπιν παρά να ζευγαρώσουν στο ίδιο  $m_\ell$  με αντίθετα σπιν. Αποδεικνύεται ότι έτσι μειώνεται η συνολική ενέργεια του ατόμου (αρχή της ελάχιστης ενέργειας). Το ίδιο ισχύει και για τη σειρά συμπλήρωσης των υποφλοιών (1s-2s-2p-3s-3p-...) που υποδηλώνει ότι  $E_{1s} < E_{2s} < E_{2p} < E_{3s} < E_{3p}$  κλπ. Για Z>18, οι «εκπλήξεις» που εμφανίζονται κατά τη συμπλήρωση των υποφλοιών (ειδικά των d και f) οφείλονται ακριβώς στην ελαχιστοποίηση της ενέργειας της θεμελιώδους κατάστασης. Τυπικό παράδειγμα αποτελούν οι λεγόμενες Σπάνιες Γαίες (Rare Earths) όπου συμπληρώνεται ο υποφλοιός 3d. Π.χ. για Z=22 η ηλεκτρονιακή δομή της θεμελιώδους είναι [Ar]3d<sup>2</sup>4s<sup>2</sup> (όπου, για συντομογραφία, με [Ar] συμβολίζουμε την ηλεκτρονιακή δομή του στοιχείου Ar – Σχ. 21) και για Z=23 [Ar]3d<sup>3</sup>4s<sup>2</sup>. Ενώ λοιπόν θα περιμέναμε για το Z=24 τη δομή [Ar]3d<sup>4</sup>4s<sup>2</sup>, η πραγματική δομή αποδεικνύεται ότι είναι [Ar]3d<sup>5</sup>4s, στην οποία το άτομο έχει κατά τι μικρότερη ενέργεια από αυτή που θα είχε στην αναμενόμενη διάταξη. Στη συνέχεια, για Z=25 «τα πράγματα επανέρχονται στην τάξη» και έχουμε [Ar]3d<sup>5</sup>4s<sup>2</sup>. Τέτοιου είδους συμπεριφορές δεν είναι εύκολα προβλέψιμες και είμαστε αναγκασμένοι να βρούμε την πραγματική δομή μέσω του συνδυασμού πειραματικών και θεωρητικών αποτελεσμάτων.

Μέσω του Σχ. 21 εξηγείται ο Περιοδικός Πίνακας (Σχ. 22 και http://www.ptable.com/?lang=el) των στοιχείων καθώς και το μέγεθός τους, οι φυσικές τους ιδιότητες και η χημική τους συμπεριφορά. Π.χ. οι συμπληρωμένοι φλοιοί αλλά και υποφλοιοί (που αποδεικνύεται ότι είναι σφαιρικά συμμετρικοί όπως οι καταστάσεις  $\mathbf{s} - \Sigma \chi$ . 15) συνδέονται με μικρή έως μηδενική χημική δραστηριότητα. Αυτό εξηγεί τη χημική αδράνεια του He και των ευγενών αερίων όπως το Ne και το Ar. Ακόμη και εάν ένα στοιχείο έχει πολλά ηλεκτρόνια, αυτά που ανήκουν σε συμπληρωμένους εσωτερικούς φλοιούς και υποφλοιούς είναι χημικά ανενεργά. Είναι μόνο τα ηλεκτρόνια του εξώτατου φλοιού και υποφλοιού του ατόμου, δηλαδή τα ηλεκτρόνια σθένους, που καθορίζουν τη χημική του συμπεριφορά. Π.χ. άτομα όπως το Li και το Na έχουν ένα αζευγάρωτο ηλεκτρόνια τους ανήκουν σε συμπληρωμένους φλοιούς και υποφλοιούς. Η κοινή εξώτατη ηλεκτρονιακή

Explore key information about the chemical elements through this periodic table																			
Group	1	2	]	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Period																			
1	1 H			Σχήμα 22.											2 <b>He</b>				
2	з Li	4 Be											5 <b>B</b>	6 C	7 N	8 <b>O</b>	9 <b>F</b>	10 Ne	
3	<sup>11</sup> Na	12 Mg												13 Al	14 <b>Si</b>	15 <b>P</b>	16 <b>S</b>	17 Cl	18 <b>Ar</b>
4	19 K	20 <u>Ca</u>		21 <b>Sc</b>	22 <b>Ti</b>	23 V	24 <b>Cr</b>	25 Mn	26 <b>Fe</b>	27 <b>Co</b>	28 Ni	29 <b>Cu</b>	30 <b>Zn</b>	31 <b>Ga</b>	32 <b>Ge</b>	33 <b>As</b>	34 <b>Se</b>	35 <b>Br</b>	36 <b>Kr</b>
5	37 Rb	38 <b>Sr</b>		39 <b>Y</b>	40 <b>Zr</b>	41 Nb	42 <b>Mo</b>	43 <b>Tc</b>	44 <b>Ru</b>	45 <b>Rh</b>	46 <b>Pd</b>	47 <b>Ag</b>	48 <b>Cd</b>	49 <b>In</b>	50 <b>Sn</b>	51 <b>Sb</b>	52 <b>Te</b>	53 I	54 <b>Xe</b>
6	55 <b>Cs</b>	56 <b>Ba</b>	*	71 <b>Lu</b>	72 <b>Hf</b>	73 <b>Ta</b>	74 W	75 <b>Re</b>	76 <b>Os</b>	77 <b>Ir</b>	78 <b>Pt</b>	79 <b>Au</b>	80 <b>Hg</b>	81 <b>TI</b>	82 <b>Pb</b>	83 <b>Bi</b>	84 <b>Po</b>	85 <b>At</b>	86 <b>Rn</b>
7	87 <b>Fr</b>	88 <b>Ra</b>	**	103 Lr	104 <b>Rf</b>	105 Db	106 <b>Sg</b>	107 <b>Bh</b>	108 <b>Hs</b>	109 <b>Mt</b>	110 <b>Ds</b>	111 <b>Rg</b>	112 <b>Cn</b>	113 <b>Uut</b>	114 <b>Uuq</b>	115 Uup	116 Uuh	117 <b>Uus</b>	118 <b>Uuo</b>
			*	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70		
*Lanthanoids			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Но	En	Tm	Yb			
**Actinoids			**	89 Ac	90 <b>Th</b>	91 <b>Pa</b>	92 U	93 Np	94 <b>Pu</b>	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 <b>Es</b>	100 <b>Fm</b>	101 Md	102 No		

δομή τους είναι υπεύθυνη και για την παρεμφερή χημική τους συμπεριφορά που τα κατατάσσει στην ίδια ομάδα του Περιοδικού Πίνακα (Αλκάλια). Τα στοιχεία μιας άλλης ομάδας, αυτής των Αλογόνων (στο Σχ. 21 βλέπουμε τα μέλη τους F και Cl) έχουν την τάση να προσλάβουν ένα ηλεκτρόνιο ώστε συμπληρώσουν τον εξώτατο υποφλοιό τους (2p και 3p αντίστοιχα). Όσον αφορά τις περιόδους, κάθε περίοδος του Περιοδικού Πίνακα ξεκινά από ένα στοιχείο των Αλκαλίων (όπου «ανοίγει» νέος φλοιός) και καταλήγουν σε ένα στοιχείο των ευγενών αερίων (όπου «κλείνει» υποφλοιός p). Όμως αύξηση του *n* σημαίνει και αύξηση του μεγέθους του ατόμου. Πράγματι από το Σχ. 23 όπου φαίνεται ο «ατομικός όγκος» των στοιχείων, είναι φανερό

ότι έχουμε απότομες αυξήσεις σε κάθε «άνοιγμα» νέου φλοιού, δηλαδή σε κάθε Αλκάλιο. Όμως οι συμπληρωμένοι φλοιοί και υποφλοιοί εμφανίζουν μια συρρίκνωση μεγέθους και αυξημένη σταθερότητα σε σχέση



με τους ασυμπλήρωτους. Έτσι ακριβώς πριν και μετά από κάθε Αλκάλιο το μέγεθος των ατόμων είναι μικρότερο. Ως αποτέλεσμα αυτού, οι μέσες ακτίνες όλων των ατόμων κυμαίνονται στη στενή ζώνη των 0.05 έως 0.3 nm. Τέλος, όσο μεγαλύτερο το *n*, και ειδικά για τα ασυμπλήρωτα τροχιακά, τόσο ευκολότερο είναι να αποσπάσουμε ένα ηλεκτρόνιο σθένους από το άτομο. Πράγματι, όπως βλέπουμε στο Σχ. 24, για την ίδια ομάδα στοιχείων όσο μεγαλώνει το Z τόσο μικραίνει το δυναμικό ιονισμού τους. Τα Αλκάλια, με αζευγάρωτα s ηλεκτρόνια σθένους, έχουν τα μικρότερα δυναμικά ιονισμού ενώ τα ευγενή αέρια με τους συμπληρωμένους p υποφλοιούς τα μεγαλύτερα. Όλα τα υπόλοιπα στοιχεία έχουν δυναμικά ιονισμού μεταξύ των δύο ακραίων αυτών ομάδων.



Κλείνουμε την παρουσίαση αυτή επισημαίνοντας ότι τα άτομα είναι ιδιαίτερα σταθερές δομές. Το γεγονός ότι η μέγιστη τιμή του ατομικού αριθμού φτάνει μέχρι Z~100 δεν οφείλεται στην αστάθεια των ατόμων αλλά στην αστάθεια των πυρήνων τους.

#### 5.3 Μεταβάσεις στην Περιοχή των Ακτίνων Χ & του Ορατού-Υπεριώδους

Όταν ένα πολύ ενεργητικό ηλεκτρόνιο (ενέργεια στη περιοχή των keV) συγκρουστεί με κάποιο άτομο, μπορεί να ιονίσει ένα ηλεκτρόνιο του ατόμου που ανήκει σε κάποιον εσωτερικό συμπληρωμένο υποφλοιό (π.χ. του 1s - Σχ. 25). Δημιουργείται τότε μία «οπή» και το ιόν που απομένει είναι πλέον διεγερμένο. Τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια του ιόντος θα αποδιεγερθούν προσπαθώντας να καλύψουν την «οπή» έως ότου το ιόν βρεθεί στην θεμελιώδη του κατάσταση. Η αποδιέγερση των ηλεκτρονίων συνοδεύεται από εκπομπή φωτονίων των οποίων η συχνότητα (ή το μήκος κύματος) βρίσκονται στη φασματική περιοχή των ακτίνων Χ.



Αυτός η μηχανισμός είναι υπεύθυνος για τις διάκριτες φασματικές γραμμές που παρατηρούνται στο φάσμα των ακτίνων X και είναι χαρακτηριστικές κάθε μετάλλου του ηλεκτροδίου στο οποίο προσκρούουν τα ηλεκτρόνια (κοιτάξτε το Σχ. 16(α) του K2). Οι διάκριτες φασματικές γραμμές υπερτίθενται σε ένα συνεχές υπόβαθρο που προέρχεται από την η επιβράδυνση των αρχικών ηλεκτρονίων που προσπίπτουν στο στόχο (επιταχυνόμενα φορτία εκπέμπουν Η/Μ ακτινοβολία). Αυτού του τελευταίου είδους η εκπομπή, που είναι ανεξάρτητη του υλικού του ηλεκτροδίου, εξετάστηκε λεπτομερώς στην Γ' Λυκείου και δεν θα ασχοληθούμε



περαιτέρω με αυτήν. Αντίθετα, εάν θέλουμε να διεγείρουμε τα ηλεκτρόνια σθένους του ατόμου, οι αντίστοιχες μεταβάσεις αντιστοιχούν σε φωτόνια στο ορατό ή κοντινό υπεριώδες τμήμα του Η/Μ φάσματος μια οι ενεργειακές διαφορές μεταξύ των διαφόρων καταστάσεων των ηλεκτρονίων αυτών είναι της τάξης των μερικών eV (Σχ. 26).

# Κ4. Ερωτήσεις/Προβλήματα

1/2

 Να εκτιμήσετε το μέγεθος και την ενέργεια του ατόμου του Υδρογόνου στη θεμελιώδη του κατάσταση χρησιμοποιώντας την Αρχή της Απροσδιοριστίας, Δ*r*Δ*p*≥ħ. Δεχθείτε ότι Δ*p*≤*p* και Δ*r*≤*r* (*r* η ακτίνα του ατόμου). (Σημειώσεις Π. Τσέκερη, «Φυσική για Βιολογικές Επιστήμες», σελ. 86).

