

Εισαγωγή: Στο γύρισμα του 19^{ου} προς 20^ο αιώνα

Κλασσική Φυσική

Κλασσική Μηχανική

Νόμος του Νεύτωνα

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$$

Κίνηση σωματιδίων κάτω
από την επίδραση
δυνάμεων

Θεωρία Πεδίων

1. Πεδίο Βαρύτητας

2. Ηλεκτρομαγνητικό (H/M) πεδίο

Εξισώσεις Maxwell

Σύνδεση-Ενοποίηση
Ηλεκτρισμού, Μαγνητισμού, Φωτός
Διάδοση H/M κυμάτων
χωρίς την αναγκαιότητα
υλικού μέσου

Κλασσική Στατιστική Μηχανική

Αύξηση Εντροπίας
Ανεξάρτητος
θεμελιώδης νόμος της φύσης

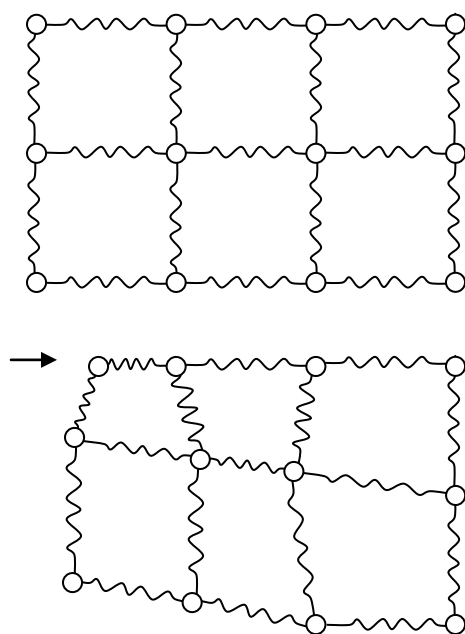
Σύνδεση του μικρόκοσμου
με τον μακρόκοσμο
Μη-αντιστρεπτές διαδικασίες

Κλασική Μηχανική: Νόμος του Νεύτωνα

1. Κίνηση σωματιδίων κάτω από την επίδραση δυνάμεων
2. Σχετική κίνηση των δομικών μονάδων ενός συνεχούς μέσου κάτω από την επίδραση αμοιβαίων δυνάμεων
(Μηχανική των ρευστών, Κυματική)

Κυματική εξίσωση (Εφαρμογή του νόμου του Νεύτωνα)

“Σε τελευταία ανάλυση όλα τα κύματα είναι μηχανικές ταλαντώσεις κάποιου υλικού μέσου”.



Εποχή προ-Maxwell:

Το φως διαδίδεται στον μέσον αιθέρα.

Πείραμα:

Αιθέρας δεν υπάρχει.

Εξισώσεις Maxwell: Τα Η/Μ κύματα (φως) διαδίδονται και στο κενό
(ανεξαρτησία από τον νόμο του Νεύτωνα)

Ως αποτέλεσμα αυτού...

Δύο ξεχωριστές και αμοιβαία αποκλειόμενες φυσικές οντότητες:

Σωματίδια:

Κίνηση σε καλά καθορισμένες τροχιές
Ενέργεια και ορμή εντοπισμένες
Φυσικά μεγέθη όπως η ενέργεια, ορμή, στροφορμή,
παίρνουν όλες τις δυνατές τιμές εντός επιτρεπόμενων
διαστημάτων (συνεχές πεδίο τιμών)

Κύματα:

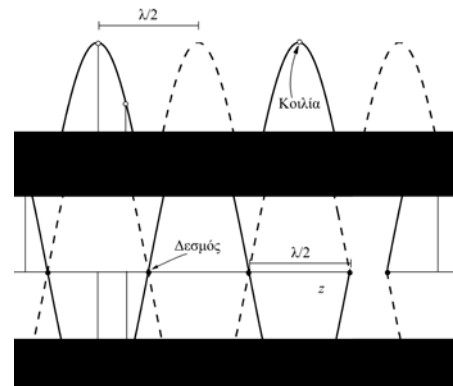
Διάδοση διαταραχής στο χώρο
(απουσία καλά καθορισμένων τροχιών)

Εμφάνιση καθαρά κυματικών φαινομένων
(συμβολή, περίθλαση κλπ.)

Ενέργεια και ορμή απεντοπισμένες

Ενέργεια και ορμή μπορούν να πάρουν οποιαδήποτε τιμή
Το ίδιο και τα καθαρά κυματικά μεγέθη: συχνότητα,
μήκος κύματος.

.....εκτός από μερικές περιπτώσεις,
π.χ. στάσιμα κύματα, όπου
συναντούμε μόνο
διάκριτες επιτρεπτές τιμές τους....



Κλασσική Στατιστική Μηχανική

Ο αριθμός των σωματιδίων ενός μακροσκοπικού συστήματος είναι τόσο μεγάλος ($\sim 10^{23}$) ώστε η λύση των εξισώσεων κίνησης να είναι πρακτικά αδύνατη.

...αλλά για τη γνώση των μακροσκοπικών μεγεθών, δεν είναι ούτε καν αναγκαία, π.χ. για τον υπολογισμό της πίεσης ενός αερίου, αρκεί η γνώση του αριθμού των σωματιδίων και της κατανομής ταχυτήτων τους.

Αύξηση Εντροπίας

Ανεξάρτητος θεμελιώδης νόμος της φύσης

Δεν συνάγεται από τις εξισώσεις της μικροσκοπικής κίνησης (που είναι αναλλοίωτες στην αντιστροφή του χρόνου) διότι οι μακροσκοπικές μεταβολές είναι μονής κατεύθυνσης.

Εάν N ο συνολικός αριθμός σωματιδίων ενός συστήματος
το ποσοστό σωματιδίων με Μηχανική Ενέργεια στο διάστημα
μεταξύ E και $E + dE$

$$\frac{dN}{N} = Ae^{-E/kT} dE$$

Πιθανότητα να έχει ένα σωματίδιο ενέργεια E σε θερμοκρασία T
(Μεγιστοποίηση Εντροπίας)

$$P = Ae^{-E/kT}$$

Boltzmann

Η σταθερά A ;

Θα τη διαλέξουμε έτσι ώστε η συνολική πιθανότητα να είναι μονάδα:

Υποθέτοντας συνεχείς τιμές της E ,

$$\int P dE = A \int e^{-E/kT} dE = 1$$

$$P = \frac{1}{\int e^{-E/kT} dE} e^{-E/kT}$$

Για διάκριτες τιμές της ενέργειας τι;

Η επιτυχία της Κλασικής Φυσικής είναι πλήρης.
Εξηγεί όλα τα μέχρι τότε πειραματικά δεδομένα...
τα οποία όμως αφορούν μόνο τον μακρόκοσμο και όχι τον μικρόκοσμο.

Από τη στιγμή που το πείραμα θα “ακουμπήσει” τον μικρόκοσμο
εμφανίζονται αδικαιολόγητες και μη αναμενόμενες... “παραφωνίες”.

Σκοπός μας εδώ είναι να μιλήσουμε γι’ αυτές τις παραφωνίες.....
π.χ.

Ακτινοβολία μέλανος (μαύρου) σώματος

Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Φαινόμενο Compton

Πείραμα Davisson-Germer

Φασματοσκοπικά δεδομένα των στοιχείων (αερίων)

...να δούμε πως αυτές οδήγησαν
στην αναθεώρηση των απόψεών μας
για τη λειτουργία (“πως”) του μικρόκοσμου

...και στην ανακάλυψη μιας πληρέστερης θεωρίας για αυτόν.

Επίσης, να περιγράψουμε τις βασικές της αρχές της θεωρίας αυτής.

Α. Η Σωματιδιακή Φύση των Κυμάτων

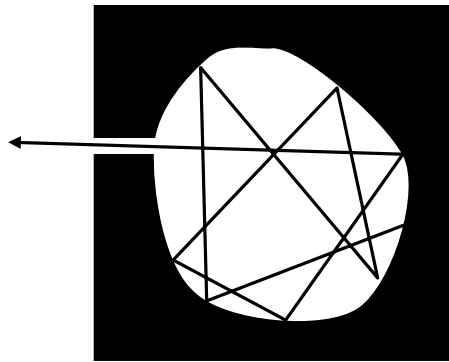
Παράδειγμα 1^ο: Η ακτινοβολία μέλανος (μαύρου) σώματος

Ορισμός: Σώμα που απορροφά τελείως H/M ακτινοβολία οποιασδήποτε συχνότητας.

Αναγκαστικά μπορεί και να την εκπέμψει – Συνεχές φάσμα.

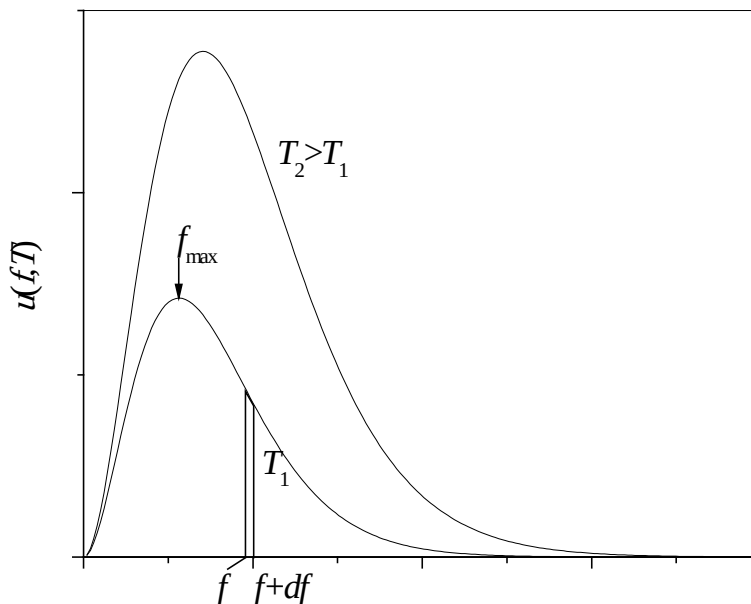
Τέτοια σώματα μπορούν να θεωρηθούν τα στερεά σε μεγάλες θερμοκρασίες

Μοντέλο: Κοιλότητα θερμοκρασίας T σε θερμική ισορροπία με την H/M ακτινοβολία



Απορρόφηση
&
Επανεκπομπή
Συνεχής ανταλλαγή
ενέργειας μεταξύ
κοιλότητας και
ακτινοβολίας

Το Πείραμα:



Τα πειραματικά δεδομένα (Νόμοι):

1. Καμπύλη (κατανομή) “φασματικής πυκνότητας ενέργειας”,

$$u(f, T)df = \frac{dE}{V} \quad dE \text{ μέρος της H/M ενέργειας μεταξύ } f \text{ και } f+df$$

ανεξάρτητη του υλικού των τοιχωμάτων,

του σχήματος και του όγκου της κοιλότητας.

Εξαρτάται μόνο από τη θερμοκρασία (Απλότητα & Παγκοσμιότητα).

2. Σε μεγάλες συχνότητες η κατανομή ακολουθεί την εμπειρική καμπύλη

$$u = Af^3 e^{-\beta f / T} \quad \text{Wien}$$

Εμπειρικές σταθερές A, β ανεξάρτητες από τη θερμοκρασία το σχήμα και τον όγκο της κοιλότητας.

3. Η συχνότητα μέγιστης εκπομπής μετατοπίζεται ανάλογα με τη θερμοκρασία

$$f_{\max} = \text{σταθερά} \cdot T$$

Η σταθερά ανεξάρτητη του υλικού των τοιχωμάτων,

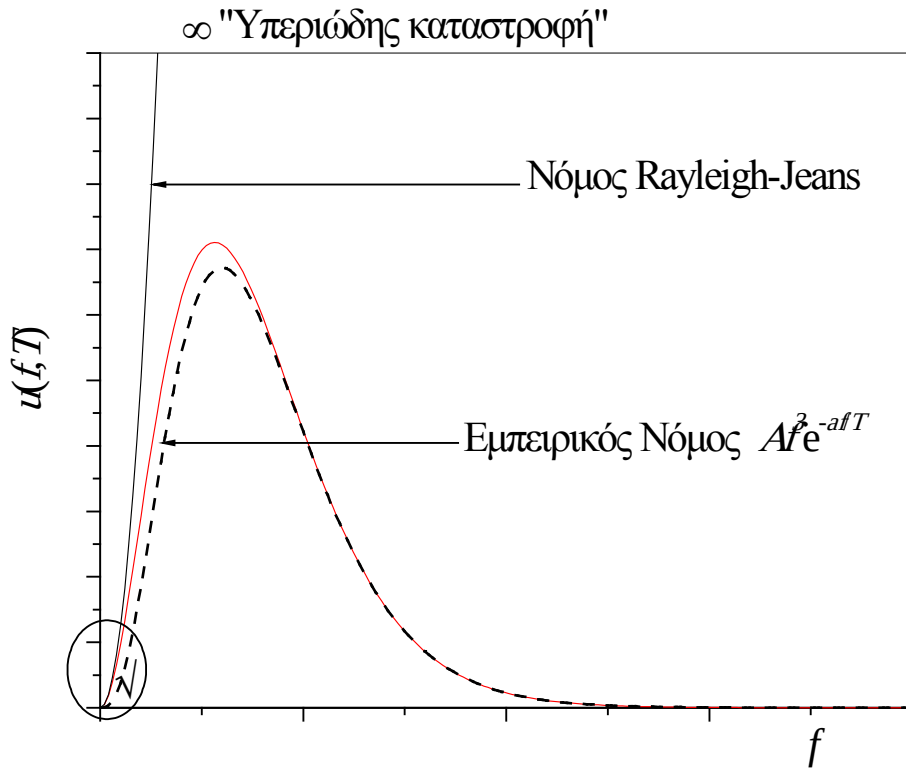
του σχήματος και του όγκου της κοιλότητας.