**2.** Στο προσεγγιστικό διπλανό σχήμα φαίνεται η πυκνότητα πιθανότητας  $|\psi|^2$  για μια κατάσταση *n*s. Οι φωτεινές περιοχές υποδηλώνουν μεγάλη πυκνότητα και οι σκοτεινές μηδενική. Ποιος ο κύριος κβαντικός αριθμός *n*;



**3.** Το απλά φορτισμένου ιόν του Ηε είναι υδρογονοειδές. Ο Ατομικός αριθμός του είναι Z=2. Βρείτε το δυναμικό ιονισμού του;

**4.** Ποια θα ήταν η χωρητικότητα των υποφλοιών s, p και d εάν ο κβαντικός αριθμός του σπιν του ηλεκτρονίου ήταν s=3/2; Ποια θα ήταν η χωρητικότητα του φλοιού με n=3;

5. Ποιες από τις παρακάτω ηλεκτρονιακές διατάξεις ουδετέρων ατόμων είναι παραδεκτές; Ποιες δεν είναι και γιατί; Ποιες από τις παραδεκτές διατάξεις αντιστοιχούν στη θεμελιώδη κατάσταση και ποιες σε διεγερμένες καταστάσεις;

(1)  $1s^22s^22p^23s$ , (2)  $1s^22s^22p^63s^23p^23d^{12}4s$ , (3) 1s2p, (4) 5s5p, (5)  $1s^23s3p$ , (6) 1s2s2p, (7)  $1s^22s2p3s$ (8)  $1s^22s^22p3s$ , (9)  $1s^22s^23p$ , (10)  $1s^22s^42p^6$ , (11)  $1s^22s^2$ , (12)  $1s^22p^5$ , (13)  $1s^22s^22p^6$ 

6. Οι ενέργειες των οκτώ πρώτων τροχιακών ενός ατόμου είναι:

 $E_{1s} = -1556 \text{ eV}, E_{2s} = -332 \text{ eV}, E_{2p} = -86 \text{ eV}, E_{3s} = -5.14 \text{ eV}$ 

 $E_{3p} = -3.10 \text{eV}, E_{4s} = -2.02 \text{ eV}, E_{3d} = -1.54 \text{ eV}, E_{4p} = -1.3 \text{ eV}$ 

Συμβολίζοντας τα ηλεκτρόνια με κουκίδες σχεδιάστε το ενεργειακό διάγραμμα για τη θεμελιώδη κατάσταση όταν το άτομο αυτό έχει 11 ηλεκτρόνια  $(1s^22s^22p^63s)$  και για τις τρεις διεγερμένες καταστάσεις  $(1s^22s^22p^63p, 1s^22s^22p^64s)$  και  $1s^22s^22p^63d$ . Βρείτε την ολική ενέργεια του ατόμου και για τις τρεις αυτές διεγερμένες διατάξεις και σχεδιάστε το αντίστοιχο ατομικό ενεργειακό διάγραμμα. Κατά τη σχεδίαση των διαγραμμάτων, όπου χρειάζεται, χρησιμοποιείστε μικτή, γραμμική και λογαριθμική κλίμακα.

7. Καταστάσεις Rydberg: Όταν ένα ηλεκτρόνιο σθένους ενός πολυηλεκτρονιακού ατόμου είναι πολύ υψηλά διεγερμένο (n>>1), αισθάνεται την έλξη του πυρήνα, φορτίου +Ze, μειωμένη κατά την άπωση των υπόλοιπων ηλεκτρονίων, συνολικού φορτίου –(Z–1)e, με αποτέλεσμα το «ενεργό» φορτίο που τελικά «βλέπει» να είναι Z<sub>eff</sub>=+1 (όπως και στο άτομο του Υδρογόνου). Όμως η πιθανότητα να βρεθεί το διεγερμένο ηλεκτρόνιο στην περιοχή του χώρου όπου βρίσκονται τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια, αν και μικρή, είναι μη-μηδενική. Λόγω αυτής της «εισχώρησης» του ηλεκτρονίου στο χώρο του ιόντος (και της αλληλεπίδρασής του με αυτό) τα ενεργειακά του επίπεδα δεν περιγράφονται από τη σχέση  $E_n = -Ryd/n^2$  αλλά από την  $E_{n\ell} = -Ryd/(n- \mu_\ell)^2$ , όπου  $\mu_\ell$  η λεγόμενη κβαντική ατέλεια. Στον παρακάτω πίνακα φαίνονται οι κβαντικές ατέλειες για το ηλεκτρόνιο σθένους των Αλκαλίων. (a) Τι παρατηρείτε; (β) Να βρείτε τις ενέργειες των καταστάσεων Rydberg του Να με n=10 και n=11 για  $\ell=0-2$  και να τις σχεδιάστε σε ποιοτικό ενεργειακό διάγραμμα όπου θα φαίνονται και οι θέσεις των αντίστοιχων ενεργειακών επιπέδων του Υδρογόνου. Τι παρατηρείτε;

	Κβαντική ατέλεια $\mu_\ell$									
Άτομο	$\ell$	0	1	2	3					
Li		0.40	0.05	0.00	0.00					
Na		1.35	0.85	0.01	0.00					
Κ		2.19	1.71	0.25	0.00					
Rb		3.13	2.66	1.34	0.01					
Cs		4.06	3.59	2.46	0.02					

8. Εκτιμήστε την τάξη μεγέθους της ενέργειας ιονισμού του U (Z=92) εάν δεν ίσχυε η απαγορευτική αρχή του Pauli, οπότε όλα τα ηλεκτρόνια θα βρίσκονταν στο φλοιό με n=1. Υποθέστε ότι το κάθε ηλεκτρόνιο στην περίπτωση αυτή «αισθάνεται» το πυρηνικό φορτίο μειωμένο κατά το φορτίο των μισών ηλεκτρονίων του φλοιού. Συγκρίνετε την τιμή που βρήκατε με την πραγματική τιμή των ~4 eV.

9. Στο διπλανό διάγραμμα είναι σχεδιασμένη η προσεγγιστική, σφαιρικά συμμετρική, δυναμική ενέργεια (έντονη συνεχής καμπύλη) ενός ηλεκτρονίου κάποιου πολυηλεκτρονιακού ατόμου. Εξηγήστε ποιοτικά τη μορφή της.

10. Στο διπλανό ενεργειακό διάγραμμα φαίνονται μερικές από τις καταστάσεις στις οποίες μπορεί να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σθένους ενός Αλκαλίου. Οι καταστάσεις των υπολοίπων Z-1 ηλεκτρονίων του ατόμου δεν φαίνονται στο διάγραμμα. Το ηλεκτρόνιο σθένους βρίσκεται αρχικά στην κατάσταση 4p. (a) Ποιοι και πόσοι οι δυνατοί δρόμοι αποδιέγερσής του μέχρι να καταλήξει στη θεμελιώδη (ή βασική) κατάσταση 3s; (β) Ποιες φασματικές γραμμές (κατά αυξανόμενο μήκος κύματος) εμφανίζονται στο φάσμα εκπομπής; (γ) Ποιες φασματικές γραμμές (κατά αυξανόμενο μήκος κύματος) στο φάσμα απορρόφησης του ατόμου αυτού όταν βρίσκεται αρχικά στη θεμελιώδη κατάσταση;









# Κ5. Στοιχεία Μοριακής Φυσικής

# 1. Εισαγωγικά Σχόλια

Τα μόρια είναι σταθερές δομές της ύλης που αποτελούνται από δύο ή περισσότερα άτομα. Δεν υπάρχει σαφές ανώτατο όριο στον αριθμό των ατόμων τους που μπορεί να φτάσει και τις μερικές χιλιάδες (όπως στο DNA). Η αιτία σχηματισμού των μορίων είναι η χαμηλότερη ενέργεια της θεμελιώδους (ή βασικής) κατάστασής τους σε σχέση με το άθροισμα των ενεργειών των ατόμων που τα απαρτίζουν, όταν τα τελευταία βρίσκονται πολύ μακριά το ένα από το άλλο. Τα εσωτερικά ηλεκτρόνια του κάθε ατόμου, που βρίσκονται σε πλήρως κατειλημμένους υποφλοιούς, παραμένουν πρακτικά ανεπηρέαστα από τη γειτνίαση μεταξύ των ατόμων. Η κατανομή τους στο χώρο δίνεται από τα ατομικά τροχιακά των ατόμων στα οποία ανήκουν. Έτσι, στη σύνδεση των ατόμων προς σχηματισμό μορίων υπεύθυνα είναι τα εξωτερικά ατομικά ηλεκτρόνια (σθένους) τα οποία ανακατανέμονται στο χώρο, κινούμενα πλέον όχι εντός μιας (περίπου) σφαιρικά συμμετρικής δυναμικής ενέργειας αλλά σε ένα πεδίο με δύο ή περισσότερα κέντρα θετικού φορτίου. Αγνοώντας προς στιγμή το σπιν, οι κυματοσυναρτήσεις που δίνουν την πυκνότητα πιθανότητας εύρεσης του κάθε ηλεκτρονίου σε κάποιο σημείο του χώρου ονομάζονται τώρα μοριακά τροχιακά και έχουν διαφορετική μορφή από αυτήν των ατομικών τροχιακών. Παρόλα αυτά, σε κάθε μοριακό τροχιακό μπορούν να βρεθούν το πολύ δύο ηλεκτρόνια με αντιπαράλληλα σπιν, λόγω της απαγορευτικής αρχής του Pauli.

Στα μόρια, πέραν της κίνηση των ηλεκτρονίων, υφίστανται και άλλα δύο είδη κίνησης που συνεισφέρουν στην μοριακή ενέργεια και δεν υπάρχουν στα άτομα. Το ένα είδος αφορά την ταλαντωτική κίνηση των πυρήνων και το άλλο είδος την περιστροφική κίνηση του μορίου ως ένα ενιαίο σώμα ή/και ενός τμήματος αυτού. Επακόλουθα, η ενεργειακή δομή των μορίων είναι πλουσιότερη αυτής των ατόμων. Εντούτοις, και παρά το κατά αρκετές τάξεις μεγέθους μεγαλύτερο πλήθος των μορίων, το κάθε ένα από αυτά έχει το δικό του χαρακτηριστικό φάσμα, που το ξεχωρίζει από όλα τα άλλα («δακτυλικό αποτύπωμα»).

# 2. Αλληλεπιδράσεις & Προσεγγίσεις

Αν και τα σημαντικότερα συμπεράσματα που θα προκύψουν από την παρακάτω παρουσίαση αφορούν όλα τα μόρια, εδώ θα περιορίσουμε κατ' αρχήν τη συζήτηση μόνο στα διατομικά συστήματα. Η κβαντομηχανική μελέτη του προβλήματος απαιτεί την εισαγωγή της δυναμικής ενέργειας του συστήματος στην εξίσωση Schrödinger. Μπορούμε να αντιληφθούμε τα είδη των αλληλεπιδράσεων σε ένα μόριο μέσω του Σχ. 1, όπου βλέπουμε δύο πυρήνες φορτίου  $+Z_1e$  και  $+Z_2e$  και δύο ηλεκτρόνια (έχουν παραληφθεί τυχόν άλλα ηλεκτρόνια του συστήματος).



Ακόμη και εάν το ένα από τα δύο ηλεκτρόνια έλειπε, θα είχαμε ένα σύστημα τριών φορτίων, δύο θετικά φορτισμένων και ενός αρνητικά φορτισμένου. Αυτό το σύστημα προσομοιάζει με το άτομο του He όπου όμως είχαμε δύο αρνητικά φορτισμένα σωμάτια (ηλεκτρόνια) και ένα θετικά φορτισμένο (πυρήνας). Και στις δύο περιπτώσεις όμως αναμένουμε ότι η δυναμική ενέργεια του συστήματος δεν θα είναι, εν γένει, σφαιρικά συμμετρική. Η μη-ύπαρξη σφαιρικής συμμετρίας είναι χαρακτηριστική των μορίων, με αποτέλεσμα να μην είναι πάντα φυσικά παραδεκτή η αντικατάσταση μη-σφαιρικά συμμετρικών όρων της δυναμικής ενέργειας με σφαιρικά συμμετρικές «μέσες τιμές» (όπως γίνεται στα άτομα). Η μεγαλύτερη δε περιπλοκότητα των μορίων φαίνεται και από το ότι σε αυτά πρέπει να ληφθούν υπ' όψη και οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των πυρήνων. Συγκεκριμένα, οι δύο πυρήνες του Σχ. 1 απωθούνται μεταξύ τους. Η άπωση αυτή περιγράφεται από τη δυναμική ενέργεια

$$U_{N_1N_2} = +\mathbf{k} \cdot \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R}$$
(1)

ενώ οι έλξεις των ηλεκτρονίων από τους πυρήνες από την δυναμική ενέργεια

$$U_{eN} = U_{eN_1} + U_{eN_2} = -\mathbf{k} \cdot \frac{Z_1 e^2}{r_{1N_1}} - \mathbf{k} \cdot \frac{Z_2 e^2}{r_{2N_2}}.$$
 (2)

Φυσικά, υπάρχει και η άπωση μεταξύ των ηλεκτρονίων, συνεπώς

$$U_{ee} = +\mathbf{k} \cdot \frac{e^2}{r_{12}}.$$
(3)

Η συνολική δυναμική ενέργεια του συστήματος λοιπόν θα γράφεται ως

$$U_{\rm tot} = U_{eN} + U_{NN} + U_{ee}.\tag{4}$$

Σημειώστε ότι, πρώτον, στις σχέσεις (1)-(3) τα σύμβολα R,  $r_{N_i e_i}$ , και  $r_{12}$  αναφέρονται στα (προφανώς θετικά) μέτρα των αντίστοιχων διανυσμάτων και, δεύτερον, δεν έχουμε θεωρήσει ακόμη κάποιο σημείο και σύστημα αναφοράς. Από το σημείο αυτό θα μετρούμε τις θέσεις των πυρήνων ( $\vec{\mathbf{R}}_i$ ) και των ηλεκτρονίων ( $\vec{\mathbf{r}}_i$ ) και μέσω αυτών των θέσεων θα εκφράσουμε και τα παραπάνω μέτρα. Ως σημείο αναφοράς θεωρούμε

το κέντρο μάζας τους συστήματος (δηλαδή των πυρήνων, εφόσον η μάζα τους είναι πολύ μεγαλύτερη αυτής των ηλεκτρονίων) ως προς το οποίο η συνολική ορμή των πυρήνων και ηλεκτρονίων είναι μηδενική. Είναι τότε προφανές ότι π.χ. τα μέτρα  $r_{N_i e_i}$  θα εξαρτώνται από τις διαπυρηνικές αποστάσεις. Ένα μονοδιάστατο παράδειγμα φαίνεται στο Σχ. 2 όπου έχουμε θεωρήσει δύο πυρήνες ίσης μάζας οπότε το κέντρο μάζας (x=0) βρίσκεται στο μέσον της απόστασης R. Στο σχήμα, η δυναμική ενέργεια  $U_{eN}$  που εκφράζει την έλξη του ηλεκτρονίου από τους πυρήνες εξαρτάται τόσο από τη θέση του x όσο και από την R.

$$U_{eN}(R;x) = -k \frac{Z_1 e^2}{|x + R/2|} - k \frac{Z_2 e^2}{|x - R/2|}$$



Μια χωρίς προσεγγίσεις λύση της εξίσωσης Schrödinger θα μας παρείχε, εκτός από τα μοριακά τροχιακά, τη συνολική ενέργεια Ε του μορίου σε κάθε κατάσταση. Η Ε περιλαμβάνει τόσο την ενέργεια των ηλεκτρονίων όσο και την ενέργεια ταλάντωσης και περιστροφής των πυρήνων. Στη γενικότερη περίπτωση όμως δεν μπορούμε να κάνουμε σαφή διαχωρισμό μεταξύ αυτών των ενεργειακών συνεισφορών διότι οι κινήσεις που τους αντιστοιχούν μπορεί να είναι συζευγμένες (εξαρτάται η μία από την άλλη). Από την άλλη, είναι προφανές ότι η αυστηρή λύση της εξίσωσης Schrödinger χρησιμοποιώντας τη δυναμική ενέργεια (4) δεν είναι σχεδόν ποτέ δυνατή. Συνεπώς είμαστε αναγκασμένοι να καταφύγουμε σε προσεγγίσεις. Η κυριότερη εξ' αυτών αφορά την αποσύζευξη της ηλεκτρονιακής ενέργειας από την ταλαντωτική και περιστροφική ενέργεια του μορίου (προσέγγιση Born-Openheimer) η οποία όμως δεν στερείται φυσικού περιεχομένου, ειδικά για τις θεμελιώδεις καταστάσεις των μορίων<sup>1</sup>. Σύμφωνα με την προσέγγιση αυτή, λόγω του ότι τα ηλεκτρόνια είναι πολύ ελαφρύτερα των πυρήνων θα κινούνται πολύ ταχύτερα από αυτούς. Επακόλουθα, η κίνηση των ηλεκτρονίων και συνεπώς και η ενέργειά τους προσαρμόζεται πρακτικά ακαριαία στην εκάστοτε διάταξη των πυρήνων. Αυτό συνεπάγεται ότι η εξίσωση Schrödinger του μορίου μπορεί να χωριστεί σε δύο απλούστερες εξισώσεις της ίδιας μορφής με αυτή (μία για την περιγραφή της συμπεριφοράς των ηλεκτρονίων και μία για αυτή των πυρήνων). Στην εξίσωση που αφορά τα ηλεκτρόνια ως δυναμική ενέργεια εισάγεται η (4) όπου όμως οι διαπυρηγικές αποστάσεις (στα  $\Sigma \gamma$ . 1 και 2 η R) θεωρούνται «παγωμένες», δηλαδή ως σταθερές παράμετροι από τις οποίες εξαρτάται η ηλεκτρονιακή ενέργεια, την οποία θα συμβολίσουμε με  $\varepsilon_{el}(R)$ . Η  $\varepsilon_{el}(R)$  προκύπτει από τη λύση αυτής της πρώτης εξίσωσης και παίζει το ρόλο της δυναμικής ενέργειας εντός της οποίας κινούνται οι πυρήνες (αυτή δηλαδή θα εισάγουμε στη δεύτερη εξίσωση, που αφορά την κίνηση των πυρήνων, ως δυναμική ενέργεια). Η λύση της δεύτερης εξίσωσης θα μας δώσει την ολική ενέργεια Ε του μορίου καθώς και τις κυματοσυναρτήσεις των στάσιμων καταστάσεων των πυρήνων που είναι συναρτήσεις μόνον του  $\mathbf{\tilde{R}}$  (Σχ. 1). Θεωρώντας επιπλέον (σε μία δεύτερη προσέγγιση) ότι η ταλαντωτική και περιστροφική κίνηση είναι και αυτές αποσυζευγμένες (που σημαίνει ότι κάθε μία συνδέεται με κάποια ενέργεια ταλάντωσης και περιστροφής, εvib και εrot αντίστοιχα, που μπορούν να υπολογιστούν ανεξάρτητα η μία από την άλλη), η ολική ενέργεια του συστήματος μπορεί να γραφεί ως,

$$E = \varepsilon_{\rm el} + \varepsilon_{\rm vib} + \varepsilon_{\rm rot}.$$
 (5)

Να σημειωθεί ότι η μεταφορική ενέργεια του μορίου ως σύνολο, ε<sub>trans</sub>, δεν συμπεριλαμβάνεται στην (5), εφόσον δε σχετίζεται με την εσωτερική δομή του και δεν παίζει κανένα ρόλο στην ερμηνεία των μοριακών φασμάτων. Τέλος, η (5) δεν περιλαμβάνει εκείνες τις ενεργειακές διορθώσεις που προέρχονται από τις αλληλεπιδράσεις στροφορμών (θυμηθείτε ότι κάθε στροφορμή αντιστοιχεί σε ένα «μαγνητάκι» που αλληλεπιδρά με άλλα μαγνητικά πεδία στη γειτονιά του). Ως παραδείγματα αυτών αναφέρουμε την αλληλεπίδραση της στροφορμής λόγω περιστροφής του μορίου με τα διάφορα είδη ηλεκτρονιακής στροφορμής (τροχιακή, σπιν), καθώς και τα σπιν των πυρήνων. Οι διορθώσεις αυτές (που ονομάζουμε λεπτή και υπέρλεπτη υφή) είναι όμως μικρές σε σχέση με τους όρους που περιλαμβάνονται στην (5).

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Οι περιπτώσεις κατάρρευσής της προσέγγισης Born-Openheimer αποτελεί σήμερα κεντρικό θέμα της Μοριακής Φυσικής.

# 3. Η Ηλεκτρονιακή Ενέργεια ε<sub>el</sub> & οι Χημικοί Δεσμοί

#### 3.1 Καμπύλες Ηλεκτρονιακής Ενέργειας

Μερικές τυπικές μοριακές καμπύλες ηλεκτρονιακών ενεργειών ε<sub>el</sub>(R) για ένα διατομικό μόριο φαίνονται στο Σχ. 3. άλλες Παρατηρούμε ότι καμπύλες εμφανίζουν ελάχιστο σε κάποια διαπυρηνική απόσταση ενώ άλλες όχι. Οι καταστάσεις που αντιστοιχούν σε καμπύλες με ελάχιστο ( $ε_{el,1}$ και  $ε_{el,3}$  στο Σχ. 3) ονομάζονται δεσμικά τροχιακά και σε αυτά δημιουργείται μόριο. Αντίθετα, οι καταστάσεις που αντιστοιχούν σε καμπύλες που δεν εμφανίζουν ελάχιστο (αλλά είναι καθαρά απωστικές -  $\varepsilon_{el,2}$ ) ονομάζονται αντιδεσμικά τροχιακά. Εάν η θεμελιώδης κατάσταση αντιστοιχεί σε αντιδεσμικό τροχιακό τότε δεν δημιουργείται καν σταθερό μόριο (τυπική περίπτωση τα



ευγενή αέρια). Εάν το αντιδεσμικό τροχιακό αντιστοιχεί σε διεγερμένη κατάσταση του μορίου τότε η διέγερσή του σε αυτή από τη θεμελιώδη κατάσταση έχει ως αποτέλεσμα τη διάσπασή του (γι' αυτό τα αντιδεσμικά τροχιακά αντιστοιχούν σε διασπαστικές καταστάσεις όπως ονομάζονται). Σε πολύ μεγάλες διαπυρηνικές αποστάσεις  $(R \to \infty)$  όλες οι καμπύλες  $\varepsilon_{el}(R)$  παίρνουν την αντίστοιχη τιμή της ενέργειας των δύο ελεύθερων ατόμων που απαρτίζουν το μόριο (κοιτάξτε την  $\varepsilon_{ell}(R)$  στο Σχ. 3). Αντίθετα, σε πολύ μικρές αποστάσεις  $(R \rightarrow 0)$  οι καμπύλες τόσο των διασπαστικών όσο και των δέσμιων καταστάσεων είναι απωστικές. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι σε μικρές αποστάσεις οι απωστικοί όροι  $U_{NN}$  και  $U_{ee}$  της ολικής δυναμικής ενέργειας (σχέση (4)) υπερτερούν της ελκτικής συνεισφοράς  $U_{eN}$ . Στο ελάχιστο της  $\varepsilon_{el}(R)$  – εάν υπάρχει – από την άλλη μεριά, οι απωστικές δυνάμεις εξισορροπούνται πλήρως από τις ελκτικές. Η θέση του ελαχίστου, R<sub>min</sub>, που ονομάζεται θέση ισορροπίας, αντιστοιχεί στο μήκος του δεσμού. Η ενεργειακή διαφορά  $DE = \varepsilon_{el}(R \rightarrow \infty) - \varepsilon_{el,min}$  ονομάζεται ενέργεια διάσπασης (dissociation energy), είναι δηλαδή η ενέργεια που πρέπει να προσφέρουμε στο μόριο ώστε να το διασπάσουμε στα ελεύθερα συστατικά του άτομα. Στην πραγματικότητα η πραγματική ενέργεια διάσπασης είναι κατά τι μικρότερη της DE μια και, εάν συμπεριλάβουμε και την ταλαντωτική και περιστροφική κίνηση των πυρήνων, η χαμηλότερη κατάσταση του μορίου είναι ελαφρά μεγαλύτερη της  $\varepsilon_{el,min}$  όπως θα δούμε παρακάτω (...τα κβαντικά σωματίδια δεν πέφτουν ποτέ στον πάτο του πηγαδιού και δεν είναι ποτέ ακίνητα...). Να παρατηρήσουμε τέλος ότι, για τις δέσμιες καταστάσεις, η  $R_{\min}$  αυξάνει όσο αυξάνει και η διέγερση του μορίου (παρατηρήστε π.χ. τις καμπύλες  $\varepsilon_{el,1}$  και ε<sub>el,3</sub> του Σχ. 3). Αυτό σημαίνει ότι στις διεγερμένες μοριακές καταστάσεις τα συστατικά του μορίου είναι χαλαρότερα συνδεδεμένα και το μήκος του δεσμού αυξάνεται.

Όσα είπαμε παραπάνω ισχύουν ποιοτικά και στα πολυατομικά μόρια. Η διαφορά βρίσκεται στο ότι σε αυτά δεν υπάρχει μία διαπυρηνική απόσταση *R* αλλά πολλές, που αντιστοιχούν η κάθε μία σε κάθε ζεύγος πυρήνων. Η ε<sub>el</sub> είναι συνάρτηση όλων αυτών των αποστάσεων που δημιουργούν πλέον μια υπερεπιφάνεια. Η σχεδίαση της ε<sub>el</sub> ως προς την υπερεπιφάνεια αυτή δεν είναι εύκολη. Μπορούμε όμως, σε πρώτη προσέγγιση, να εξετάσουμε κάθε δεσμό ξεχωριστά κατά την διεύθυνσή του.

#### 3.2 Κύρια Είδη Χημικών Δεσμών

Η κατανόηση των χαρακτηριστικών των κυριότερων ειδών των χημικών δεσμών μπορεί πιθανόν να επιτευχθεί ευκολότερα μέσω μιας ποιοτικής συζήτησης στην οποία θα κάνουμε χρήση του μονοδιάστατου δυναμικού του Σχ. 2 και των τριών περιπτώσεων που φαίνονται στο Σχ. 4. Ξεκινώντας από το Σχ. 4(α), θεωρήστε λοιπόν ένα «άτομο» που αποτελείται από ένα ιόν με φορτίο +Z<sub>1</sub>e και ένα ηλεκτρόνιο. Στο σχήμα (αριστερά) φαίνεται και η πυκνότητα πιθανότητας  $|\psi_{atom}|^2$  του ηλεκτρονίου που είναι εντοπισμένο στο χώρο του ιόντος και έχει (ηλεκτρονιακή) ενέργεια ε. Θεωρήστε ακόμη ότι ένα ιόν, με φορτίο  $+Z_1e$  επίσης, βρίσκεται σε μεγάλη απόσταση R από το άτομο. Όταν τα δύο συστήματα (άτομο-ιόν) πλησιάσουν το ένα κοντά στο άλλο και βρεθούν στη θέση ισορροπίας R<sub>min</sub>, το ηλεκτρόνιο μπορεί να κινηθεί σε μεγαλύτερη περιοχή από ότι στο άτομο. Ως αποτέλεσμα αυτού, η ενέργειά του ε' είναι μικρότερη από την αρχική και αυτό διότι είναι γνωστό ότι όταν το μήκος της περιοχής εντός της οποίας είναι εγκλωβισμένο ένα σωματίδιο μεγαλώνει, η ενέργειά του μειώνεται (Πρόβλημα 10 του φυλλαδίου προβλημάτων K3). Η ελάττωση της ηλεκτρονιακής ενέργειας του συστήματος είναι άλλωστε και η αιτία της δημιουργίας των μορίων ( $\Sigma \chi$ . 3,  $\varepsilon_{el,1}$ και ε<sub>el.3</sub>). Επιπλέον, το ηλεκτρόνιο «αισθάνεται» ισοβαρώς και τα δύο ελκτικά κέντρα (εφόσον και τα δύο είναι ίσου φορτίου) και αυτό αποτυπώνεται και στη νέα, μοριακή, πυκνότητα πιθανότητας ( $\Sigma \chi$ . 4(α)-δεξιά). Παρατηρούμε ότι η τελευταία παρουσιάζει μέγιστο στο μέσον των δύο πηγαδιών δυναμικής ενέργειας (μέγιστη πιθανότητα εύρεσης του ηλεκτρονίου στην περιοχή αυτή). Μπορούμε συνεπώς να πούμε ότι τα δύο ιόντα «μοιράζονται» το ηλεκτρόνιο. Αυτό το μοίρασμα είναι το κύριο χαρακτηριστικό του μη-πολικού ομοιοπολικού δεσμού.