4. Η ολική H/M ενέργεια της κοιλότητας είναι ανάλογη της T^4

$$\int_0^{\infty} u(f, T)df \propto \sigma T^4$$

σ , σταθερά Stefan-Boltzmann Μη-ιδανικό μαύρο σώμα, $\sigma \rightarrow \alpha\sigma$, $\alpha < 1$

Η αποτυχία της κλασικής ερμηνείας:



Η εμπειρική έκφραση του Planck
καλύπτει όλες τις περιοχές συχνοτήτων:

$$u(f, T) = A \frac{f^3}{e^{\beta f/T} - 1}$$

... και την εξήγαγε απαιτώντας ώστε να καταλήγει
στις γνωστές σχέσεις στις περιοχές όπου αυτές ισχύουν....

$$f \sim 0, e^{\beta f/T} \sim 1 + \beta f/T$$

$$f \gg, e^{\beta f/T} \gg 1$$

Τώρα ήξερε τι έπρεπε να αποδείξει. Έπρεπε ακόμη να εκφράσει τις A και β μέσω θεμελιωδών σταθερών.

Planck

Μικροσκοπικοί
ταλαντωτές στα
τοιχώματα της κοιλότητας
εκπέμπουν στη συχνότητα
ταλάντωσης τους

Rayleigh

Οι ταλαντωτές είναι
ισοδύναμοι με στάσιμα
κύματα στην κοιλότητα

$$u(f, T)df = \frac{dE}{V} \quad dE = \bar{E}dN \quad dN = \frac{8\pi f^2}{c^3} V df$$

(Μέση ενέργεια στασίμου κύματος) $\times$ (αριθμός στασίμων κυμάτων
στο διάστημα μεταξύ f και $f+df$).

Για να έχουμε ως τελικό
αποτέλεσμα την εμπειρική
σχέση του Planck
θα πρέπει...

$$\bar{E} = \frac{hf}{e^{hf/kT} - 1} = \frac{hf}{1 - e^{-hf/kT}} e^{-hf/kT}$$

Νέα εμπειρική σταθερά $h=k\beta$.

Αλλά...

$$\frac{1}{1 - e^{-hf/kT}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n(hf/kT)}$$

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \int_0^{\infty} EP(E)dE = \\ &= \frac{1}{\int_0^{\infty} e^{-E/kT} dE} \int_0^{\infty} E e^{-E/kT} dE = \\ &= kT \end{aligned}$$

$$u(f, T)df = kT \frac{8\pi f^2}{c^3} df$$

Υπεριώδης καταστροφή

Planck

ε, τότε μήπως...;

$$\begin{aligned}\bar{E} &= \sum_{n=0}^{\infty} E_n \cdot P_n = \\ &= \frac{1}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-E_n/kT}} \sum_{n=0}^{\infty} E_n \cdot e^{-E_n/kT}\end{aligned}$$

Με... $E_n = n(hf)$

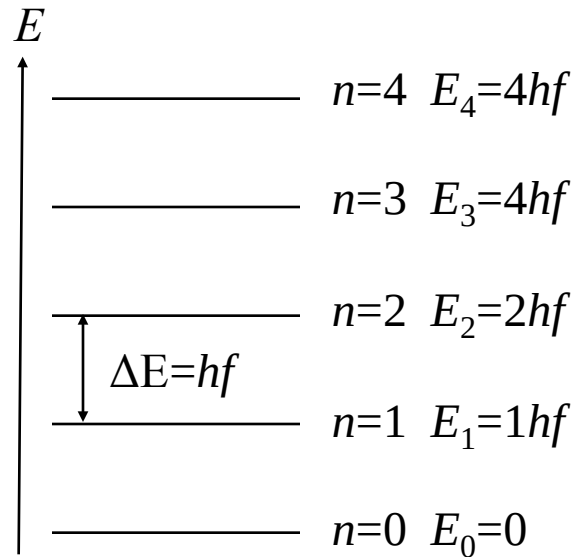
Πράγματι...

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{\infty} n(hf) \cdot e^{-n(hf)/kT} &= \\ &= -\frac{d}{d(1/kT)} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n(hf)/kT} = \\ &= -\frac{d}{d(1/kT)} \left(\frac{1}{1 - e^{-hf/kT}} \right)\end{aligned}$$

και τελικά...

$$u(f, T)df = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{f^3}{e^{hf/kT} - 1} df$$

Οι παραδοχές & συνέπειες...



Οι ενεργειακές δοσοληψίες
ύλης-ακτινοβολίας
συμβαίνουν κατά ασυνεχή τρόπο.

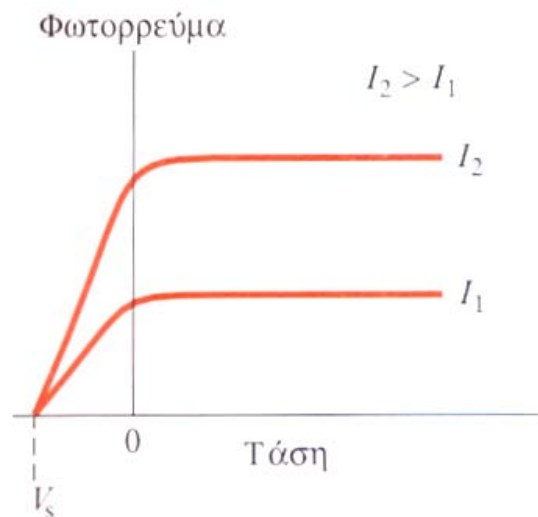
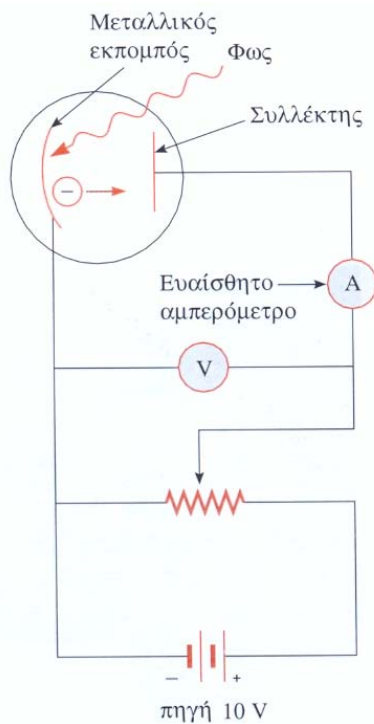
Οι “ταλαντωτές”
απορροφούν ή εκπέμπουν
ενέργεια κατά
ασυνεχείς ποσότητες ίσες με
 hf (διαστάσεις h ;))

Κατά Planck, το ελεύθερο Η/Μ
πεδίο εξακολουθεί να έχει τον
κλασσικό συνεχή χαρακτήρα του.

Α. Η Σωματιδιακή Φύση των Κυμάτων

Παράδειγμα 2ο: Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο: Η εκπομπή ηλεκτρονίων από ένα μέταλλο που προκαλείται από την πρόσπτωση ακτινοβολίας (κυρίως υπεριώδους) στην επιφάνειά του.



Πειραματικές παράμετροι: Συχνότητα f και ένταση I φωτεινής δέσμης, τάση V και πολικότητα της ηλεκτρικής πηγής, είδος μετάλλου.

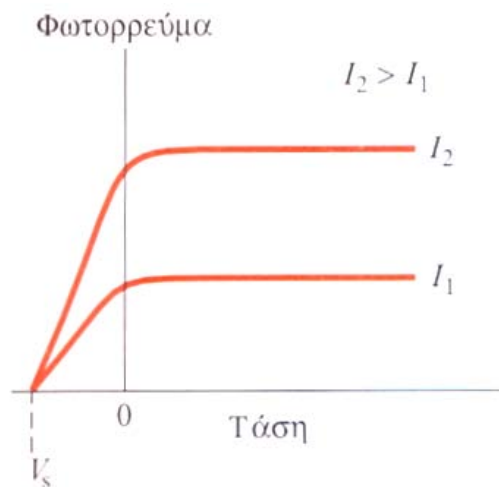
Μετρούμενα μεγέθη: Ένταση φωτορεύματος $I_\phi(V)$.

Τα πειραματικά δεδομένα (Νόμοι):

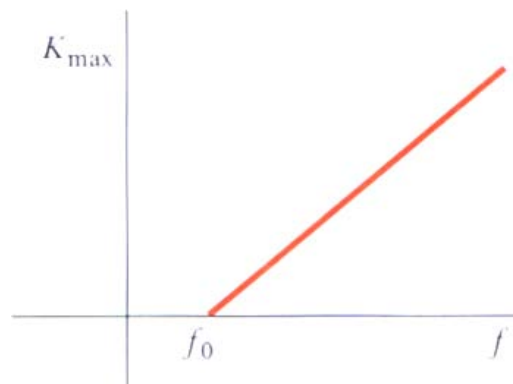
1. Το φωτορεύμα αυξάνει ανάλογα με τη φωτεινή ένταση

$$I_{\phi} \propto I$$

2. Η μέγιστη ταχύτητα (κινητική ενέργεια) των εκπεμπόμενων ηλεκτρονίων δεν εξαρτάται από τη φωτεινή ένταση αλλά μόνο από τη συχνότητα της ακτινοβολίας.



3. Φωτορεύμα εμφανίζεται μόνο για συχνότητες f μεγαλύτερες ή ίσες μιας ελάχιστης τιμής f_0 , χαρακτηριστικής για κάθε μέταλλο.



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

Ερμηνεία (ή αδυναμία ερμηνείας) στα πλαίσια της Κλασικής Φυσικής

Το προσπίπτον ΗΜ κύμα ασκεί δύναμη στα ηλεκτρόνια μεταβιβάζοντας τους ενέργεια, η οποία όταν ξεπεράσει μια ορισμένη τιμή οδηγεί στην απόσπασή τους από το μέταλλο. ☒

$$\vec{F} = -e\vec{E}$$

Εφόσον $I \propto E^2$, αύξηση I σημαίνει αύξηση E (και B), συνεπώς και αύξηση της F . Όμως, μεγαλύτερη δύναμη σημαίνει και μεγαλύτερος ρυθμός εξαγωγής (I_ϕ). ☒

Μεγαλύτερη I σημαίνει μεγαλύτερο E (και B), μεγαλύτερη F , μεγαλύτερη επιτάχυνση, συνεπώς και μεγαλύτερη ταχύτητα και κινητική ενέργεια. ?

Η συχνότητα f της ακτινοβολίας δεν φαίνεται να παίζει κανένα ρόλο. ?

Εφόσον η συχνότητα δεν παίζει κανένα ρόλο δεν προβλέπεται οριακή συχνότητα f_o . ?

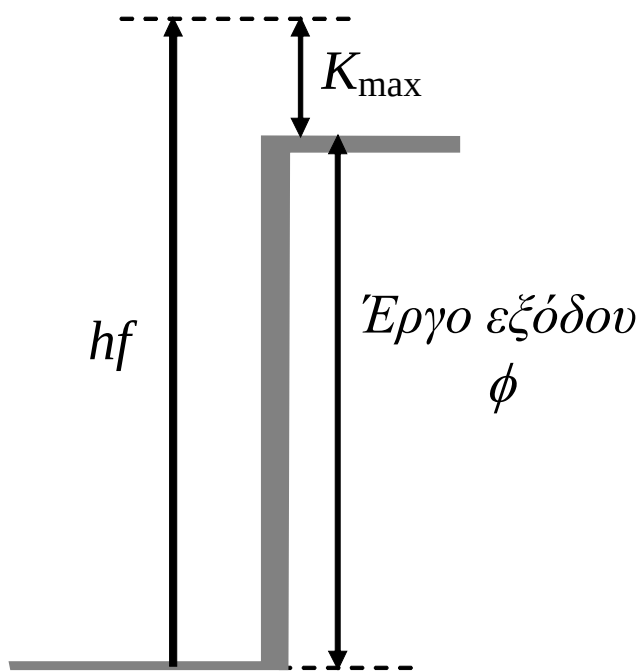
Η μεταβίβαση της ενέργειας από το πεδίο στα ηλεκτρόνια είναι βαθμιαία και απαιτεί χρονική διάρκεια που κυμαίνεται από μερικά λεπτά έως και μερικές ώρες. ?