Ας εξετάσουμε τώρα την περίπτωση όπου το ιόν που πλησιάζει έχει φορτίο κατά τι μεγαλύτερο του άλλου (ή, γενικότερα, η ελκτική δύναμη που ασκεί στο ηλεκτρόνιο είναι μεγαλύτερη από αυτή του ιόντος στο οποίο αυτό είναι αρχικά εγκλωβισμένο). Θα έχουμε δηλαδή  $Z_2>Z_1$ . Τότε, στη μοριακή κατάσταση που δημιουργείται, η πιθανότητα να βρούμε το ηλεκτρόνιο κοντύτερα στο ιόν φορτίου  $+Z_2e$  είναι μεγαλύτερη. Η μοριακή πυκνότητα πιθανότητας θα αποτελείται από δύο λοβούς, ένα μεγαλύτερο (στην περιοχή του ιόντος με  $+Z_2e$ ) και ένα μικρότερο (στην περιοχή του  $+Z_1e$ ) – Σχ. 4(β). Πάλι το ηλεκτρόνιο «μοιράζεται» μεταξύ των δύο ελκτικών κέντρων. Τη φορά αυτή όμως το μοίρασμα δεν είναι ισοβαρές, γεγονός που χαρακτηρίζει τον **πολικό ομοιοπολικό δεσμό**.

Εξετάζουμε τέλος την περίπτωση  $Z_2 >> Z_1$ . Παρατηρούμε στο Σχ. 4(γ)-δεξιά, ότι η μοριακή πυκνότητα πιθανότητας μοιάζει πολύ με την αρχική ατομική (Σχ. 4(γ)-αριστερά) μόνο που έχει μετατοπιστεί

στην πλευρά του πολύ ισχυρότερο ελκτικού κέντρου στο οποίο και «ανήκει» πλέον το ηλεκτρόνιο. Εδώ λοιπόν δεν υπάρχει μοίρασμα (ισοβαρές ή ανισοβαρές) αλλά πλήρης μεταφορά φορτίου από το ασθενές στο ισχυρό ελκτικό κέντρο. Η παραπάνω εικόνα χαρακτηρίζει τον **ιοντικό (ή ετεροπολικό) δεσμό**.



# Σχήμα 4.

Ο περιορισμός της παραπάνω συζήτησης σε ένα «άτομο» και ένα «θετικό ιόν» έγινε καθαρά για απλουστευτικούς λόγους. Στη συντριπτική πλειοψηφία των περιπτώσεων έχουμε ουδέτερα άτομα που πλησιάζουν μεταξύ τους και στη δημιουργία των χημικών δεσμών συμμετέχουν περισσότερα του ενός ηλεκτρόνια σθένους. Τα παραπάνω συμπεράσματα όμως παραμένουν ως έχουν. Το πόσο ισχυρό είναι ένα «ελκτικό κέντρο» μπορεί να χαρακτηριστεί μέσω της, κατά βάση ποιοτικής έννοιας, της ηλεκτραρνητικότητας, αλλά και του ποσοτικού μεγέθους της μόνιμης ηλεκτρικής διπολικής ροπής μ<sub>e</sub>.

Ασθενές ελκτικό κέντρο συνεπάγεται μικρή ηλεκτραρνητικότητα και ισχυρό ελκτικό κέντρο μεγάλη. Όσο για την ηλεκτρική διπολική ροπή, υπενθυμίζουμε ότι πρόκειται για ένα διανυσματικό μέγεθος που χαρακτηρίζει ένα ηλεκτρικό δίπολο, δηλαδή ένα σύστημα δύο φορτίων, +*q* και –*q*, που απέχουν μεταξύ τους απόσταση *d*. Το διάνυσμα έχει κατεύθυνση από το αρνητικό προς το θετικό φορτίο και μέτρο

$$\mu_e = q \cdot d \tag{6}$$

όπου στη περίπτωση που ενδιαφέρει εδώ έχουμε d=R<sub>min</sub>. Η μετατόπιση των ηλεκτρονίων προς το ισχυρότερο ελκτικό κέντρο, ακόμη και εάν δεν είναι πλήρης, δημιουργεί «περίσσεια» αρνητικού φορτίου στην πιο ηλεκτραρνητική πλευρά της μετατόπισης και,

αναγκαστικά, έλλειψη αρνητικού φορτίου (ισοδύναμα, «περίσσεια» θετικού) στη λιγότερο ηλεκτραρνητική πλευρά, με αποτέλεσμα την ύπαρξη ηλεκτρικής διπολικής ροπής (Σχ. 5). Οι μη-πολικοί ομοιοπολικοί δεσμοί των μορίων έχουν φυσικά μηδενική ηλεκτρική διπολική ροπή.



Οι πολικοί ομοιοπολικοί δεσμοί έχουν μη-μηδενική μ<sub>e</sub>, το μέγεθος της οποίας εξαρτάται από τη σχετική διαφορά «ισχύος» των ελκτικών κέντρων (σχετική διαφορά ηλεκτραρνητικότητας). Σε ένα μόριο με πολλούς δεσμούς η συνολική ηλεκτρική διπολική ροπή είναι το (διανυσματικό) άθροισμα των ροπών των επιμέρους δεσμών. Υπάρχει δε περίπτωση η συνολική ηλεκτρική διπολική ροπή του μορίου να είναι μηδενική ακόμη και εάν μερικοί ή όλοι οι δεσμοί του να είναι πολικοί. Η σημασία της ύπαρξης και του μεγέθους της ηλεκτρικής διπολικής ροπής είναι μεγάλη. Π.χ. από την τιμή της εξαρτάται εάν μία χημική ουσία θα βρίσκεται στην αέρια, υγρή ή στερεή φάση σε θερμοκρασία περιβάλλοντος. Επίσης από αυτήν εξαρτάται η παρατήρηση ή όχι των (ταλαντωτικών και περιστροφικών) μοριακών φασμάτων. Στις υπο-ενότητες που ακολουθούν θα δώσουμε μερικά τυπικά παραδείγματα των παραπάνω δεσμών.

3.2.1 Ιοντικός (ή Ετεροπολικός) Δεσμός. Ξεκινάμε με τον ιοντικό δεσμό γιατί είναι ο ισχυρότερος όλων μια και οφείλεται στην ηλεκτροστατική έλξη Coulomb ανάμεσα σε δύο αντιθέτως φορτισμένα ιόντα. Ένα

γνωστό παράδειγμα μορίου που οφείλει την ύπαρξή του στον ιοντικό δεσμό είναι το μόριο τού χλωριούχου νατρίου, NaCl, δηλαδή τού κοινού μαγειρικού αλατιού. Η ηλεκρονιακή δομή του Na είναι  $1s^22s^22p^63s$ . Η δομή αυτή ιονίζεται εύκολα αποβάλλοντας το ηλεκτρόνιο σθένους 3s, οπότε και το άτομο μετατρέπεται σε ιόν Na<sup>+</sup>. Η δομή του ιόντος  $(1s^22s^22p^6)$  είναι ιδιαίτερα σταθερή (δομή ευγενούς αερίου). Από την άλλη, η ηλεκτρονιακή δομή του Cl είναι



 $1s^22s^22p^63s^23p^5$ . Η κατάσταση του συμπληρωμένου υποφλοιού  $3p^6$  είναι ενεργειακά σταθερότερη από την  $3p^5$  όπου λείπει ένα ηλεκτρόνιο, με αποτέλεσμα το Cl να έχει μεγάλη τάση να προσλάβει ένα ηλεκτρόνιο (μεγάλη ηλεκτραρνητικότητα) και να μετατραπεί σε αρνητικό ιόν Cl<sup>-</sup> με δομή  $1s^22s^22p^63s^23p^6$ . Στην πραγματικότητα λοιπόν αντί για NaCl είναι σωστότερο να γράφουμε Na<sup>+</sup>Cl<sup>-</sup>. Η θέση ισορροπίας  $R_{min}$  είναι
ίση με 0.24 nm (και η ενέργεια διάσπασης 4.2 eV). Εάν στη σχέση (6) αντικαταστήσουμε  $d=R_{\min}$  και q=e βρίσκουμε μια τεράστια τιμή για την ηλεκτρική διπολική ροπή που εξηγεί το λόγο για τον οποίο σε θερμοκρασία περιβάλλοντος το χλωριούχο νάτριο είναι στερεό και στην πραγματικότητα δεν έχει καν νόημα να μιλάμε για επιμέρους μόρια μια και ο κρύσταλλος του αλατιού είναι ένα ενιαίο ιοντικό πλέγμα (Σχ. 6).

**3.2.2** Ομοιοπολικός δεσμός. Τυπικά παραδείγματα μορίων των οποίων τα άτομα συγκρατούνται με μη-πολικούς ομοιοπολικούς δεσμούς είναι τα ομοατομικά διατομικά μόρια όπως π.χ. το μόριο του H<sub>2</sub>. Στο μόριο αυτό οι δύο πυρήνες μοιράζονται εξίσου τα δύο ηλεκτρόνια. Είναι σύνηθες να σχεδιάζουμε το δεσμό αυτό με το υπεραπλουστευμένο σκαρίφημα του Σχ. 7(α). Πολύ κοντύτερα στην πραγματικότητα βρίσκονται τα Σχ. 7(β) και (γ) όπου απεικονίζονται τα ατομικά (1s) και το μοριακό τροχιακό (σ) αντίστοιχα. Προσέξτε την απώλεια σφαιρικής συμμετρίας και το γεγονός ότι τα δύο ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν το ίδιο μοριακό τροχιακό έχουν τα σπιν τους αντιπαράλληλα λόγω της απαγορευτικής αρχής του Pauli.





Τυπικά παραδείγματα μορίων όπου τα άτομα που τα απαρτίζουν συγκρατούνται με πολικούς ομοιοπολικούς δεσμούς είναι τα ετεροατομικά διατομικά μόρια και το H<sub>2</sub>O. Θα ασχοληθούμε λεπτομερέστερα με το τελευταίο λόγω της τεράστιας βιολογικής του σημασίας. Η ατομική ηλεκτρονιακή δομή του Οξυγόνου είναι  $1s^22s^22p^4$ . Όπως φαίνεται και από το Σχ. 21 του K4, από τα τέσσερα 2p ηλεκτρόνια τα δύο είναι ζευγαρωμένα ενώ τα άλλα δύο καταλαμβάνουν καταστάσεις με διαφορετικό  $m_{\ell}$ . Από το Σχ. 15

του Κ4 βλέπουμε ότι το σχήμα των τροχιακών 2p μοιάζει με ένα «οκτώ» και οι δύο καταστάσεις διαφορετικού m είναι ισοδύναμες (σύμφωνα με Χημικούς τους που αποφεύγουν τη χρήση του δύο  $m_{\ell}$ με «οκτώ» κάθετων μεταξύ τους



διευθύνσεων (Σχ. 8(α)). Σε κάθε διεύθυνση τροχιακού 2p του Οξυγόνου δημιουργείται ένας δεσμός με το 1s ηλεκτρόνιο του κάθε ενός από τα δύο άτομα Υδρογόνου. Δύο ποιοτικά σχήματα του μορίου του νερού φαίνονται στα Σχ. 8(β) και 8(γ). Στο τελευταίο παρατηρούμε ότι, λόγω της μεγαλύτερης ηλεκτραρνητικότητας του Οξυγόνου σε σχέση με το Υδρογόνο, υπάρχει περίσσεια αρνητικού φορτίου στο Ο και περίσσεια θετικού σε κάθε Η. Συνεπώς και οι δύο δεσμοί είναι έντονα πολικοί και, επιπλέον, η συνολική μόνιμη ηλεκτρική διπολική ροπή του μορίου είναι μη-μηδενική. Στη μεγάλη πολικότητα του μορίου του νερού οφείλεται κατ' αρχήν το γεγονός ότι η γωνία που σχηματίζουν οι δεσμοί δεν είναι 90° (που σχηματίζουν τα 2p τροχιακά του ελεύθερου Ο) αλλά 104° (Σχ. 8(β),(γ)). Η αύξηση της γωνίας οφείλεται στην αμοιβαία άπωση των ομόσημα φορτισμένων Υδρογόνων. Επίσης, η μεγάλη πολικότητα είναι υπεύθυνη και για άλλες ιδιότητες του νερού. Σε αυτήν π.χ. οφείλεται το ότι το νερό είναι υγρό όχι μόνο σε θερμοκρασία περιβάλλοντος αλλά, γενικότερα, σε πολύ υψηλότερες θερμοκρασίες από άλλες ενώσεις συγκρίσιμου μοριακού βάρους. Αυτό συμβαίνει διότι τα «αρνητικότερα» μέρη του (Ο) έλκονται από τα «θετικότερα» (Η) άλλων γειτονικών μορίων με αποτέλεσμα τα μόρια να έρχονται πολύ κοντά το ένα στο άλλο (χαρακτηριστικό της υγρής φάσης). Στην πολικότητα οφείλεται επίσης και ότι το νερό είναι ένα πάρα πολύ καλός υγρός διαλύτης (αλλά μόνον άλλων πολικών μορίων) και ότι εμφανίζει πολύ μεγάλη θερμοχωρητικότητα. Συνεπώς, μπορεί να απορροφήσει (ή να αποβάλλει) μεγάλα ποσά θερμότητας χωρίς αισθητή αύξηση (μείωση) της θερμοκρασίας του και τούτο διότι το μεγαλύτερο μέρος της προσφερόμενης θερμότητας ξοδεύεται στο να «ξεκολλήσει» το ένα μόριο από το άλλο και μόνο ένα μικρό μέρος της μετατρέπεται σε άτακτη θερμική κίνηση. Η βιολογική σημασία της μεγάλης θερμογωρητικότητας του νερού είναι τεράστια. Η μεγάλη ταχύτητα των χημικών αντιδράσεων εντός του κυττάρου οφείλεται στη δράση απόλυτα εξειδικευμένων καταλυτών (των ενζύμων) των οποίων η καταλυτική δράση είναι ιδιαίτερα ευαίσθητη και στις πιο μικρές αλλαγές της θερμοκρασίας. Αλλά τα νερό δρα θερμορυθμιστικά και σε πλανητικό επίπεδο μια και τα 3/4 του πλανήτη είναι καλυμμένα από θάλασσα. Να αναφέρουμε τέλος ότι η «ανώμαλη» διαστολή του νερού εξηγείται επίσης μέσω της πολικότητας αλλά και του τριγωνικού σχήματός του. Και αυτό διότι ο πάγος έχει κρυσταλλική δομή. Αυτό σημαίνει ότι, σε αντίθεση με την υγρή φάση, τα μόρια του νερού έχουν καθορισμένη χωρική διάταξη. Η διάταξη που ελαχιστοποιεί την ενέργεια του συστήματος είναι αυτή που φέρνει κοντύτερα τις ετερόσημα φορτισμένες γωνίες των γειτονικών μορίων.

Ένα απλοποιημένο δυσδιάστατο κρυσταλλικό πλέγμα (όπου έχουμε πάρει για σχεδιαστική ευκολία τη γωνία των δύο δεσμών να είναι ίση με 120°) φαίνεται στο Σχ. 9. Παρατηρήστε ότι κάθε κορυφή του Οξυγόνου ενός μορίου συνορεύει με δύο άτομα Υδρογόνου δύο άλλων διαφορετικών μορίων. Στη διάταξη αυτή λοιπόν δημιουργείται τεράστιος κενός χώρος με αποτέλεσμα την μείωση της πυκνότητάς του. Αυτός είναι και ο λόγος που ο πάγος επιπλέει στο υγρό νερό (όπου οι θέσεις και ο σχετικός προσανατολισμός των μορίων αλλάζουν διαρκώς αλλά η διάταξη τους είναι κατά πολύ πυκνότερη)<sup>2</sup>.



<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Η συζήτηση για τις ιδιότητες του νερού των ενοτήτων 3.2.2 & 6.1, το Σχ. 9 καθώς και η συζήτηση που ακολουθεί παρακάτω για τους δεσμούς van der Waals και Υδρογόνου, έχουν μεταφερθεί σχεδόν αυτούσια από τα βιβλία Κβαντομηχανική ΙΙ (1986) και Κβαντομηχανική Ι - αγνώστου έτους - Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης) του Στέφανου Τραχανά.

### 3.3 Άλλα Είδη Δεσμών Ι: Δεσμός van der Waals

Το γεγονός ότι σε χαμηλές θερμοκρασίες και ατμοσφαιρική πίεση οι περισσότερες αέριες ουσίες πρώτα υγροποιούνται και κατόπιν στερεοποιούνται υποδηλώνει ότι όταν τα μόριά τους πλησιάζουν αρκετά κοντά αναπτύσσονται ελκτικές μεταξύ τους δυνάμεις. Αυτό είναι βέβαια αναμενόμενο για τα μόρια με μόνιμη διπολική ηλεκτρική ροπή (τα οποία άλλωστε είναι όπως είπαμε συνήθως υγρά σε ατμοσφαιρική πίεση και θερμοκρασία περιβάλλοντος). Όμως τέτοιες δυνάμεις αναπτύσσονται και μεταξύ μορίων που δεν έχουν μόνιμη ηλεκτρική ροπή. Οι δυνάμεις αυτές ονομάζονται δυνάμεις van der Waals και οφείλονται στην επα-

γομένη ηλεκτρική διπολική ροπή που προκαλείται από τις αμοιβαίες παραμορφώσεις των πυκνοτήτων πιθανότητας των δύο μορίων (Σχ. 10). Οι δεσμοί van der Waals είναι εξαιρετικά



ασθενικοί και πολύ μικρής εμβέλειας αλλά η ισχύς τους αυξάνεται με την επιφάνεια των συμμετεχόντων μορίων. Αυτό φαίνεται πολύ καθαρά στους Υδρογονάνθρακες των οποίων τα μόρια δεν είναι πολικά. Τα μικρότερα μέλη τους είναι λοιπόν αέρια. Όσο όμως το μοριακό τους βάρος (και επακόλουθα και η επιφάνειά τους) αυξάνει, οι δυνάμεις van der Waals γίνονται αρκετά ισχυρές ώστε να προκαλούν την υγροποίηση ή ακόμη και τη στερεοποίηση των μορίων αυτών ακόμη και σε θερμοκρασία περιβάλλοντος.

#### 3.4 Άλλα Είδη Δεσμών ΙΙ: Δεσμός Υδρογόνου

Ας κοιτάξουμε τώρα προσεκτικότερα τις ελκτικές δυνάμεις που δημιουργούνται μεταξύ δύο μορίων νερού στην υγρή φάση. Οι δυνάμεις αυτές αναπτύσσονται μεταξύ των ετερόσημα φορτισμένων περιοχών του κάθε μορίου. Στο Σχ. 11 οι παχιές γραμμές δηλώνουν το συμβατικό πολικό ομοιοπολικό δεσμό του Η με

το Ο (εντός του ιδίου μορίου) και η διακεκομμένη την ασθενέστερη σύνδεση του ιδίου ατόμου Υδρογόνου με το άτομο του Οξυγόνου ενός άλλου μορίου. Με αυτή την αμφίπλευρη δράση του, το Υδρογόνο λειτουργεί ως ένα είδος γέφυρας που διασυνδέει δύο άτομα Οξυγόνου και αυτός ακριβώς ο «δεσμός»



αποκαλείται δεσμός Υδρογόνου. Όμως ο δεσμός Υδρογόνου είναι κάτι περισσότερο από αυτό που υποδηλώνει το Σχ. 11. Κατ' αρχήν, είναι πολύ ισχυρότερος από ότι θα περίμενε κανείς. Και ένας πρώτος λόγος γι' αυτό είναι το πολύ μικρό μέγεθος του ιόντος Υδρογόνου. Το H<sup>+</sup> είναι απλώς ένα πρωτόνιο (και άρα έχει πυρηνικές διαστάσεις ~10<sup>-14</sup> m) ενώ τα ιόντα όλων των άλλων ατόμων έχουν ατομικά μεγέθη (~10<sup>-10</sup> m). Λόγω ακριβώς του πολύ μικρού μεγέθους του το H<sup>+</sup> (έστω και εάν δεν είναι πλήρως ιονισμένο) μπορεί να έρθει πολύ κοντά με το αρνητικό Οξυγόνο ενός άλλου μορίου και έτσι να ασκηθεί μεταξύ τους μια πολύ ισχυρή ηλεκτροστατική έλξη. Υπάρχει όμως και ένας δεύτερος λόγος, καθαρά κβαντικός, για την

μεγαλύτερη του αναμενόμενου ισχύ του δεσμού αυτού. Ο λόγος αυτός ακούει στο όνομα «φαινόμενο σήραγγας». Η βασική ιδέα φαίνεται στο Σχ. 12. Όταν λοιπόν τα δύο άτομα Ο πλησιάσουν, το πρωτόνιο



υπόκειται στην έλξη και των δύο. Οι δυνάμεις που του ασκούνται περιγράφονται από μία καμπύλη δυναμικής ενέργειας U με δύο ελάχιστα, όπως φαίνεται και στο ποιοτικό διάγραμμα του Σχ. 12(α). Κλασσικά, εφόσον το πρωτόνιο είναι αρχικά εγκλωβισμένο στο πρώτο ελάχιστο εκεί και θα παραμείνει μια και δεν του επιτρέπεται να αποδράσει. Κβαντομηχανικά, η πυκνότητα πιθανότητας του  $p^+$  είναι πράγματι αρχικά εντοπισμένη στο ένα από τα δύο πηγάδια. Όμως αυτή η πυκνότητα πιθανότητας εκτείνεται και στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή με αποτέλεσμα το πρωτόνιο να έχει τη δυνατότητα να περάσει στο άλλο ελάχιστο δυναμικής ενέργειας μέσω του φαινομένου σήραγγας. Η πιθανότητα διέλευσης του φράγματος  $(T \sim \exp\left(-2L\sqrt{2m(U_{max} - E)}/\hbar\right))$  είναι μάλιστα αρκετά μεγάλη λόγω (ι) της μικρής μάζας του πρωτονίου, (ιι) του μικρού εύρους της κλασικά απαγορευμένης περιοχής (L~10 pm) και (ιιι) της μικρής διαφοράς μεταξύ του ύψους του φράγματος και της ενέργειας του  $p^+$  ( $U_{\text{max}} - E \sim 0.1 \text{ eV}$ ). Από την κατάσταση του Σχ. 12(α) το πρωτόνιο λοιπόν μπορεί να βρεθεί στην κατάσταση του Σχ. 12(β). Μετά, πάλι μέσω του φαινομένου σήραγγας μπορεί να ξαναβρεθεί στην αρχική του κατάσταση κλπ. Το άτομο του Οξυγόνου στο οποίο «ανήκει» κάθε φορά το  $p^+$  εξαρτάται από το πηγάδι στο οποίο βρίσκεται. Αυτό δηλώνεται με παχιές συνδετικές γραμμές στα Σχ. 12 (α) και (β) ενώ οι διακεκομμένες δηλώνουν τη χαλαρότερη σύνδεση με το άλλο άτομο Οξυγόνου. Στη πραγματικότητα οι δύο εναλλασσόμενες καταστάσεις του πρωτονίου «ενώνονται» σε μία, και ίσως μια σωστότερη εικόνα της πυκνότητας πιθανότητας φαίνεται στο  $\Sigma \gamma$ . 12( $\gamma$ ). Παρατηρούμε ότι το πρωτόνιο αύξησε τη διάσταση της περιοχής στην οποία μπορεί να κινηθεί με αποτέλεσμα την μείωση της ενέργειά του (επίσης, Πρόβλημα 10 του φυλλαδίου προβλημάτων Κ3). Αυτός είναι άλλωστε ακριβώς ο λόγος για τον οποίο υπάρχει «δεσμός», αν και αρκετά μικρότερης ισχύος από έναν π.χ. καθαρά ομοιοπολικό δεσμό.

Είναι αναμενόμενο από τα παραπάνω ότι ο δεσμός Υδρογόνου δε θα εμφανίζεται μόνο στο νερό ή μόνο μεταξύ ατόμων Οξυγόνου, αλλά και σε άλλες υδρογονούχες ενώσεις, όπου θα μπορεί να διασυνδέει δύο άτομα διαφορετικά από το Οξυγόνο και όχι κατ' ανάγκην ίδια μεταξύ τους. Έτσι, έχουμε δεσμούς του τύπου π.χ. F<sup>-</sup>||||H<sup>+</sup>||||F<sup>-</sup> (υδρογονούχο διφθοριούχο ιόν (FHF)<sup>-</sup>), ενώ οι πιο σημαντικές περιπτώσεις είναι οι δεσμοί N||||H||||Ν (ή απλώς NHN) και NHO. Παρ' όλο που το νερό είναι στην ουσία και αυτό ένα «βιολογικό μόριο» η σημασία του δεσμού Υδρογόνου είναι πολύ μεγαλύτερη (θα λέγαμε καίρια) στα καθαυτό μόρια της ζωής, όπως οι πρωτεΐνες και το DNA. Δεν είναι τυχαίο ότι σε οποιοδήποτε βιβλίο βιοχημείας και να

ανατρέξουμε παρατηρούμε μια ιδιαίτερη έμφαση στο ρόλο των δεσμών αυτών για τη δημιουργία εκείνων ακριβώς των δομικών χαρακτηριστικών των βιομορίων που καθορίζουν τη βιολογική τους λειτουργικότητα.



Σχήμα 13.