A. Einstein (1905)

“...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.”

Ενέργεια ενός κβάντου φωτός (φωτονίου): $E = hf$

$$K_{\max} = hf - \phi$$



$$K_{\max} = \frac{1}{2} m_e v_{\max}^2$$

$$K_{\max} = 0, \quad hf_o = \phi$$

$$K_{\max} = eV_s$$

Το φωτόνιο (η ενέργεια ενός φωτονίου) είτε απορροφάται εξ' ολοκλήρου είτε δεν απορροφάται καθόλου.

Ερμηνεία στα πλαίσια της Φωτονικής Θεωρίας

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. $I_{\phi} \propto I$ ✓

Η $K_{\max}$ δεν εξαρτάται από την φωτεινή ένταση αλλά μόνο από τη συχνότητα f . ✓

Προβλέπεται ελάχιστη τιμή f_0 , που προσδιορίζεται μόνο από το έργο εξαγωγής ϕ του εκάστοτε μετάλλου. ✓

Η απορρόφηση ενός φωτονίου πραγματοποιείται “ακαριαία” (ακριβέστερα εντός $<1 \text{ ns} = 10^{-9} \text{ s}$). ✓



Planck

Einstein

Η ύλη απορροφά ή εκπέμπει ΗΜ ακτινοβολία κατά ασυνεχείς ενεργειακές ποσότητες hf

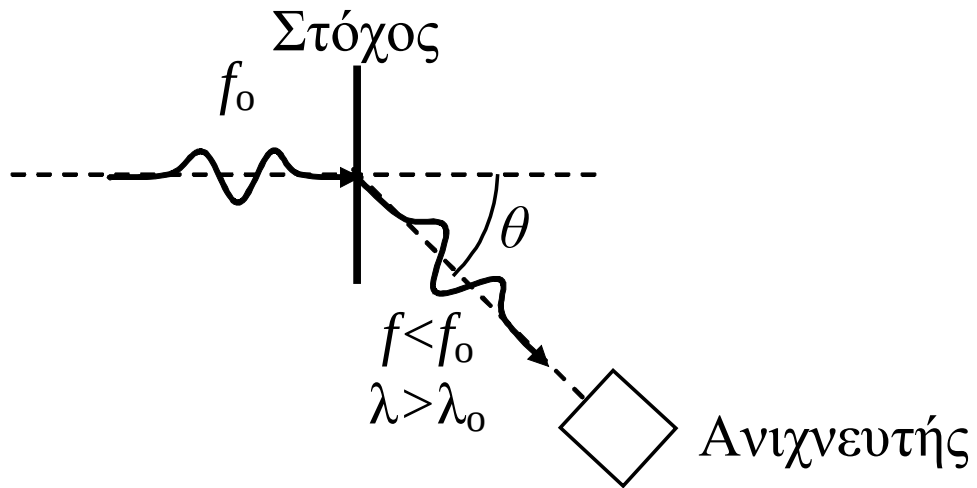
Το ελεύθερο Η/Μ πεδίο εξακολουθεί να έχει τον κλασσικό συνεχή χαρακτήρα του.

Η ενέργεια του ελεύθερου ΗΜ κύματος δεν είναι συνεχώς κατανεμημένη στο χώρο. Αποτελείται από αριθμό εντοπισμένων στο χώρο αδιαίρετων φωτονίων (ως να είναι σωματίδια).

Α. Η Σωματιδιακή Φύση των Κυμάτων

Παράδειγμα 3^ο: Φαινόμενο Compton

Φαινόμενο Compton: Σκέδαση Η/Μ ακτινοβολίας (ακτίνες Χ)
από “ελεύθερα” φορτισμένα σωματίδια (ηλεκτρόνια)

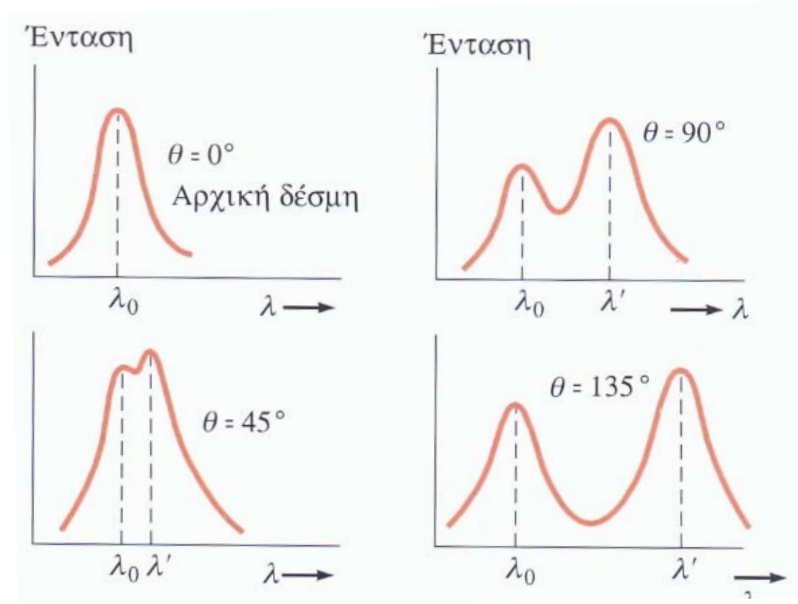


Πειραματικές παράμετροι: Συχνότητα f_0 , ένταση I_0 της
εισερχόμενης ακτινοβολίας
και γωνία θ .

Μετρούμενα μεγέθη: Συχνότητα f και ένταση I της
σκεδαζόμενης ακτινοβολίας
για κάθε γωνία θ .

Τα πειραματικά δεδομένα:

Η συχνότητα f της σκεδαζόμενης H/M ακτινοβολίας είναι μικρότερη της εισερχόμενης f_0 , δεν εξαρτάται ούτε από την ένταση I_0 ούτε από το χρόνο ακτινοβόλησης. Εξαρτάται μόνον από τη γωνία σκέδασης θ .



Ερμηνεία (ή αδυναμία ερμηνείας) στα πλαίσια της Κλασικής Φυσικής

Το ταλαντούμενο ηλεκτρικό πεδίο του προσπίπτοντος H/M κύματος θέτει σε ταλάντωση το ηλεκτρόνιο με συχνότητα ίση με f_0 . Με τη σειρά του το ταλαντούμενο ηλεκτρόνιο εκπέμπει (λόγω της επιτάχυνσής του) ένα δευτερογενές H/M κύμα με συχνότητα ίση με τη συχνότητα της ταλάντωσής του (f_0). ?

Λαμβάνοντας υπόψη τη (διπλή) μετατόπιση Doppler αναμένουμε ότι η συχνότητα του εκπεμπόμενου κύματος $f < f_0$. ✓

Η αλληλεπίδραση κύματος-ηλεκτρονίου πραγματοποιείται βαθμιαία. Αναμένεται εξάρτηση της f από το χρόνο ακτινοβόλησης. ?

Αναμένεται εξάρτηση της f από την ένταση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. ?

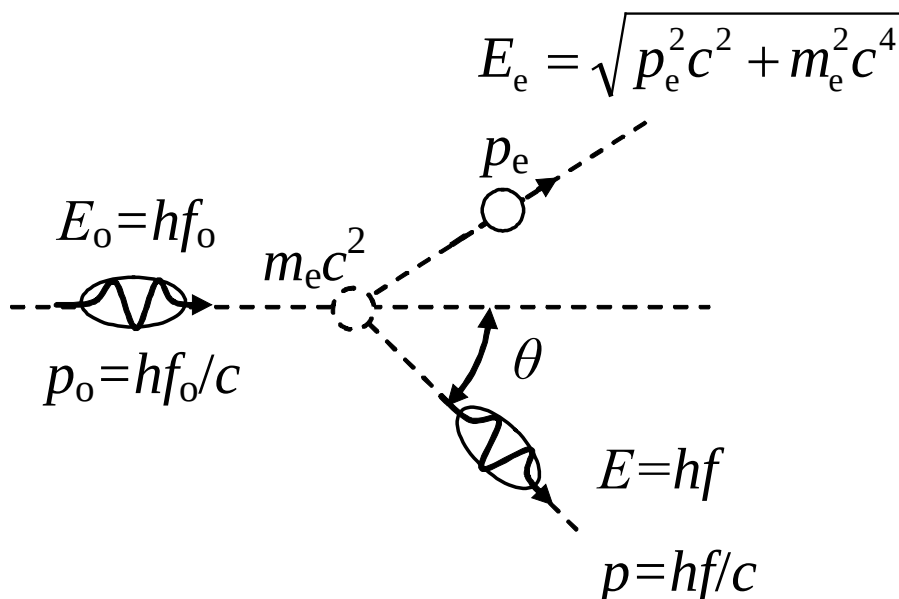
Ερμηνεία στα πλαίσια της Φωτονικής Θεωρίας

A. Einstein (1919)

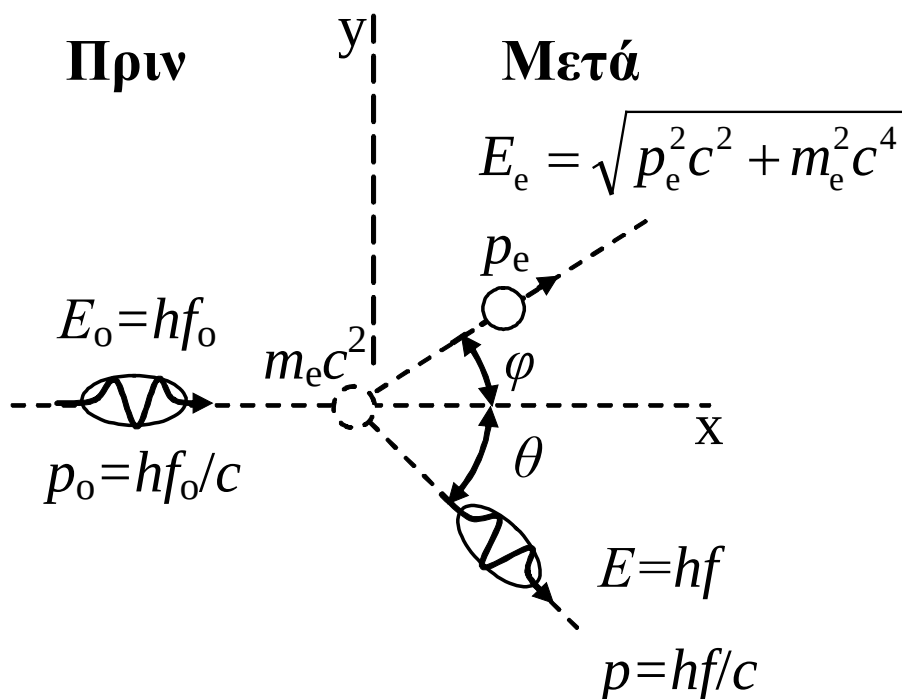
“...εάν μια δέσμη ακτινοβολίας προκαλεί στο μόριο την εκπομπή ή απορρόφηση μιας ποσότητας ενέργειας hf , τότε μεταφέρεται στο μόριο ορμή μεγέθους hf/c κατά την κατεύθυνση της προσπίπτουσας δέσμης, όταν πρόκειται για απορρόφηση, και αντίθετα προς αυτήν όταν πρόκειται για εκπομπή.”

P. Debye, A. Compton (1923)

Τα πειραματικά αποτελέσματα μπορούν να εξηγηθούν εάν θεωρήσουμε τα φωτόνια ως σημειακά σωματίδια ενέργεια hf και ορμής hf/c , και εφαρμόσουμε την αρχή διατήρησης της σχετικιστικής ενέργειας και ορμής για το ζεύγος φωτονίου-ηλεκτρονίου.



Το φωτόνιο έχει μηδενική μάζα ηρεμίας.