Η ελικοειδής δομή των πρωτεϊνών και το ζευγάρωμα των συζυγών βάσεων (αδενίνη με θυμίνη (A-T) και γουανίνη με κυτοσίνη (G-C)–Σχ. 13) που δημιουργεί τη διπλή έλικα στο DNA, είναι δυο τέτοια δομικά χαρακτηριστικά των βιομορίων, που οφείλονται αποκλειστικά σε δεσμούς Υδρογόνου. Σημειώστε ακόμη, ότι η ίδια βασική δυάδα δεσμών Υδρογόνου (NHN, NHO) εμφανίζεται και στις πρωτεΐνες και είναι υπεύθυνη είτε για την ελικοειδή είτε για τις άλλες γεωμετρικές μορφές υπό τις οποίες αυτές εμφανίζονται στη φύση. Συμπερασματικά, μπορούμε να πούμε ότι η ραχοκοκαλιά των βιομορίων σχηματίζεται με συμβατικούς χημικούς δεσμούς (ομοιοπολικούς, πολικούς ή μη-πολικούς) και είναι επομένως πολύ σταθερή λόγω της μεγάλης ισχύος των δεσμών αυτών. Όμως η περιέλιξή των βιομορίων στο χώρο (στην οποία βασίζεται και η εξειδικευμένη χημική τους συμπεριφορά) ρυθμίζεται από τους δεσμούς Υδρογόνου που είναι (ι) όσο ασθενικοί απαιτείται, ώστε να μπορούν να διαρραγούν και να επιτρέψουν στο μόριο να αλλάξει μορφή όταν αυτό είναι αναγκαίο. Η «ελαστικότητα» που εμφανίζουν λοιπόν τα βιομόρια οφείλεται ακριβώς στην «πλαστικότητα» των δεσμών να δρασιζεται και τη εξειδικαι μορφή όταν αυτό είναι αναγκαίο. Η

### 4. Η Ταλάντωση & Περιστροφή των Μορίων

Ας περάσουμε τώρα στους άλλους δύο ενεργειακούς όρους της σχέσης (5), ξεκινώντας από την ταλαντωτική ενέργεια των πυρήνων. Για να απλοποιήσουμε τη συζήτηση θα αναφερθούμε πάλι, κατ' αρχήν, στα διατομικά μόρια. Δύο άτομα που συνδέονται μεταξύ τους μέσω κάποιου δεσμού προσομοιάζουν με ένα σύστημα δύο μαζών που συνδέονται μέσω ενός ελατηρίου (Σχ. 14). Με τη σειρά του, το σύστημα αυτό μπορεί να προσομοιαστεί με την ταλάντωση ενός και μόνο σώματος αλλά με μάζα ίση με την λεγόμενη αναγμένη μάζα του μορίου,  $\mu = (m_1 \cdot m_2)/(m_1 + m_2)$ . Για να προβλέψουμε συνεπώς την ταλαντωτική συμπεριφορά του συστήματος, πρέπει να μεταφέρουμε όσα γνωρίζουμε για την απλή αρμονική ταλάντωση σε κβαντομηχανικό



επίπεδο. Στη πραγματικότητα βέβαια, το σύστημα θα εκτελεί απλή αρμονική ταλάντωση (της οποίας η δυναμική ενέργεια U(R)δίνεται στο Σχ. 15) μόνο όταν το πλάτος της ταλάντωσης αυτής είναι σχετικά μικρό, όταν δηλαδή η διαπυρηνική απόσταση δεν διαφέρει αισθητά από την θέση ισορροπίας ( $R \approx R_{min}$ ). Χωρίς προσεγγίσεις, θα έπρεπε να χρησιμοποιήσουμε ως ταλαντωτική δυναμική ενέργεια την  $\varepsilon_{\rm el}(R)$ , γεγονός που θα οδηγούσε σε αυτό



που ονομάζουμε αναρμονική ταλάντωση. Αλλά μια και εδώ δεν μπορούμε να αναφερθούμε λεπτομερώς στο θέμα, θα υποθέσουμε ότι η ταλάντωση είναι πάντα αρμονική. Η Κβανοτμηχανική λοιπόν προβλέπει ότι σύμφωνα με την παραπάνω προσέγγιση οι ταλαντωτικές ενεργειακές στάθμες των πυρήνων δίνονται από τη σχέση,

$$\varepsilon_{\text{vib},v} \approx \hbar \omega_0(v+1/2), v=0,1,2,...$$
 (7)

είναι δηλαδή κβαντισμένες (σε αντίθεση με την πρόβλεψη της Κλασικής Φυσικής όπου το πεδίο τιμών της ταλαντωτικής ενέργειας είναι συνεχές). Ο ακέραιος v ονομάζεται **ταλαντωτικός (ή δονητικός) κβαντικός αριθμός**. Η συχνότητα  $\omega_0$  (που κλασικά συνδέεται με τη «σταθερά ελατηρίου»,  $k=\mu\omega_0^2$ ) είναι χαρακτηριστική όχι απλώς του υπ' όψη μορίου αλλά και της υπό μελέτη ηλεκτρονιακής κατάστασής του. Όσο



υψηλότερα διεγερμένη είναι η ηλεκτρονιακή κατάσταση τόσο μικρότερη είναι η ω<sub>0</sub> (μεγαλύτερη διέγερση συνεπάγεται χαλαρότερους δεσμούς και συνεπώς μικρότερη «σταθερά ελατηρίου»). Οι ταλαντωτικές στάθμες «χτίζονται» σε κάθε καμπύλη ηλεκτρονιακής ενέργειας, όπως φαίνεται και στο Σχ. 16. Από το σχήμα αυτό

βλέπουμε ότι το μόριο δεν μπορεί να έχει ολική ενέργεια *E* ακριβώς ίση με  $\varepsilon_{\rm el}(R_{\rm min})$ , εφόσον, ακόμη και για v=0 στη σχέση (7) η ελάχιστη ταλαντωτική ενέργεια είναι  $\hbar\omega_o/2$ . Συνεπώς η μικρότερη δυνατή ενέργεια του μορίου είναι  $E = \varepsilon_{\rm el}(R_{\rm min}) + \hbar\omega_o/2$ , γεγονός που εξηγεί αυτό που αναφέραμε προηγουμένως, ότι δηλαδή η πραγματική ενέργεια διάσπασης είναι κατά τι μικρότερη της *DE*.

Ο τελευταίος όρος της (5) αφορά την ενέργεια περιστροφής του μορίου. Στο Σχ. 17 βλέπουμε τους δύο δυνατούς άξονες περιστροφής ενός ομοατομικού διατομικού μορίου που διέρχονται από το κέντρο μάζας του (που στην περίπτωση αυτή βρίσκεται στο μέσον της απόστασης  $R_{\min}$ ). Αποδεικνύεται ότι οι περιστροφικές ενεργειακές καταστάσεις του μορίου ως προς έναν από τους δύο αυτούς άξονες γράφονται ως

15

Σχήμα 17.

$$\varepsilon_{\text{rot},J} \approx \frac{\hbar^2}{2\Theta} J(J+1), J=0,1,2,\dots$$
(8)

όπου Θ η ροπή αδρανείας στη θέση ισορροπίας και ως προς το άξονα περιστροφής,

$$\Theta = \mu R_{\min}^2 \tag{9}$$

και μ είναι πάλι η αναγμένη μάζα του συστήματος (για ομοατομικό μόριο  $m_1=m_2=m$  και  $\mu=m/2$ ). Ο ακέραιος J ονομάζεται περιστροφικός κβαντικός αριθμός. Η έκφραση J(J+1) στην (8) σας θυμίζει πιθανώς την τροχιακή στροφορμή του ηλεκτρονίου στα άτομα ( $\mathcal{L}=\hbar[\ell(\ell+1)]^{1/2}$ ). Πράγματι ο κβαντικός αριθμός J συνδέεται με μία στροφορμή, αυτήν που χαρακτηρίζει την περιστροφή του μορίου. Και αυτή η στροφορμή λοιπόν είναι κβαντισμένη όπως και τα αντίστοιχα ενεργειακά επίπεδα. Από την (9) είναι προφανές ότι οι περιστροφικές ενέργειες εξαρτώνται από την υπό μελέτη ηλεκτρονιακή κατάσταση του μορίου μια και η θέση ισορροπίας είναι χαρακτηριστική της κατάστασης αυτής. Όσο υψηλότερα διεγερμένη είναι η ηλεκτρονιακή κατάσταση τόσο μεγαλύτερη η  $R_{min}$ , άρα και η  $\Theta$ , και τόσο μικρότερες οι ενεργειακές διαφορές μεταξύ διαδοχικών περιστροφικών επιπέδων. Οι περιστροφικές στάθμες «χτίζονται» και αυτές σε κάθε καμπύλη

ηλεκτρονιακής ενέργειας. Οι ενεργειακές διαφορές μεταξύ ταλαντωτικών επιπέδων είναι αρκετά μεγαλύτερες από αυτές των περιστροφικών για την ίδια ηλεκτρονιακή κατάσταση. Έτσι, στην πραγματικότητα, υπάρχει ένα ολόκληρο περιστροφικό φάσμα (*J*=0,1,2,...) για κάθε ταλαντωτική κατάσταση, δηλαδή για κάθε τιμή του κβαντικού αριθμού *v*. Με αυτά υπ' όψη μπορούμε πλέον να κατανοήσουμε πλήρως το Σχ. 16.

Προφανώς τόσο οι ταλαντώσεις (ή, διαφορετικά, δονήσεις) όσο και οι περιστροφές των πολυατομικών μορίων είναι κατά πολύ περιπλοκότερες των διατομικών μορίων. Την αυξημένη περιπλοκότητα μπορεί κάποιος να την κατανοήσει, εν μέρει, από το Σχ. 18 που αφορά τις δονήσεις του σχετικά απλού (και μάλιστα γραμμικού) μορίου CO<sub>2</sub> (ή O=C=O). Κάθε δόνηση του μορίου αυτού συνδέεται με μία δική της σειρά δονητικών ενεργειακών επιπέδων. Για ένα μόριο με Ν άτομα μπορούν να υπάρξουν 3N-6 (3N-5 για γραμμικά μόρια) ανεξάρτητοι μεταξύ τους κανονικοί τρόποι ταλάντωσης.





**Σχήμα 18.** 



# 5. Τα Μοριακά Φάσματα

#### 5.1 Γενικές Παρατηρήσεις

Οι μεταβάσεις μεταξύ των διαφόρων μοριακών καταστάσεων λόγω απορρόφησης ή εκπομπής ακτινοβολίας από ένα μόριο μπορούν να χωριστούν σε τρεις κύριες ομάδες:

(α) Μεταβάσεις μεταξύ δύο ενεργειακών επιπέδων που διαφέρουν μόνο ως προς την περιστροφική τους κατάσταση (ενώ το μόριο βρίσκεται στην ίδια ηλεκτρονιακή και ταλαντωτική κατάστασή του). Το φάσμα συχνοτήτων των μεταβάσεων αυτών βρίσκεται στην περιοχή του μακρινού υπερύθρου (για τα ελαφρύτερα μόρια) και των μικροκυμάτων. Οι ενεργειακές διαφορές μεταξύ διαδοχικών περιστροφικών επιπέδων είναι λοιπόν πολύ μικρές και αρκετά από αυτά που ανήκουν στη θεμελιώδη ηλεκτρονιακή και ταλαντωτική κατάσταση είναι ήδη περιστροφικά διεγερμένα σε θερμοκρασία περιβάλλοντος μέσω θερμικών κρούσεων μεταξύ των μορίων (θυμηθείτε: χαρακτηριστικές ενέργειες  $\sim k_{\rm B}$ Τ σε θερμοκρασία περιβάλλοντος στην περιοχή των μερικών δεκάδων meV). Από την ανάλυση περιστροφικών φασμάτων μπορούμε να βρούμε το μήκος του κάθε δεσμού ( $R_{\rm min}$ , κοιτάξτε π.χ. τις (8) και (9)).

(β) Μεταβάσεις μεταξύ δύο ενεργειακών επιπέδων της ίδιας ηλεκτρονιακής κατάστασης που διαφέρουν ως προς την ταλαντωτική (και συχνά περιστροφική) κατάστασή τους. Το φάσμα τους βρίσκεται στην περιοχή του κοντινού υπερύθρου. Οι ενεργειακές διαφορές μεταξύ ταλαντωτικών επιπέδων είναι λοιπόν αρκετά μεγάλες και τα επίπεδα αυτά δεν μπορούν συνήθως να διεγερθούν με θερμικές κρούσεις.

(γ) Μεταβάσεις μεταξύ επιπέδων που διαφέρουν και ως προς την ηλεκτρονιακή τους κατάσταση. Το φάσμα τους ανήκει στην περιοχή του ορατού (μεγάλα οργανικά μόρια) και υπεριώδους.

Η πραγματοποίηση μεταβάσεων των περιπτώσεων (α) και (β) προϋποθέτει την ύπαρξη μη-μηδενικής ηλεκτρικής διπολικής ροπής. Συνεπώς τέτοιες μεταβάσεις δεν πραγματοποιούνται στα ομοατομικά διατομικά μόρια των οποίων ο δεσμός είναι μη-πολικός ομοιοπολικός. Πραγματοποιούνται όμως προφανώς σε μόρια των οποίων οι δεσμοί είναι πολικοί ομοιπολικοί, όπως π.χ. το  $H_2O$ . Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, λόγω της μεγάλης πολικότητας των δύο δεσμών του, το νερό έχει μεγάλη θερμοχωρητικότητα που του επιτρέπει να δρα θερμορυθμιστικά σε πλανητικό επίπεδο. Από την άλλη, η απορρόφηση του νερού στο υπέρυθρο είναι και αυτή ιδιαίτερης βιολογικής σημασίας μια και του επιτρέπει να δρα, επιπλέον, και θερμοπαγιδευτικά. Συγκεκριμένα, η Γήινη ατμόσφαιρα λειτουργεί ως θερμοπαγίδα. Από τη μία, επιτρέπει την είσοδο της ορατής Ηλιακής ακτινοβολίας (μια και πρακτικά μόνο τα μεγάλα οργανικά μόρια μπορούν να διεγερθούν ηλεκτρονιακά - ομάδα (γ) - στο ορατό και τέτοια μόρια στην ατμόσφαιρα δεν υπάρχουν). Από την άλλη, εμποδίζει την άμεση διαφυγή της εκπεμπόμενης από την επιφάνεια του πλανήτη θερμικής ακτινοβολίας (που είναι η ακτινοβολία υπερύθρου και μικροκυμάτων – σκεφτείτε απλώς ότι «ψήνουμε» με φούρνους μικροκυμάτων). Η αποφυγή της άμεσης διαφυγής της ακτινοβολίας αυτής είναι τελείως απαραίτητη ώστε να διατηρείται σχετικά σταθερή η θερμοκρασία της Γης. Το μόριο της ατμόσφαιρας λοιπόν που απορροφά (και μετά από λίγο επανεκπέμπει) έντονα θερμική ακτινοβολία είναι το H<sub>2</sub>O (υδρατμοί). Πιθανότατα όμως γνωρίζετε ότι τον ίδιο ρόλο με τους υδρατμούς φαίνεται να παίζει και το CO2 που εκλύεται στην ατμόσφαιρα από την ανθρώπινη δραστηριότητα. Το γεγονός αυτό φαίνεται σε μια πρώτη ματιά περίεργο εφόσον το O=C=O είναι ένα γραμμικό μόριο με μηδενική ολική ηλεκτρική διπολική ροπή. Όμως, ο κάθε δεσμός O–C είναι πολικός. Συμπεραίνουμε λοιπόν ότι ταλαντωτικές και περιστροφικές μεταβάσεις μπορούν να πραγματοποιηθούν σε μόρια με πολικούς δεσμούς, ακόμη και εάν τα μόρια αυτά είναι στο σύνολό τους μη-πολικά. Σε αυτήν ακριβώς την ιδέα βασίζεται και η χημική φασματοσκοπία. Οι φασματικές γραμμές που οφείλονται σε ταλαντωτικές μεταβάσεις (ομάδα (β)) ενός οσοδήποτε πολύπλοκου μορίου αποδίδονται σε συγκεκριμένους δεσμούς, δηλαδή σε συγκεκριμένα ταλαντούμενα τμήματα του μορίου. Εργαζόμενοι αντίστροφα, μπορεί κανείς να συναγάγει την ύπαρξη διαφόρων γνωστών πολικών ομάδων σ' ένα μακρομόριο με βάση το ταλαντωτικό του φάσμα.

### 5.2 Διατομικά Μόρια στην Αέρια Φάση

Προφανώς, η πιθανότητα μετάβασης εξαρτάται από τις ιδιότητες των καταστάσεων των ενεργειακών επιπέδων που συμμετέχουν σε αυτή. Υπάρχουν δε μεταβάσεις με μηδενική πιθανότητα (απαγορευμένες). Από την άλλη, όπως και στα άτομα, για να είναι οι μεταβάσεις επιτρεπτές πρέπει να υπακούουν σε κάποιους κανόνες επιλογής. Δίνουμε εδώ δύο παραδείγματα τέτοιων κανόνων που αφορούν μόνο τις ταλαντωτικές και περιστροφικές μεταβάσεις μέσω ενός φωτονίου σε ένα διατομικό ετεροατομικό μόριο και μάλιστα για την ίδια ηλεκτρονιακή κατάσταση. Όταν λοιπόν η ταλαντωτική δυναμική ενέργεια έχει την προσεγγιστική μορφή που δίνεται στο Σχ. 15, οι πρώτες πραγματοποιούνται όταν ισχύει,

$$\Delta v = v_f - v_i = \pm 1. \tag{10}$$

Οι δε επιτρεπτές ταλαντωτικές μεταβάσεις υπακούουν στον κανόνα επιλογής

$$\Delta J = J_f - J_i = \pm 1. \tag{11}$$

Για μεταβάσεις ενός του ιδίου ταλαντωτικού επιπέδου χρησιμοποιούμε μόνον την (11). Όμως οι μεταβάσεις όπου έχουμε αλλαγή τόσο ταλαντωτικού όσο και περιστροφικού επιπέδου (της ίδιας ηλεκτρονιακής κατάστασης) πρέπει να υπακούουν και στους δύο αυτούς κανό-

νες.

Όσον αφορά στην ομάδα μεταβάσεων (γ) όπου αλλάζει και η ηλεκτρονιακή κατάσταση του ετεροατομικού διατομικού μορίου, το απορροφούμενο (Σχ. 19) ή εκπεμπόμενο φωτόνιο θα έχει ενέργεια ίση με

$$hv_{if} = |[\varepsilon_{el,f}(R_{\min,f}) - \varepsilon_{el,i}(R_{\min,i})] + \\ + [\hbar\omega_{of}(v_f + 1/2) - \hbar\omega_{oi}(v_i + 1/2)] + \\ + [(\hbar^2/2\Theta_f)J_f(J_f + 1) - (\hbar^2/2\Theta_i)J_i(J_i + 1)]|$$
(12)

όπου, όπως και πριν, ισχύει ο κανόνας επιλογής  $\Delta J = \pm 1$ αλλά εδώ δεν τίθεται σαφής περιορισμός στη διαφορά  $\Delta v$ .



Τα ταλαντωτικά και περιστροφικά φάσματα των μεγάλων πολυατομικών, οργανικών και βιολογικών μορίων είναι αρκετά περιπλοκότερα των φασμάτων των διατομικών μορίων που παρουσιάσαμε παραπάνω. Επιπλέον, είναι πολλές φορές αλληλοεπικαλυπτόμενα. Από την άλλη, ειδικά για τα βιολογικά μόρια, έχει ίσως μεγαλύτερη σημασία να μελετώνται στο φυσικό τους περιβάλλον, εντός δηλαδή ενός πυκνού



υδατικού διαλύματος. Όταν όμως έχουμε απορρόφηση φωτός από τη θεμελιώδη σε κάποια υψηλότερα διεγερμένη ηλεκτρονιακή κατάσταση σε ένα τέτοιο περιβάλλον, οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των διαφόρων μορίων αλλοιώνουν και στην πράξη καταστρέφουν τη διακριτή μορφή των (ήδη πυκνών) ταλαντωτικών και περιστροφικών φασμάτων. Ως αποτέλεσμα, αυτό που παρατηρούμε είναι ζώνες (μπάντες) απορρόφησης αντί για φασματικές γραμμές (Σχ. 20). Ο πειραματικός προσδιορισμός των ζωνών αυτών πραγματοποιείται μέσω της φασματοσκοπίας απορρόφησης (κοιτάξτε το τμήμα 2.1 του K4). Συγκεκριμένα, χρησιμοποιείται μια φωτεινή πηγή έντασης  $I_0(λ)$  που εκπέμπει ένα ευρύ φάσμα ακτινοβολίας στη φασματική περιοχή που ενδιαφέρει. Το φως της πηγής περνάει μέσα από το υπό μελέτη δείγμα πάχους L και το εξερχόμενο φως έχει πλέον ένταση I(λ). Σύμφωνα με τον λεγόμενο νόμο των Beer-Lambert έχουμε τότε ότι

$$I(\lambda) = I_0(\lambda) \ e^{-\alpha(\lambda)L}$$
(13)

όπου *a*(λ) ο ονομαζόμενος συντελεστής απορρόφησης που χαρακτηρίζει τη μετάβαση από τη θεμελιώδη στη διεγερμένη ηλεκτρονιακή κατάσταση και ο οποίος εξαρτάται από το μήκος κύματος. Από τη (10) έχουμε,

$$A(\lambda) \equiv a(\lambda)L = \ln\left[\frac{I_{o}(\lambda)}{I(\lambda)}\right].$$
(14)

Η αδιάστατη ποσότητα *A*(λ) ονομάζεται *απορροφητικότητα* (*absorbance*). Ένα παράδειγμα φάσματος απορρόφησης που καλύπτει το ορατό φάσμα φαίνεται στο Σχ. 21. Το προς μελέτη δείγμα ήταν εκχύλισμα από πράσινο τσάϊ σε διάλυμα αιθανόλης. Η τελευταία χρησιμοποιήθηκε ως διαλύτης διότι στο νερό το τσάι καθιζάνει μετά από ώρα. Το φάσμα του όμως είναι το ίδιο όπως και σε ένα υδατικό διάλυμα. Το κύριο συστατικό του πράσινου τσαγιού είναι η χλωροφύλλη-α την οποία αναγνωρίζουμε



στο φάσμα από τα άλλα συστατικά από τις μπάντες απορρόφησής της στα ~615 και ~665 nm.

Παρόλο που κάτω από τις συνθήκες που αναφέρθηκαν παραπάνω τα ενεργειακά επίπεδα ταλάντωσης και περιστροφής δεν διακρίνονται, αυτό δεν σημαίνει ότι τα μόρια δεν είναι διεγερμένα στα επίπεδα αυτά. Μέσω κρούσεων όμως, τα μόρια που βρίσκονται στην υψηλότερη ηλεκτρονιακή κατάσταση χάνουν την ταλαντωτική και περιστροφική ενέργειά τους, μεταπίπτοντας ταχύτατα και χωρίς εκπομπή φωτός στο θεμελιώδες ταλαντωτικό και περιστροφικό επίπεδο της διεγερμένης κατάστασης (Σχ. 20). Από εκεί, αποδιεγείρονται προς τη θεμελιώδη ηλεκτρονι-



ακή κατάσταση εκπέμποντας ακτινοβολία, οπότε και μας δίνουν μία ολόκληρη μπάντα εκπομπής (φθορισμός). Την μπάντα αυτή μπορούμε να την καταγράψουμε εάν προκαλέσουμε τη ηλεκτρονιακή διέγερση των μορίων με μία πηγή φωτός (συνήθως πηγή laser) ενός και μόνο κατάλληλου μήκους κύματος και αναλύσουμε φασματικά τον επακόλουθο φθορισμό των μορίων αυτών. Στο Σχ. 22 είναι σχεδιασμένες τόσο η μπάντα απορρόφησης όσο και η μπάντα εκπομπής για ένα μακρομόριο. Παρατηρήστε ότι λόγω των κρούσεων **η** μπάντα εκπομπής είναι μετατοπισμένη προς μεγαλύτερα μήκη κύματος σε σχέση με την μπάντα απορρόφησης. Η τελευταία εκτείνεται από το πράσινο έως και το υπεριώδες ενώ η πρώτη είναι κεντραρισμένη στο πορτοκαλί (~550 nm). Τα δύο φάσματα επικαλύπτονται μόνο σε μία πολύ μικρή περιοχή.

# 6. Η Συνεστιακή Μικροσκοπία

#### 6.1 Τυπική Μεθοδολογία & Γεωμετρία

Στη συνεστιακή μικροσκοπία εκμεταλλευόμαστε ακριβώς το γεγονός ότι οι μπάντες απορρόφησης και εκπομπής είναι μετατοπισμένες η μία ως προς την άλλη. Έτσι, χρησιμοποιούμε μία πηγή φωτός laser δεδομένου και σταθερού μήκους κύματος λ<sub>laser</sub> για να διεγείρουμε τα (συνήθως βιολογικά) μόρια και ανιχνεύουμε τα μόρια αυτά συλλέγοντας τον φθορισμό τους σε κάποιο μήκος κύματος λ<sub>ανίχνευσης</sub>=λ<sub>φθορισμού</sub>>λ<sub>laser</sub>. Τα λ<sub>laser</sub> και λ<sub>φθορισμού</sub> δεν πρέπει να βρίσκονται στην περιοχή επικάλυψης των δύο μπαντών. Επιπλέον, για να

αποφύγουμε την ανίχνευση του λ<sub>laser</sub>, χρησιμοποιούμε κατάλληλα χρωματικά φίλτρα, που αποκόπτουν το χρώμα αυτό αλλά επιτρέπουν τη διέλευση του λ<sub>φθορισμού</sub>, μπροστά από τον ανιχνευτή. Λόγω του ότι οι πηγές laser, ειδικά των εμπορικών συστημάτων, είναι συνήθως δεδομέ-



νες και δεν υπάρχει δυνατότητα αλλαγής του μήκους κύματός τους, δεν μπορούν να διεγείρουν οποιαδήποτε ουσία. Το εμπόδιο αυτό συχνά ξεπερνιέται προσκολλώντας με χημικές μεθόδους στην υπό μελέτη ουσίαει-

δικές μοριακές φθορίζουσες ομάδες (fluorophores – Σχ. 23) με γνωστές και κατάλληλες μπάντες απορρόφησης (στις οποίες εμπεριέχεται το  $\lambda_{laser}$ ) και εκπομπής (στις οποίες εμπεριέχεται το  $\lambda_{avigveusng}$ ). Από την άλλη, οι ομάδες αυτές είναι κατά το δυνατόν βιολογικά ανενεργές και δεν συμμετέχουν στη λειτουργία που επιτελεί εντός του κυττάρου το υπό μελέτη μοριακό σύστημα.