Διατήρηση Ενέργειας

$$E_o + m_e c^2 = E + E_e$$

Διατήρηση ορμής
(x-συνιστώσα)

$$p_o = p_e \cos \varphi + p \cos \theta$$

Διατήρηση ορμής
(y-συνιστώσα)

$$0 = p_e \sin \varphi - p \sin \theta$$

$$\frac{1}{f} - \frac{1}{f_o} = \frac{h}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)$$

$$\Delta \lambda = \lambda - \lambda_o = \lambda_C (1 - \cos \theta)$$

$$\lambda f = c$$

$$\lambda_C = \frac{h}{m_e c}$$

$$\hbar_C = \frac{\hbar}{m_e c}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Πειραματικά...

1. Ποιο μήκος κύματος πρέπει να χρησιμοποιηθεί εάν, για την άνετη παρατήρηση του φαινομένου πρέπει η σχετική μεταβολή $\Delta\lambda/\lambda_0 \sim 1-5\%$;

$$\theta = 90^\circ$$

$$\Delta\lambda = \lambda_C = 0.00243 \text{ nm}$$

Ορατό φως $\lambda_0 = 546.1 \text{ nm}$ $\Delta\lambda/\lambda_0 = 4.45 \times 10^{-4}\%$

×

Ακτίνες X (μολυβδένιο) $\lambda_0 = 0.0712 \text{ nm}$ $\Delta\lambda/\lambda_0 = 3.41\%$

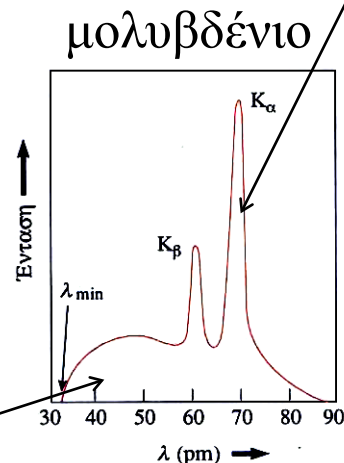
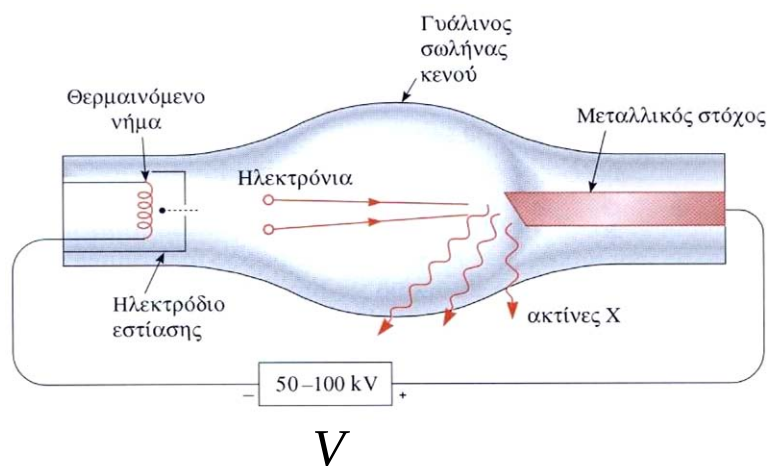
☒

Ακτίνες X (κοβάλτιο) $\lambda_0 = 0.00106 \text{ nm}$ $\Delta\lambda/\lambda_0 = 229\%$

☒

2. Πως παράγονται οι ακτίνες X;

Compton



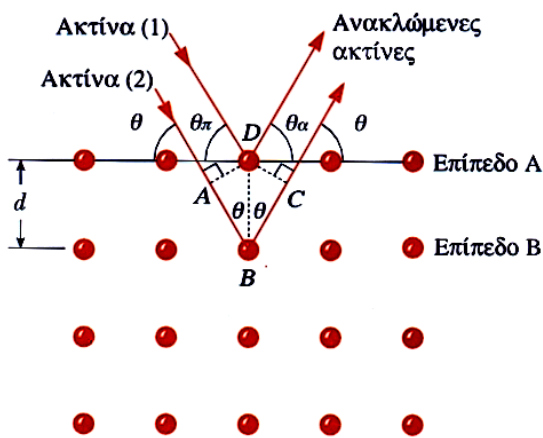
Ακτινοβολία πέδησης $\longrightarrow eV = hf_{\max} = \frac{hc}{\lambda_{\min}}$

Πειραματικά...

3. Πως θα έχουμε μονοχρωματική αρχική δέσμη ακτίνων X και πως θα μετρήσουμε το μήκος κύματος των σκεδαζόμενων ακτίνων X ;

Χρησιμοποιούμε “φράγμα” περίθλασης με απόσταση μεταξύ χαραγών συγκρίσιμη με το μήκος κύματος:

→ φυσικοί κρύσταλλοι (Max von Laue, W. H. & W.L. Bragg)



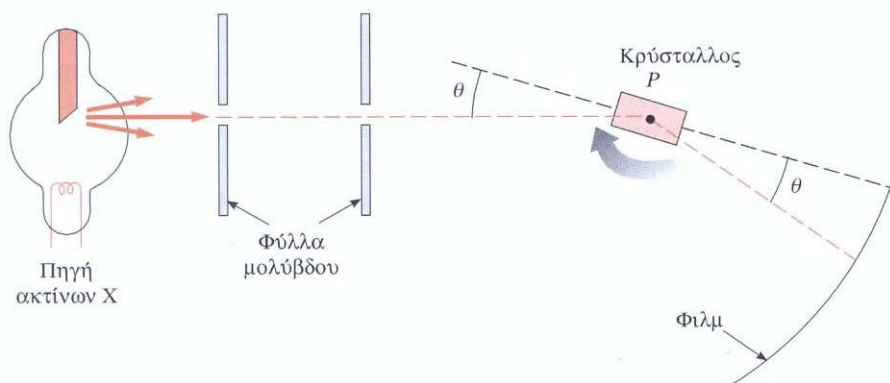
$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

$$n = 1, 2, \dots$$

Για δεδομένη απόσταση ανακλαστικών επιπέδων

&

δεδομένο μήκος κύματος, ανάκλαση παρατηρείται μόνο σε συγκεκριμένες γωνίες μετά από ενισχυτική συμβολή. Για όλες τις άλλες γωνίες η συμβολή είναι καταστροφική.



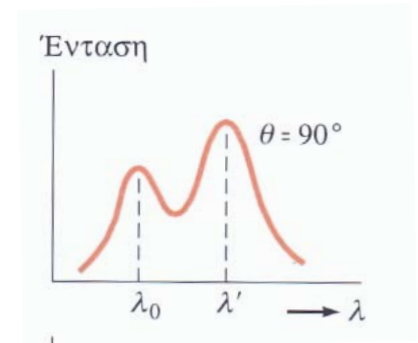
Πειραματικά...

4. Τα “ελεύθερα” ηλεκτρόνια είναι πραγματικά ελεύθερα;

Όχι, είναι ηλεκτρόνια αγωγιμότητας με ενέργεια σύνδεσης $\sim 4 \text{ eV}$ (για τον άνθρακα). Αλλά $\lambda_0 = 0.0712 \text{ nm}$ σημαίνει $hf = 17.4 \text{ keV}$ και συνεπώς αυτή η ενέργεια σύνδεσης είναι αμελητέα.

5. Γιατί υπάρχει και σκέδαση σε μήκος κύματος λ_0 ;

Η σκέδαση αυτή προέρχεται από ισχυρώς δέσμια ηλεκτρόνια που παραμένουν “ακίνητα” τόσο πριν όσο και μετά την κρούση με το φωτόνιο.



$$hf_0 + m_e c^2 = hf + m_e c^2 \rightarrow f = f_0$$

Ισχυρώς δέσμια ηλεκτρόνια vs ηλεκτρόνια αγωγιμότητας:
Μια πρώτη ένδειξη ύπαρξης στοιβάδων.

Α. Η Σωματιδιακή Φύση των Κυμάτων

Σύνοψη.

Τελικά τι είναι 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;

Πρέπει να θυμόμαστε ότι διαχωρισμός υπάρχει μόνο 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”

Ο μικρόκοσμος μας προτρέπει να υιοθετήσουμε μια πιο ευέλικτη και ευμετάβλητη φύση για το φως όπου τόσο η κυματική όσο και η σωματιδιακή φύση του είναι απαραίτητες και συμπληρωματικές.

B. Σωματιδιακή Φύση της Ύλης

Συστατικά της ύλης:

Αρχαία Ελλάδα (~4^{ος} αιώνας π.Χ.). Μεταξύ άλλων φιλοσοφικών θεωριών (χωρίς πειραματική απόδειξη...)

Δημόκριτος – Λεύκιππος: Ατομική Θεωρία

- Η ύλη είναι ασυνεχής (Σ), αποτελείται από άτομα, δηλαδή ά-τμητα σωματίδια (Λ)
- Τα άτομα διαφέρουν κατά το σχήμα ($\sim$) και κατά το μέγεθος ($\sim \Sigma$)
- Δεν καταστρέφονται ($\sim$) και δεν δημιουργούνται εκ του μηδενός (Σ)
- Βρίσκονται σε συνεχή κίνηση (Σ)
- Φυσικά και Χημικά φαινόμενα οφείλονται σε κίνηση των ατόμων ($\sim$)
- Χημικές ενώσεις $\rightarrow$ ένωση ατόμων ($\Sigma!$)
- Διάσπαση Χημικών ενώσεων $\rightarrow$ Αποχωρισμός ατόμων ($\Sigma!$)

Καταπολεμήθηκε από Πλάτωνα και Αριστοτέλη και έπεσε στην αφάνεια έως ότου.....

Συστατικά της ύλης:

...οι χημικοί των αρχών του 19^{ου} αιώνα (Dalton) έχουν στα χέρια τους σειρά πειραματικών δεδομένων που στηρίζουν την Ατομική Θεωρία

Στο τέλος του 19^{ου} αιώνα τα πειραματικά δεδομένα συνοψίζονται ως εξής:

- Τα άτομα είναι ηλεκτρικά ουδέτερα.
- Τα άτομα έχουν δομή (όχι ά-τμητα) και μάλιστα περιέχουν ηλεκτρόνια (J.J. Thomson) που είναι αρνητικά φορτισμένα. Συνεπώς πρέπει να περιέχουν και μια ίση ποσότητα θετικού φορτίου.
- Τα θετικά φορτισμένο τμήμα του ατόμου συγκεντρώνει σχεδόν το σύνολο της μάζας του διότι...
- ...η μάζα των ατόμων πολύ μεγαλύτερη αυτής των ηλεκτρονίων (μάζα ατόμων προσεγγιστικά γνωστή από τη Χημεία).
- Το μέγεθος των ατόμων προσεγγιστικά γνωστό από τη Χημεία ($\sim 10^{-10}$ m).

Από τον Faraday (1833) στον Rutherford (1910)

...μέσω του J.J. Thomson (1897) και του Millikan (1909).

1. Faraday: Η ηλεκτρόλυση

Διαπίστωσε ότι εάν φορτίο 96500 Cb (1 Faraday)

διέλθει από τήγμα NaCl, συλλέγονται

23 gr Na (κάθοδος) και 35.5 gr Cl (άνοδος).

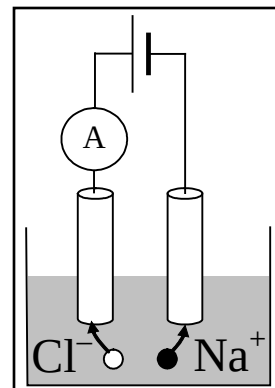
Δηλαδή ακριβώς 1 gr-at κάθε (μονοσθενούς)

στοιχείου. Η γενίκευση για δισθενή ή τρισθενή άτομα γράφεται:

$$m = \frac{q \cdot [\text{gr-at}]}{96500 \cdot [\text{σθένος}]}$$

όπου η μάζα m και το [gr-at] εκφρασμένα σε gr και το φορτίο q σε Cb.

Π.χ. Πόσα gr Ba και Cl θα πάρουμε διοχετεύοντας ρεύμα $I=10$ A για μια ώρα σε τήγμα BaCl_2 ; Δίδεται ότι το Ba είναι δισθενές και το Cl μονοσθενές και ότι $[\text{gr-at}]_{\text{Ba}}=137$ gr και $[\text{gr-at}]_{\text{Cl}}=35.5$ gr.



Οι Συνέπειες... (αν και δεν έγιναν άμεσα αντιληπτές)

- Η ύλη απαρτίζεται από μόρια που με τη σειρά τους απαρτίζονται από άτομα.
- Το φορτίο είναι κβαντωμένο (διάκριτο) αφού μόνο ακέραιος αριθμός φορτίων φτάνει στα ηλεκτρόδια.
- Τα άτομα δεν είναι ά-τμητα, αποτελούνται από υποατομικά σωματίδια θετικά και αρνητικά φορτισμένα. Η μάζα των σωματιδίων αυτών και η λεπτομερής δομή του ατόμου: άγνωστες.

2. J.J. Thomson: Ανακάλυψη του ηλεκτρονίου (και όχι μόνο)

Καθοδικές ακτίνες: Εκπέμπονται από την κάθοδο (-) ενός σωλήνα κενού. Ανακαλύφθηκαν το 1869 (Hithorf). Η διαμάχη για τη φύση τους κράτησε ~30 χρόνια. Αναφέρθηκαν ιδέες όπως των ηλεκτρικά φορτισμένων ατόμων (Crookes) και των «κυμάτων αιθέρα», μιας νέας μορφής H/M κυμάτων (Wiedemann, Hertz, Goldstein).

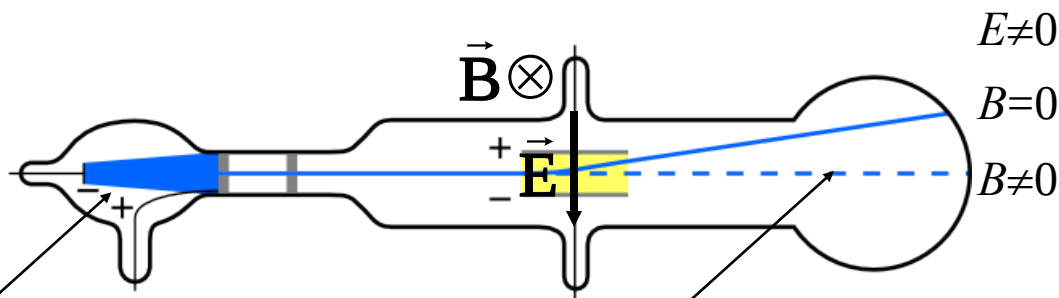


Το 1897 ο J. J. Thomson αποδεικνύει ότι:

- Πρόκειται για δέσμες αρνητικά φορτισμένων σωματιδίων (αργότερα ονομάστηκαν ηλεκτρόνια).
- Είναι υπεύθυνα για το ηλεκτρικό ρεύμα στα μεταλλικά σύρματα.
- Μετρά το λόγο q/m , κάνει μια εκτίμηση της m και τη βρίσκει ~1000 φορές μικρότερη της μάζας του ελαφρύτερου ατόμου (H).
- Τα ίδια σωματίδια παράγονται μέσω του φωτοηλεκτρικού φαινομένου καθώς και από μερικά ραδιενεργά υλικά. Συνεπώς...
- Είναι συστατικά όλων των ατόμων και, ιδιαίτερα, αποτελούν το συστατικό που φέρει το αρνητικό φορτίο τους.

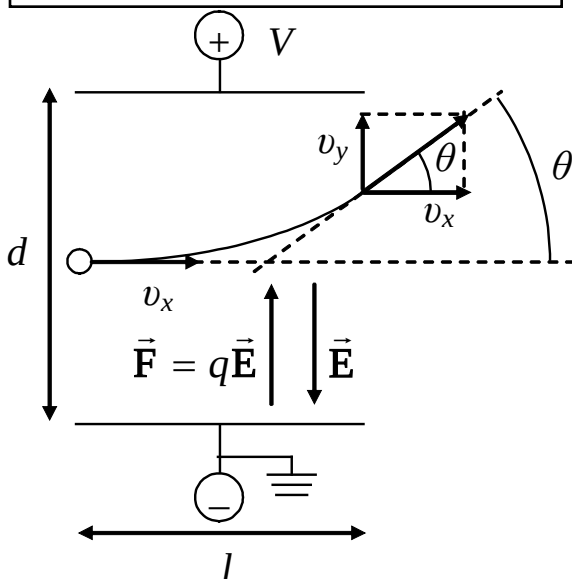
2. J.J. Thomson: Ανακάλυψη του ηλεκτρονίου

Το πείραμα...



Παραγωγή μέσω
ιονισμένων ατόμων
(ηλεκτρική εκκένωση)
ή θερμοϊονικής εκπομπής.

$$E \neq 0 \quad B = 0$$



$$\tan \theta = \frac{v_y}{v_x}$$

$$v_y = at$$

$$l = v_x t$$

$$F = ma = qE = q \frac{V}{d}$$

$$\rightarrow \tan \theta = \frac{q}{m} \frac{l}{d} \frac{V}{v_x^2}$$

$$E \neq 0 \quad B \neq 0$$

$$qE = qv_x B \rightarrow v_x = \frac{1}{B} \frac{V}{d}$$

Κινηματική:

Αρχή ανεξαρτησίας
των κινήσεων...

$$\frac{q}{m} = \frac{V}{l d B^2} \tan \theta$$

2. J.J. Thomson: Ανακάλυψη του ηλεκτρονίου

Το πείραμα...

... βρίσκει $q/m = 1.0 \times 10^{-11}$ Cb/kg

(σημερινή αποδεκτή τιμή $1.7588... \times 10^{-11}$ Cb/kg).

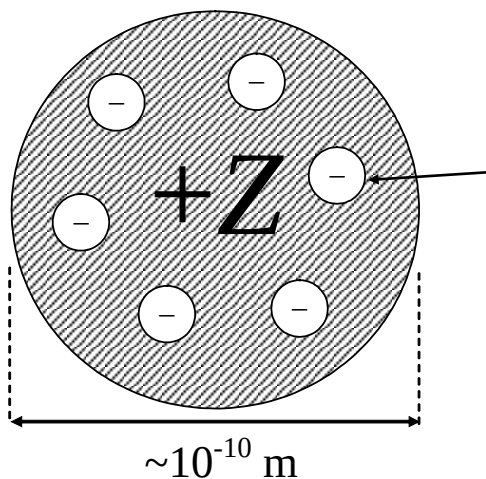
...από την ηλεκτρόλυση ιόντων Υδρογόνου γνωρίζει ότι

$$(q/m)_H \sim 1 \times 10^{-8} \text{ Cb/kg}$$

...συνεπώς τα νέα σωματίδια είναι ~ 1000 φορές ελαφρύτερα.

...επαναλαμβάνοντας το πείραμα για διάφορα μέταλλα καθόδου βρίσκει τον ίδιο ακριβώς λόγο $\rightarrow$ τα σωματίδια αυτά είναι κοινά σε όλη την ύλη.

Με βάση τα αποτελέσματα αυτά ο J.J. Thomson προτείνει το ατομικό μοντέλο του “σταφιδόψωμου”,

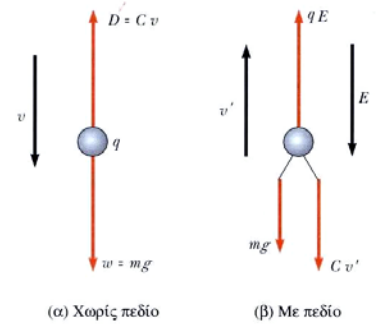
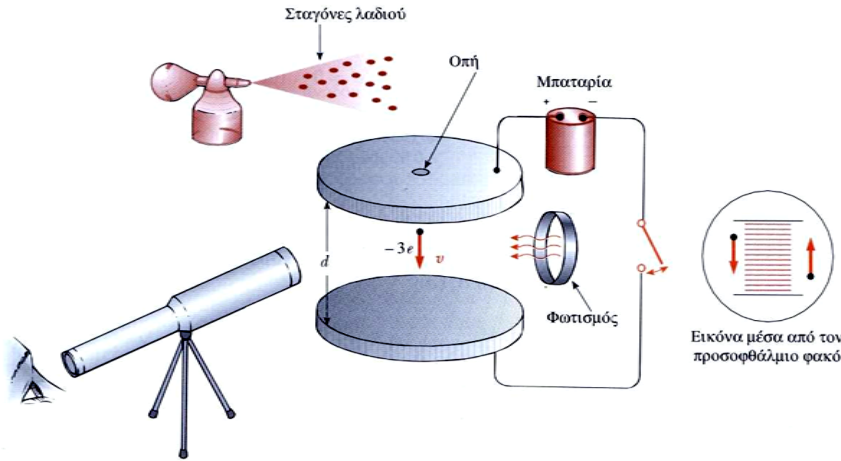


Z τον αριθμό
ομοιόμορφα
κατανεμημένα
ηλεκτρόνια

...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.

3. R. Millikan: Προσδιορισμός του φορτίου του ηλεκτρονίου $-e$

Πείραμα του «μαρτυρίου της σταγόνας» λαδιού (1909)



Σε κάθε περίπτωση $\Sigma F=0$

$$\begin{cases} (6\pi a \xi) v - mg = 0 & E = 0, \text{κάθοδος} \\ qE - mg - (6\pi a \xi) v' = 0 & E \neq 0, \text{άνοδος} \end{cases}$$

$$q = ne = \frac{mg}{E} \frac{v + v'}{v}$$

Φωτισμός με υπεριώδες φως $q \rightarrow q_1 = me (v' \rightarrow v'_1)$

$$\frac{q}{q_1} = \frac{n}{m} = \frac{v + v'}{v + v'_1}$$

Η μάζα της σταγόνας...

$$m = \rho V = \rho \frac{4}{3} \pi a^3 \quad (6\pi a \xi) v = mg \rightarrow a = \sqrt{\frac{9\xi v}{2\rho g}}$$

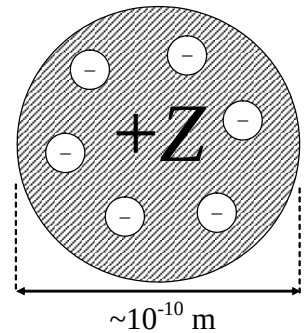
Με τη μέθοδο αυτή ο Millikan βρίσκει ότι $e = 1.69 \times 10^{-19} \text{ Cb}$ ($\pm 1\%$)

Σημερινή αποδεκτή τιμή... $e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ Cb}$

4. E. Rutherford: Ένα καλύτερο ατομικό μοντέλο

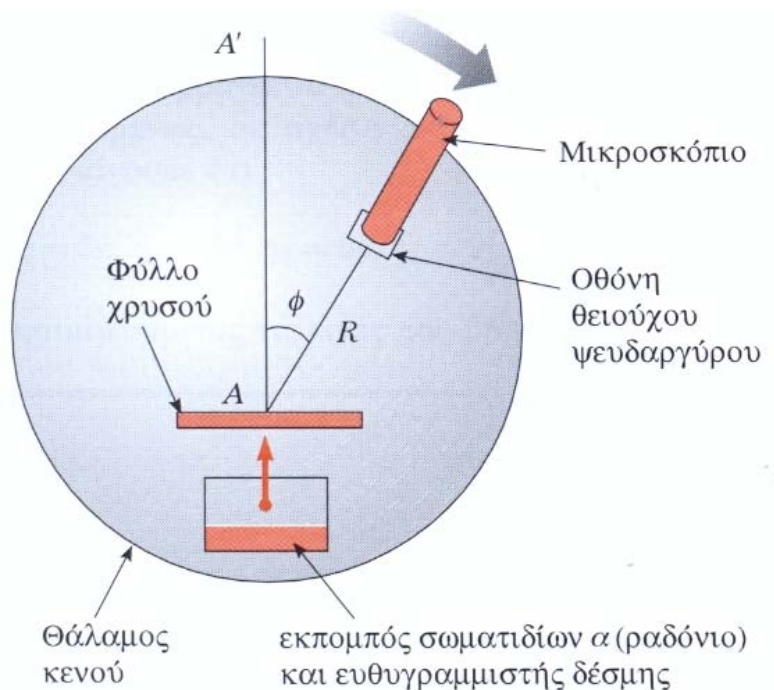
Για τη σκέδαση ατόμων με σωματίδια α (He^{++}), δηλαδή ταχεία ($\sim 8 \text{ MeV}$) θετικά φορτισμένα ($+2e$) σωματίδια μεγάλης μάζας ($4m_p$) το μοντέλο του J.J. Thomson προβλέπει...

- Καμία άπωση των σωματιδίων μακριά από το άτομο (ηλεκτρικά ουδέτερα άτομα) ☒
- Μηδαμινό ρόλο των ηλεκτρονίων. Η σκέδαση ουσιαστικά καθορίζεται μόνο από το θετικά φορτισμένο τμήμα του ατόμου ☒
- Μικρή άπωση κοντά στο άτομο και πεπερασμένη άπωση στο εσωτερικό του ατόμου. Σε κάθε περίπτωση μικρή γωνία σκέδασης ($\sim 1^\circ$) ακόμη και μετά από πολλαπλή σκέδαση ?