Έχοντας υπ' όψη τα παραπάνω μπορούμε να κατανοήσουμε το Σχ. 24. Η ακτινοβολία laser οδηγείται προς το δείγμα μέσω ενός διχροϊκού κατόπτρου (που ανακλά το λ<sub>laser</sub> αλλά αφήνει να διέλθει το λ<sub>ανίχνευσης</sub> – δηλαδή λειτουργεί όπως και τα προαναφερθέντα φίλτρα). Μετά το κάτοπτρο το φως laser εστιάζεται από ένα φακό στο δείγμα. Ο ίδιος φακός λειτουργεί και ως αντικειμενικός του μικροσκοπίου και συλλέγει τον εκπε-



μπόμενο φθορισμό. Ο τελευταίος περνάει ανεπηρέαστα από το διχροϊκό κάτοπτρο και φτάνει μέχρι τον προσοφθάλμιο. Στην πραγματικότητα, ο προσοφθάλμιος είναι ένα σύστημα φακών που είναι σχεδιασμένο έτσι ώστε η εστιακή του απόσταση να μην εξαρτάται από το μήκος κύματος (μας δίνει τη δυνατότητα να

εργαστούμε με διαφορετικά λ<sub>φθορισμού</sub>). Το *αχρωματικό* αυτό σύστημα εστιάζει το φως (και δημιουργεί το είδωλο του σημείου από το οποίο συλλέγει το φθορισμό ο αντικειμενικός) σε ένα διάφραγμα. Τέλος, το φως που περνά από το διάφραγμα συλλέγεται από τον ανιχνευτή. Η χρήση του διαφράγματος είναι απολύτως αναγκαία και αυτό γιατί καθώς εστιάζεται στο δείγμα η δέσμη laser διεγείρει όλα τα μόρια που βρίσκονται στη διεύθυνση διάδοσής της (Σχ. 25). Εάν δεν υπήρχε διάφραγμα ο ανιχνευτής θα ελάμβανε φθορισμό από όλα αυτά τα σημεία, ακόμη και εάν τα τελικά είδωλα των σημείων αυτών δεν συνέπιπταν με τη θέση του διαφράγματος. Έτσι όμως θα χανόταν κάθε διακριτική



ικανότητα ως προς το βάθος του δείγματος. Κοιτάξτε π.χ. στο Σχ. 24 το σημείο Α, το είδωλο του οποίου εί-

ναι το σημείο Β που δεν συμπίπτει με τη θέση του διαφράγματος. Μετά το Β το φως που προέρχεται από το Α αποκλίνει έντονα, οπότε και πρακτικά αποκόπτεται σε μεγάλο ποσοστό από το διάφραγμα. Μεταβάλλοντας την απόσταση δείγματος-αντικειμενικού φακού (βάθος) και απεικονίζοντας μέσω του διαφράγματος πάντα μόνον το σημείο εστίασης της δέσμης laser στο δείγμα, καταφέρνουμε να το χαρτογραφήσουμε κατά βάθος. Επιπλέον, σαρώνοντας το δείγμα και κατά πλάτος έχουμε ικανότητα διάκρισης και ως προς αυτή τη διεύθυνση. Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας ειδικούς ανακατασκευαστικούς αλγόριθμους, το σύνολο των δεδομένων και από τις δύο σαρώσεις του δείγματος δημιουργούν τελικά μια τρισδιάστατη εικόνα του (Σχ. 26).

# 6.2 Ειδικό Θέμα: Συνεστιακή Μικροσκοπία Διφωτονικής Απορρόφησης

Όπως είπαμε, η χρήση του διαφράγματος στην κλασσική συνεστιακή μικροσκοπία είναι απολύτως απαραίτητη. Την ίδια στιγμή είναι και ανεπιθύμητη γιατί περιπλέκει αρκετά τη διάταξη και, επιπλέον, δεν απορρίπτει πλήρως τον παρασιτικό φθορισμό (που προέρχεται από σημεία εκτός της εστίας της διεγείρουσας δέσμης laser). Για το λόγο αυτό διερευνάται την τελευταία δεκαετία μία λύση που βασίζεται στην διέγερση των μορίων όχι με ένα φωτόνιο (μονοφωτονική διέγερση) αλλά με δύο. Κατά



την διφωτονική διέγερση η ενεργειακή διαφορά E<sub>2</sub>-E<sub>1</sub> μεταξύ των επιπέδων όπου πραγματοποιείται η μετάβαση είναι ίση με την ενέργεια δύο φωτονίων ενώ δεν υπάρχει πραγματική κατάσταση στην περιοχή του

πρώτου φωτονίου (Σχ. 27). Αν και για να πραγματοποιηθεί η διέγερση αυτή απαιτείται πολύ μεγάλη φωτεινή ένταση (μια και η πιθανότητα να συμβεί είναι πολύ μικρή), κάτι τέτοιο είναι δυνατό στις μέρες μας διότι οι διαθέσιμες πηγές laser είναι ιδιαίτερα ισχυρές και ικανές να την επάγουν μετά από την εστίασή τους. Για να γίνει κατανοητό το «σημείο κλειδί» της μεθόδου, σημειώνουμε κατ' αρχήν ότι η φωτεινή ένταση είναι αντιστρό-



φως ανάλογη της επιφάνειας που συγκεντρώνουμε το φως,  $I \propto 1/S$  (σχέση (5) του K3). Καθώς λοιπόν η δέσμη εστιάζεται στο δείγμα, η επιφάνειά της στην αρχή μειώνεται, φτάνει σε κάποιο ελάχιστο ακριβώς στην εστία και στη συνέχεια αυξάνεται και πάλι. Επακόλουθα η έντασή της είναι μέγιστη και ικανή να επάγει διφωτονική απορρόφηση μόνο στην περιοχή της εστίας (Σχ. 28). Συνεπώς, στην περίπτωση αυτή δεν χρειάζεται να τοποθετήσουμε διάφραγμα πριν από ν ανιχνευτή. Παράδειγμα της πολύ μεγαλύτερης διακριτικής ικανότητας που επιτυγχάνεται φαίνεται στο Σχ. 29 για μία οργανική χρωστική. Στα αριστερά (μονοφωτονική απορρόφηση) διεγείρουμε με ένα laser μήκους κύματος 488 nm και ο επακόλουθος φθορισμός έχει κεντρικό μήκος κύματος ~500 nm. Ο φθορισμός παρατηρείται σε όλη την περιοχή εστίασης της διεγείρουσας δέσμης. Επίσης, υπάρχει επικάλυψη μεταξύ του μήκους κύματος διέγερσης και της μπάντας εκπομπής. Αντίθετα, στα δεξιά χρησιμοποιούμε laserμήκους κύματος των ~900 nm και μετά την απορρόφηση δύο φωτονίων ο φθορισμός (πάλι κεντρικού μήκους κύματος ~500 nm) παρατηρείται από ένα και μόνο σημείο, αυτό της εστίας (φωτεινή πράσινη κουκκίδα). Κατά τη διφωτονική απορρόφηση το μήκος κύματος διέγερσης είναι λοιπόν



488 nm excitation 900 nm pulsed excitation

μικρότερο του μήκους κύματος του φθορισμού με αποτέλεσμα να μην έχουμε επικάλυψη με την μπάντα εκπομπής. Έτσι, η απόρριψη του παρασιτικού φωτεινού υποβάθρου είναι πολύ ευκολότερη. Το μόνο μειονέκτημα της μεθόδου (το οποίο όμως υφίσταται ως ένα βαθμό και στη μονοφωτονική διέγερση) είναι ότι η μεγάλη ένταση λόγω της εστίασης μπορεί να προκαλέσει βλάβη ή και πλήρη καταστροφή του δείγματος (photobleaching).

# Κ5. Ερωτήσεις/Προβλήματα

1. Περιγράψτε συνοπτικά την προσέγγιση Born-Openheimer στα μόρια.

6. Η ενέργεια της θεμελιώδους ηλεκτρονιακής κατάστασης ενός διατομικού μορίου δίνεται προσεγγιστικά από το δυναμικό Lenard-Jones

$$\varepsilon_{\rm el}(R) = -\frac{A}{R^6} + \frac{B}{R^{12}}$$

όπου τα A και B είναι σταθερές και όπου η ενέργεια των ελευθέρων ατόμων που απαρτίζουν το μόριο έχει τεθεί ίση με το μηδέν. Βρείτε τη θέση ισορροπίας  $R_{\min}$  ως συνάρτηση των A και B. Σχεδιάστε ποιοτικά την καμπύλη. Ποια η ενέργεια διάσπασης του μορίου εάν αγνοηθεί η ταλαντωτική και περιστροφική ενέργειά του; Εφαρμογή: Μόριο του H<sub>2</sub> με  $A = 0.1488 \times 10^{-60}$  (eV)·m<sup>6</sup> και  $B = 0.12 \times 10^{-120}$  (eV)·m<sup>12</sup>.

2. Περιγράψτε τα τρία είδη διέγερσης ενός μορίου και τις αντίστοιχες ενεργειακές στάθμες.

**3.** Εξηγείστε τα χαρακτηριστικά και τις διαφορές μεταξύ ιοντικού, ομοιοπολικού μη-πολικού και ομοιοπολικού πολικού δεσμού.

4. Εξηγήστε τους λόγους για τους οποίους ο δεσμός Υδρογόνου είναι ισχυρότερος του αναμενομένου. Ποιο ο ρόλος του δεσμού αυτού στα βιολογικά μόρια (όπως οι πρωτεΐνες και το DNA);

5. Πηγή ακτινοβολίας υπερύθρου φωτίζει μίγμα H<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub> και HCl και καταγράφουμε την απορρόφηση της ακτινοβολίας αυτής. Από ποια μόρια του μίγματος προέρχονται οι παρατηρούμενες φασματικές γραμμές απορρόφησης και γιατί;

7. Στο μόριο του CO η μετάβαση από την περιστροφικό επίπεδο J=0 στο επίπεδο J=1 αντιστοιχεί σε συχνότητα  $v=1.15\times10^{11}$  Hz. Υπολογίστε την ροπή αδρανείας του μορίου καθώς και το μήκος του δεσμού. Δίδεται ότι  $m_0=16$  u και  $m_c=12$  u όπου u= $1.14\times10^{-26}$  kg (ατομική μονάδα μάζας).

8. Ένα ετεροατομικό διατομικό μόριο βρίσκεται αρχικά διεγερμένο στο ενεργειακό επίπεδο (v=2,J=4) της θεμελιώδους ηλεκτρονιακής κατάστασης.

(a) Σχεδιάστε όλες τις δυνατές μεταβάσεις αποδιέγερσης του μορίου.

(β) Σχεδιάστε ποιοτικό φάσμα με τις φασματικές γραμμές εκπομπής που θα παρατηρηθούν συναρτήσει των ενεργειακών αποστάσεων *a* και *b* του σχήματος.

Δίδεται ότι:

$$\varepsilon_{\text{vib},v} \approx \hbar \omega_0(v+1/2), v=0,1,2,\dots$$
  

$$\varepsilon_{\text{rot},J} \approx \frac{\hbar^2}{2\Theta} J(J+1), J=0,1,2,\dots$$
  

$$\Delta v = \pm 1$$
  

$$\Delta J = \pm 1.$$



9. Περιγράψτε συνοπτικά την αρχή λειτουργίας του παρακάτω συνεστιακού μικροσκοπίου.



 $a(\lambda)=A/L \ (\mathrm{cm}^{-1})$ 

10. Πηγή laser μήκους κύματος 450 nm ενός συνεστιακού μικροσκοπίου διεγείρει ένα υπό μελέτη μακρομόριο. Στο διπλανό σχήμα φαίνονται οι μπάντες απορρόφησης και εκπομπής του μορίου. Ποια περιοχή μηκών κύματος της μπάντας εκπομπής δεν πρέπει να χρησιμοποιήσουμε για την ανίχνευση των μορίων; Ποιο μήκος κύματος λ<sub>ανίχνευσης</sub> θα επιλέγατε εσείς και γιατί;



11. (α) Διαφανές γυάλινο κελί πάχους 1 cm περιέχει διάλυμα τσαϊού σε αιθανόλη και ακτινοβολείται με laser He/Ne μήκους κύματος 632.8 nm. Ο φωτοανιχνευτής μετά από το κελί ανιχνεύει φωτεινή ένταση *Ι*. Όταν το κελί είναι γεμάτο μόνο με αιθανόλη ανιχνεύει ένταση  $I_0$ . Χρησιμοποιώντας το διπλανό διάγραμμα εκτιμήστε την επί τοις % μείωση της φωτεινής έντασης, 100· $|(I_0-I)/I_0|$ .

(β) Πάλι μέσω του διπλανού διαγράμματος, εξηγήστε γιατί τα φύλλα των δέντρων είναι πράσινα.

# Ενδεικτική Βιβλιογραφία

1. Π. Τσέκερης, Σημειώσεις Φυσικής για Βιολογικές Επιστήμες, Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων (2006)

2. Φυσική Γενικής Παιδείας Γ' Λυκείου, ΟΕΔΒ (2010)

3. Φυσική Θετικής Κατεύθυνσης Γ' Λυκείου, ΟΕΔΒ (2010)

4. Στέφανος Τραχανάς Κβαντομηχανική Ι (αγνώστου έτους) & ΙΙ, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης (1986)

5. Halliday & Resnick, J. Walker, Fundamentals of Physics Vol. 1 & 2, 8th Edition, Wiley & Sons (2007)

6. R. A. Serway, *Physics for Scientists and Engineers*, 3<sup>rd</sup> Edition (Τόμος ΙV-Σύγχρονη Φυσική), Απόδοση στα Ελληνικά: Λ. Ρεσβάνης (1993)

7. Σ. Κοέν, Σημειώσεις Εργαστηρίων Κυμάνσεων & Οπτικής, Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων (2011)

8. Σ. Κοέν, Σημειώσεις Οπτικής Μετρολογίας-Συμβολή/Περίθλαση, Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων (2006)

9. A. Kitaigorodsky, *Introduction to Physics*, MIR Publishers Moscow (English Translation: O. Smith & L. Levant) (1981)

10. B. M. Yavorsky & A. A. Pinsky, Fundamentals of Physics, Vol. II, MIR Publishers Moscow (1975)

11. Ι. Φίλης, Κεφάλαια Ατομικής & Μοριακής Φυσικής, Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων (1998)

12. Π. Τσέκερης & Α. Μπολοβίνος, Σημειώσεις Ατομικής Φυσικής, Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων (2000)

13. Σ. Κοέν, Σημειώσεις Ατομικής Φυσικής, Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων (2004)