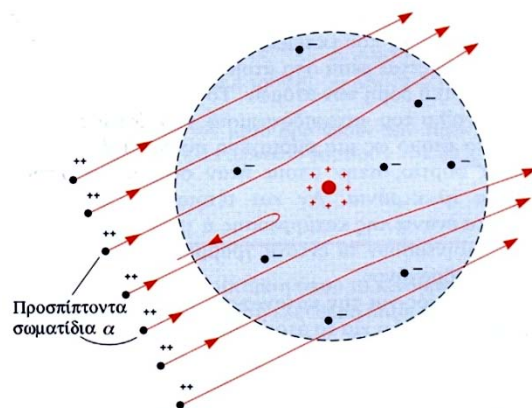
Ο Rutherford και οι συνεργάτες του ελέγχουν τις προβλέψεις αυτές...

...και επιβεβαιώνουν τις δύο πρώτες.



4. E. Rutherford: Ένα καλύτερο ατομικό μοντέλο

...όμως παρατηρούν
και σκέδαση σε μεγάλες γωνίες
(έως και $\sim 180^\circ$), σε πλήρη ασυμφωνία
με το μοντέλο.

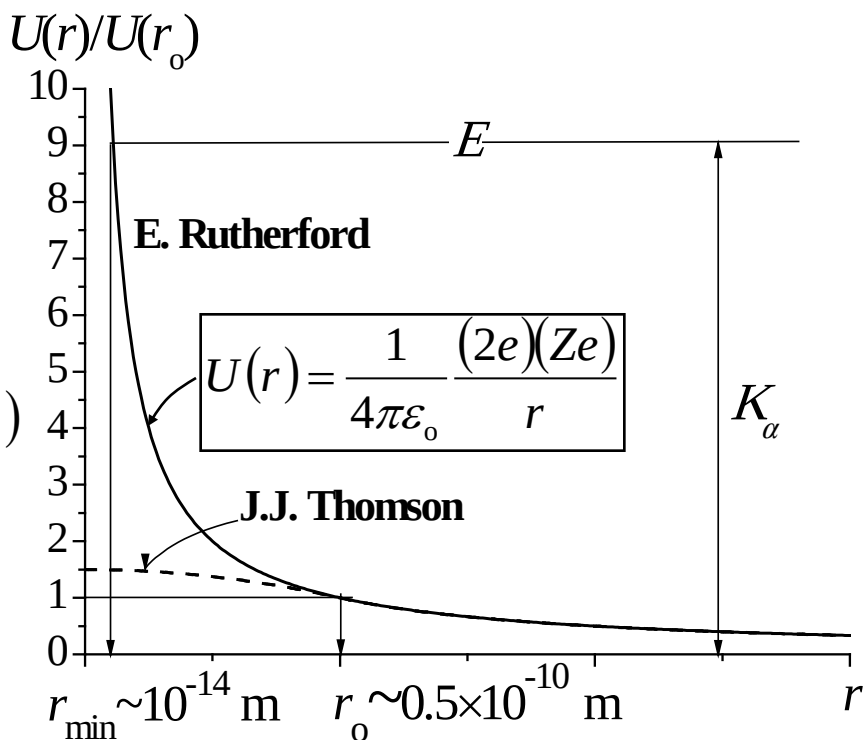


Τα αποτελέσματα εξηγούνται μόνον εάν υποθέσουμε μία και μοναδική κρούση με ένα σχεδόν σημειακό σωματίδιο με φορτίο $+Ze$ που αντιστοιχεί στη μισό του ατομικού βάρους.

Πράγματι, υποθέτοντας
μετωπική κρούση και
αγνοώντας τα ηλεκτρόνια...

$$E = K_a + U(r \rightarrow \infty) = U(r_{\min})$$

$$r_{\min} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{K_a}$$



$$K_a = 7.7 \text{ MeV} = 7.7 \times 10^6 \times 1.602 \times 10^{-19} \text{ J} = 12.335 \times 10^{-13} \text{ J}$$

$$Z=13 \text{ για το Αλουμίνιο} \rightarrow r_{\min} = 4.9 \times 10^{-15} \text{ m}$$

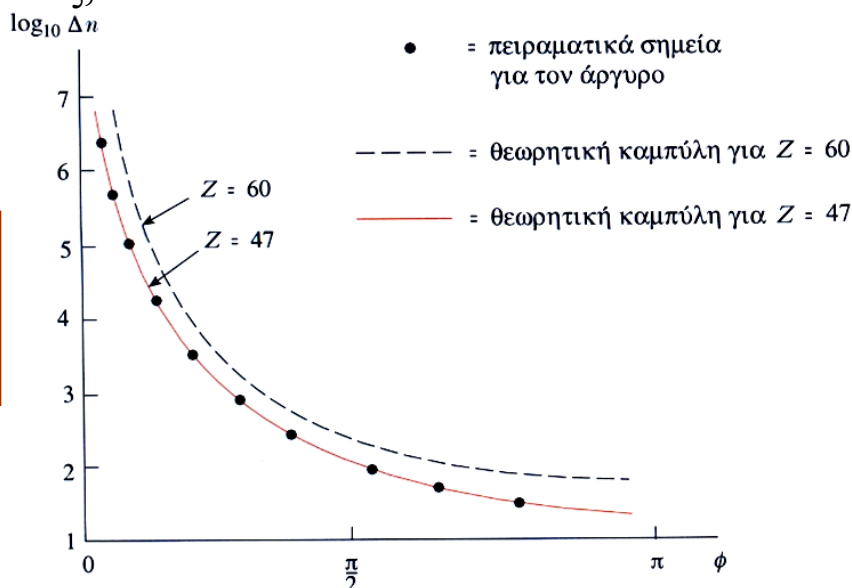
$$Z=79 \text{ για τον Χρυσό} \rightarrow r_{\min} \approx 30 \times 10^{-15} \text{ m}$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 8.99 \times 10^9 \text{ Nm}^2/\text{Cb}^2$$

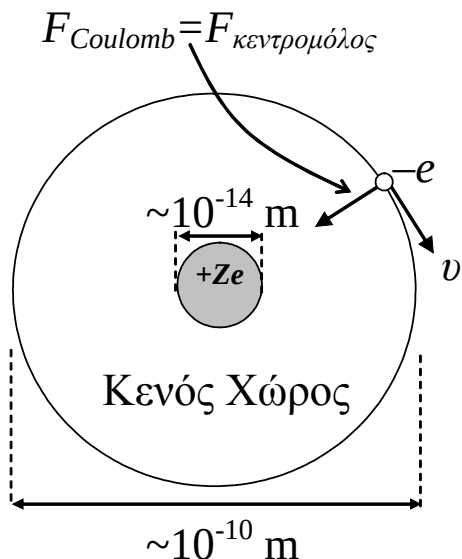
4. E. Rutherford: Ένα καλύτερο ατομικό μοντέλο

Πρόβλεψη: Ο αριθμός σωματιδίων α που ανιχνεύεται ανά μονάδα χρόνου σε γωνία ϕ γράφεται ως,

$$\Delta n \propto \frac{Z^2}{K_\alpha^2 \sin^4(\phi/2)}$$



Με αφετηρία την επιτυχή εξήγηση των πειραματικών δεδομένων από το μοντέλο (που όμως προβλέπει κατά τι μεγαλύτερες $r_{\min}$ από τις πραγματικές) ο Rutherford προτείνει μία νέα εικόνα για το άτομο.



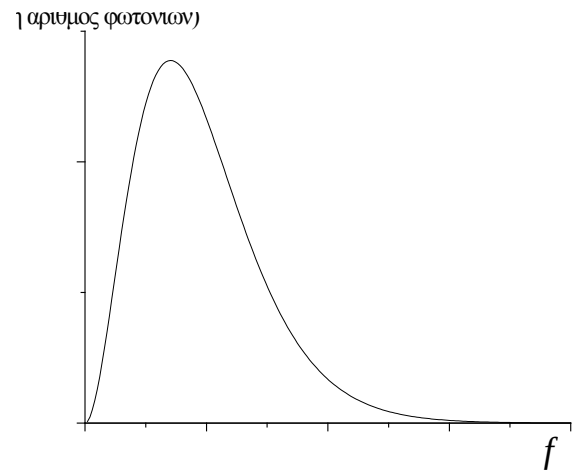
Αναλογία: Η ακίδα μιας καρφίτσας περιφέρεται σε κυκλική τροχιά ακτίνας 10 km γύρω από ένα κεράσι.

Αναπάντητα ερωτήματα:

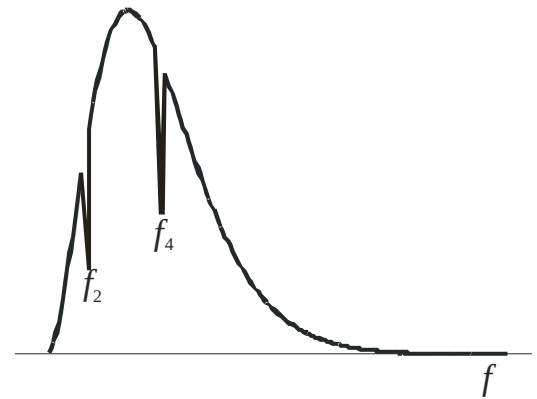
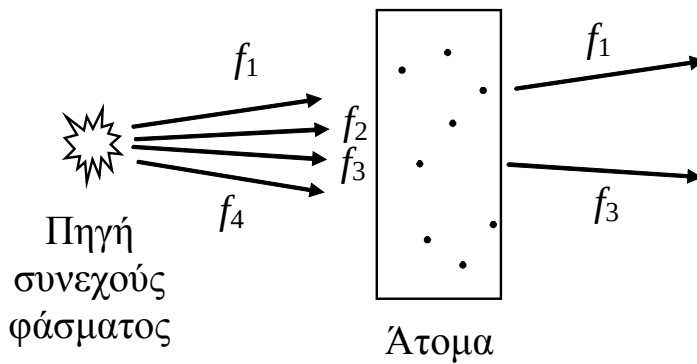
- Εάν στον πυρήνα υπάρχουν μόνο θετικά φορτία πως συγγρατούνται σε αυτόν (ένδειξη ύπαρξης δύναμης πολύ ισχυρότερης της ηλεκτρικής).
- Τι είναι η άλλη μισή (και πλέον) μάζα των πυρήνων; (Πιθανόν ζεύγη πρωτονίου-ηλεκτρονίου, σε συμφωνία με τη διάσπαση β; Το πρόβλημα θα λυθεί με την ανακάλυψη του νετρονίου).

5. Φασματοσκοπικά δεδομένα: Ήλιος, Ατομικά αέρια

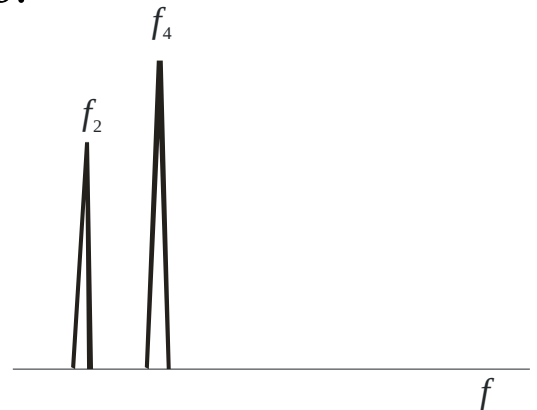
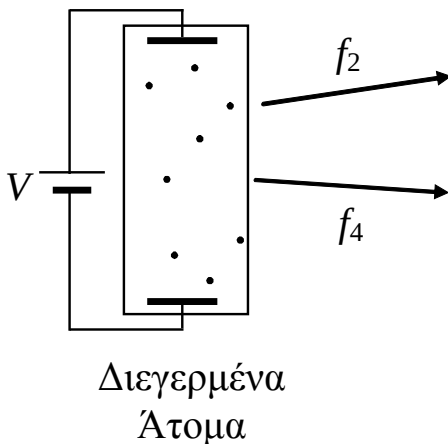
α. Συνεχές Φάσμα
(π.χ. μέλαν σώμα-Ήλιος)
Συνεχής ταινία χρωμάτων



β. Γραμμικό (διακριτό) φάσμα απορρόφησης
Σκοτεινές γραμμές σε φωτεινό φόντο.

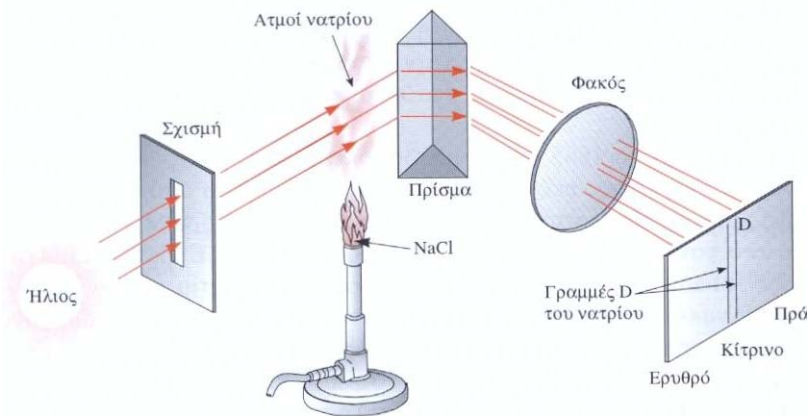
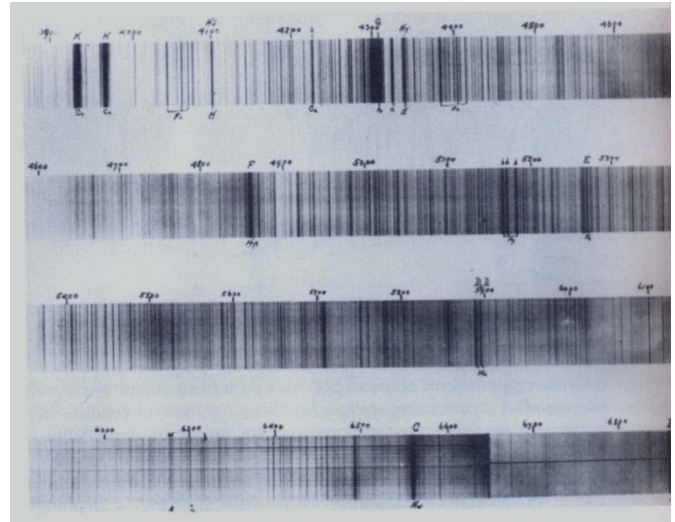


γ. Γραμμικό (διακριτό) φάσμα εκπομπής
Φωτεινές γραμμές σε σκοτεινό φόντο.



5. Φασματοσκοπικά δεδομένα: Ήλιος, Ατομικά αέρια

• Το φάσμα του Ήλιου αναμένεται να είναι συνεχές (διάπυρο στερεό-μέλαν σώμα). Το 1814 ο Fraunhofer αναλύει το Ηλιακό φως και διαπιστώνει την ύπαρξη ~1000 σκοτεινών γραμμών (A,B,C,D,...). Ο Kirchhoff τις αποδίδει στην απορρόφηση από άτομα των εξωτερικών στρωμάτων του Ήλιου. Η διπλή γραμμή D ανήκει στο Na...

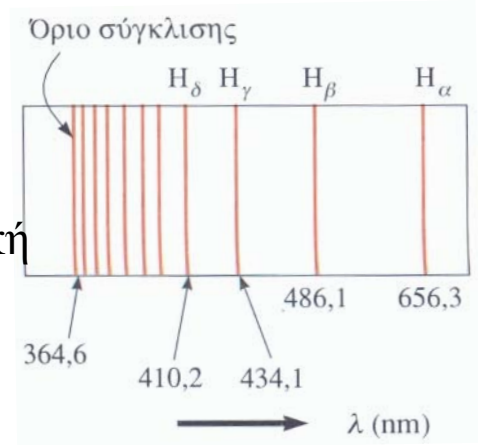


- Τα γραμμικά φάσματα του κάθε στοιχείου το χαρακτηρίζουν. Είναι το “δακτυλικό του αποτύπωμα”. Δεν υπάρχουν στη Φύση δύο στοιχεία με τα ίδια γραμμικά φάσματα (Φασματοσκοπική ανακάλυψη νέων στοιχείων Rb, Cs από τους Kirchhoff, Bunsen-φλόγες ορυκτών αλάτων). Στοιχειακή ανάλυση αστερών και δειγμάτων (π.χ. τρόφιμα).
- Οι συχνότητες (ή μήκη κύματος) απορρόφησης & εκπομπής συμπίπτουν. Όμως τα φάσματα δεν ταυτίζονται αναγκαστικά.

5. Φασματοσκοπικά δεδομένα: Ήλιος, Ατομικά αέρια

- Το ορατό φάσμα εκπομπής του ατομικού Υδρογόνου χαρακτηρίζεται από 4 διάκριτες φασματικές γραμμές (Ångström).

- Το 1885 ο Balmer ανακαλύπτει μια εμπειρική σχέση που αναπαράγει πιστά τις φασματικές τους θέσεις:



$$\lambda(\text{cm}) = C_2 \left(\frac{n^2}{n^2 - 2^2} \right) \quad n = 3, 4, 5, \dots \quad C_2 = 3646.6 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

- Τη στιγμή που ανακάλυψε τη σχέση είχαν βρεθεί ακόμη 10 γραμμές στο υπεριώδες (UV)

- Προτείνει την επέκταση της σχέσης για την πρόβλεψη και άλλων γραμμών (σειρών).

$$\lambda(\text{cm}) = C_3 \left(\frac{n^2}{n^2 - 3^2} \right) \quad n = 4, 5, 6, \dots \quad \lambda(\text{cm}) = C_4 \left(\frac{n^2}{n^2 - 4^2} \right) \quad n = 5, 6, 7, \dots$$

- Οι σειρές αυτές θα παρατηρηθούν πράγματι οι δε σχέσεις του σήμερα ομαδοποιούνται από τη γενική μορφή..

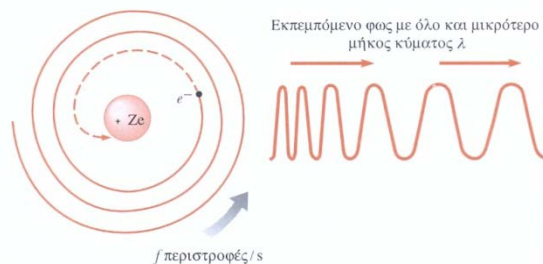
$$\frac{1}{\lambda} = \frac{Ryd}{hc} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad n_f = n_i - 1, n_i - 2, \dots$$

...με $Ryd/(hc) = 1.0973732 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ τη σταθερά Rydberg

5. Τα φασματοσκοπικά δεδομένα και το ατομικό μοντέλο του Rutherford

Τι προβλέπει το “πλανητικό” μοντέλο για όλα αυτά;

- Η κυκλική κίνηση των ηλεκτρονίων είναι επιταχυνόμενη (κεντρομόλος).
- Κατά Maxwell, επιταχυνόμενο φορτίο εκπέμπει H/M ακτινοβολία **συχνότητας ίσης με τη συχνότητα περιφοράς του** (όπως είχε αποδειχθεί πειραματικά από τον Hertz-1888).
- Εκπέμποντας χάνει ενέργεια με συνέπεια τη μείωση της ακτίνας του και συνεπώς την αύξηση της συχνότητας περιφοράς (και εκπομπής)
- Εκπέμπει συνεχώς και όλες τις συχνότητες. Το φάσμα της εκπεμπόμενης H/M ακτινοβολίας θα πρέπει να είναι συνεχές (όπως του μέλανος σώματος) ?
- Τελικά, θα χάσει όλη την ενέργειά του και θα πέσει στον πυρήνα (Αυτοκαταστροφή της Ύλης) ?



Οι προβλέψεις αυτές βρίσκονται σε πλήρη διαφωνία με τα πειραματικά φασματοσκοπικά δεδομένα των αερίων καθώς και το γεγονός ότι τα άτομα είναι ιδιαιτέρως σταθερές δομές...

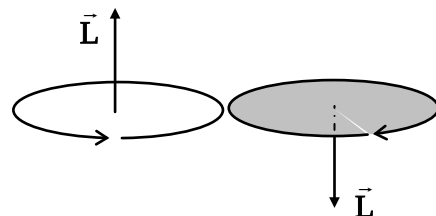
❖ N. Bohr: Πρώτη αξιόλογη περιγραφή της δομής του ατόμου

Ο Bohr ξεπερνά τα προβλήματα του “πλανητικού” μοντέλου αξιοποιώντας τις ιδέες των Planck & Einstein και αποδεχόμενος **αξιωματικά** ότι...

- Οι τροχιές του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα είναι κυκλικές και η δύναμη Coulomb ενεργεί ως κεντρομόλος (Rutherford).
- Όμως,... υπάρχουν μόνο επιτρεπτές τροχιές (ακτίνες). Σε αυτές το ηλεκτρόνιο δεν εκπέμπει H/M ακτινοβολία και δεν χάνει ενέργεια – στάσιμες καταστάσεις (Γιατί; Κανείς δεν ξέρει! Η πρόταση αυτή έρχεται σε πλήρη αντίθεση με την Κλασσική Φυσική).
- Επιτρεπτές είναι οι τροχιές για τις οποίες η τροχιακή στροφορμή είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του $\hbar$

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

ΚΒΑΝΤΩΣΗ



- Το άτομο απορροφά ή εκπέμπει μόνο κατά τη μετάβαση από μία επιτρεπτή τροχιά σε μια άλλη (κβαντικά άλματα). Η ενέργεια του φωτονίου που απορροφάται ή εκπέμπεται δίδεται από τη σχέση

$$hf_{if} = |E_f - E_i|$$

Οι συχνότητες απορρόφησης/εκπομπής **δεν** συμπίπτουν με τις συχνότητες περιφοράς του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα...
...παρά μόνο στο όριο των μεγάλων κβαντικών αριθμών $n \rightarrow \infty$

Αρχή της Αντιστοιχίας

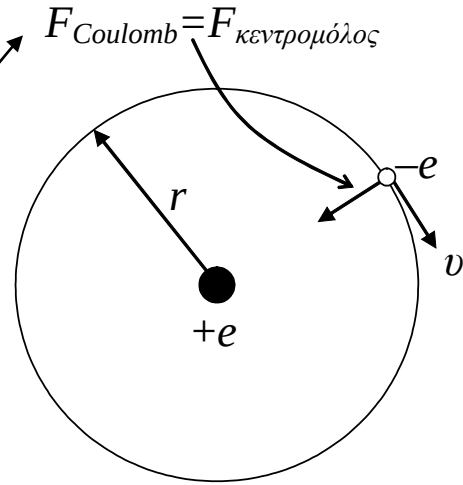
❖ N. Bohr: Πρώτη αξιόλογη περιγραφή της δομής του ατόμου Υδρογόνου

Η δύναμη Coulomb ενεργεί ως κεντρομόλος

$$k \frac{e^2}{r^2} = m_e \frac{v^2}{r}$$

$$a_k = \frac{v^2}{r}$$

$$k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$



Κβάντωση της στροφορμής

$$m_e v r = n \hbar$$

Κβάντωση της ακτίνας

$$r_n = a_0 n^2$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e k e^2} = 0.53 \times 10^{-10} \text{ m}$$

Ακτίνα του Bohr

Κβάντωση της ενέργειας

Κινητική $K = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{1}{2} k \frac{e^2}{r}$

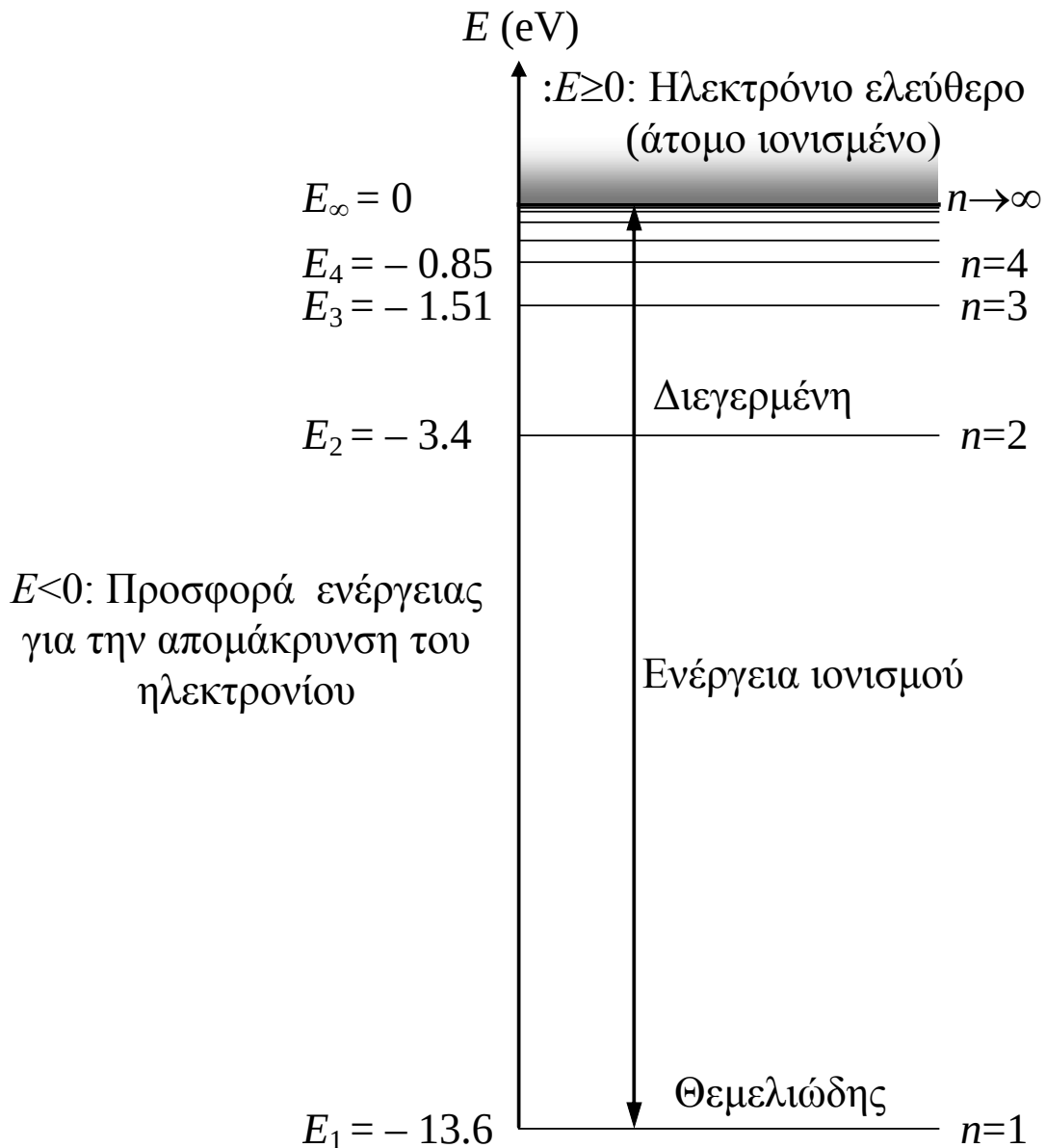
Δυναμική $U = -eV = -k \frac{e^2}{r} = -2K$

Μηχανική $E = K + U = -\frac{1}{2} k \frac{e^2}{r} = -K$

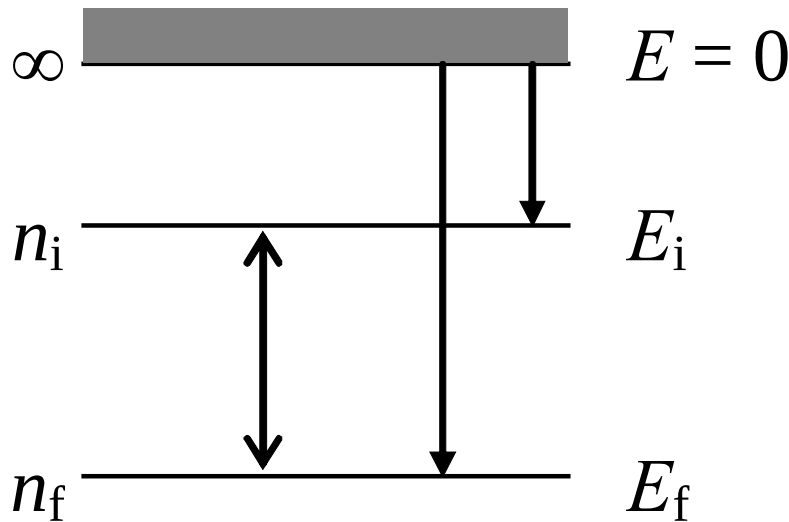
$$E_n = -\frac{1}{2} k \frac{e^2}{r_n} = -\frac{\text{Ryd}}{n^2} \quad \text{Ryd} = \frac{k e^2}{2 a_0} = 13.6 \text{ eV}$$

- ❖ N. Bohr: Πρώτη αξιόλογη περιγραφή της δομής του ατόμου

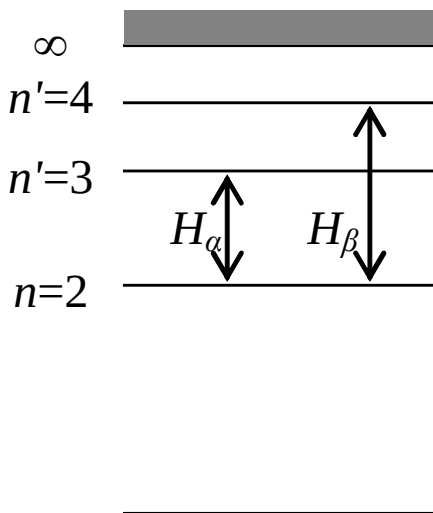
Υδρογόνο: Ενεργειακή Δομή



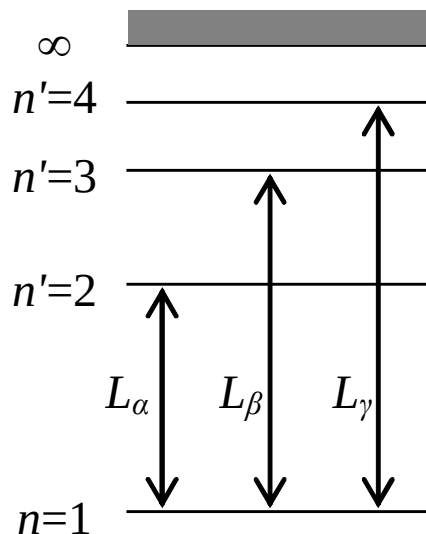
- ❖ N. Bohr: Πρώτη αξιόλογη περιγραφή της δομής του ατόμου
Υδρογόνο (και όχι μόνο): Μεταβάσεις



$$hf_{if} = \frac{hc}{\lambda_{if}} = |E_f - E_i| = Ryd \left| -\frac{1}{n_f^2} + \frac{1}{n_i^2} \right|$$



Σειρά Balmer



Σειρά Lyman

❖ N. Bohr: Πρώτη αξιόλογη περιγραφή της δομής του ατόμου

Το μοντέλο εξηγεί και προβλέπει:

- Όλα τα φασματοσκοπικά δεδομένα των Υδρογονοειδών ατόμων ($Z > 1$), He^+ , Li^{++} κλπ.
- Γιατί δεν ταυτίζονται τα φάσματα εκπομπής & απορρόφησης
- Γιατί σε θερμοκρασία δωματίου τα άτομα δεν είναι διεγερμένα.
- Οι σχετικιστικές διορθώσεις για ελαφριά άτομα θα είναι μικρές.

Αναπάντητα ερωτήματα (μεταξύ άλλων):

- Τι γίνεται με τα πολυηλεκτρονικά άτομα (στοιβάδες, σθένος);
- Τι γίνεται με τη χρονική εξέλιξη των ατομικών συστημάτων;

Σωματιδιακή Φύση της Ύλης, Σύνοψη:

Την ίδια εποχή που αναδύονται οι σωματιδιακές ιδιότητες του φωτός, σειρά πειραματικών δεδομένων πείθει ότι η ύλη αποτελείται από σωματίδια (ηλεκτρόνια, πρωτόνια, άτομα, μόρια). Σε ατομικό επίπεδο όμως οι “παραφωνίες” με τη Κλασσική Φυσική συνεχίζονται.

Απαιτούνται αξιωματικές παραδοχές και κβάντωση για την (προσωρινή) έξοδο από την κρίση. Τα ενεργειακά επίπεδα του ατόμου του Υδρογόνου προβλέπονται σωστά από το μοντέλο του Bohr. Σήμερα όμως το μόνο που απομένει από τη θεωρία αυτή είναι η σχέση $hf_{if} = |E_f - E_i|$ και η Αρχή της Αντιστοιχίας.

Γ. Η Κυματική Φύση της Ύλης

Το μοντέλο του Bohr:

- Προβλέπει μόνο τα φάσματα των ατόμων του Υδρογόνου των Αλκαλίων και τα περιστροφικά-ταλαντωτικά φάσματα των διατομικών μορίων
- ...όμως δεν μπορεί να εξηγήσει τις διαφορές έντασης που εμφανίζουν οι φασματικές γραμμές. Στα περιπλοκότερα άτομα επίσης αποτυγχάνει.
- Ακόμη δεν μπορεί να προβλέψει τη χρονική εξέλιξη περιπλοκότερων συστημάτων ιδιαίτερα των μη-περιοδικών
- ο Το κυριότερο, πρόκειται για ένα ετερόκλητο μίγμα από μη-κλασσικές παραδοχές, διατυπωμένες σε ένα καθαρά κλασσικό εννοιολογικό πλαίσιο.

Συμπεριλαμβάνοντας όμως τα συμπεράσματα αυτής της πρώιμης κβαντικής θεωρίας και τα πειραματικά δεδομένα της εποχής γνωρίζουμε ότι...

- Το Φως μακροσκοπικά εμφανίζει κυματική συμπεριφορά (απεντοπισμένη ενέργεια και ορμή). Σε κυματικά φαινόμενα όπως η συμβολή και η περίθλαση οι επιτρεπτές τιμές για τα κυματικά χαρακτηριστικά (μήκος κύματος) χαρακτηρίζονται από ακέραιους αριθμούς.
- Το Φως όταν αλληλεπιδρά με την ύλη (μικρόκοσμος) εμφανίζει σωματιδιακά χαρακτηριστικά (εντοπισμένη ενέργεια και ορμή).
- Τα φωτόνια, όταν είναι λίγα, μπορούν να ανιχνευτούν ως ξεχωριστές, αδιαίρετες μονάδες (G. I. Taylor 1909).
- Τα σωματίδια του μικρόκοσμου (ηλεκτρόνια, πυρήνες, άτομα..) ανιχνεύονται πάντα ως ξεχωριστές, αδιαίρετες μονάδες.

Η Υπόθεση de Broglie (1923)

“Εφόσον τα φωτόνια εμφανίζουν τόσο κυματικά όσο και σωματιδιακά χαρακτηριστικά, ίσως όλες οι μορφές της ύλης έχουν, εκτός από σωματιδιακές, και κυματικές ιδιότητες”

Μια πρώτη διατύπωση του κυματοσωματιδιακού δυϊσμού

Σύνδεση ενέργειας και ορμής με καθαρά κυματικά χαρακτηριστικά

$$E = hf = \hbar\omega$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

...κάθε ηλεκτρόνιο συνοδεύεται από ένα κύμα (όχι H/M)
που το οδηγεί σαν πιλότος μέσα στο χώρο.

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

Φωτόνια: μηδενική μάζα ηρεμίας, $m_0=0 \rightarrow E=pc$

Υλικά σωματίδια: μη-μηδενική μάζα ηρεμίας, $p=\gamma m_0 v_\sigma$, $E=\gamma m_0 c^2$

Τι κύμα είναι αυτό; Έστω ότι είναι ένα απλό αρμονικό κύμα με ταχύτητα που δίνεται από τη θεμελιώδη εξίσωση της κυματικής...

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - (v_\sigma / c)^2}}$$

$$v_{ph} = \lambda f = \frac{c^2}{v_\sigma} = \frac{c}{v_\sigma} c > c$$

v_{ph} , ταχύτητα φάσης με την οποία ταξιδεύει ένα μέτωπο κύματος

...συνεπώς είτε πρέπει να δεχθούμε ότι το κύμα ταξιδεύει γρηγορότερα όχι μόνο από το σωματίδιο αλλά και από το φως είτε...

...το κύμα που ψάχνουμε ΔΕΝ μπορεί να είναι ένα απλό αρμονικό κύμα

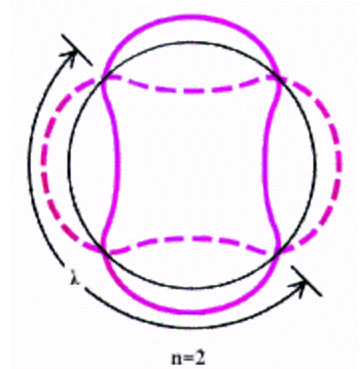
Το πρόβλημα θα λυθεί σε λίγο εισάγοντας τις κυματο-ομάδες...
Προς το παρόν ας δούμε κάποιες συνέπειες και τι λέει το πείραμα...

1. Η πρόβλεψη της κβάντωσης της στροφορμής στο άτομο του υδρογόνου

...σε μια χορδή κιθάρας, όπως και να τη διεγείρουμε αρχικά, θα επιβιώσουν μόνο εκείνα τα στάσιμα κύματα που αντιστοιχούν σε ακλόνητα άκρα και μήκος χορδής ίσο με ακέραιο αριθμό ημικυμάτων.

Κατ' αντιστοιχία, όποιες και εάν είναι οι αρχικές συνθήκες εκκίνησης της περιφοράς του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα θα επιβιώσουν μόνο εκείνες οι τροχιές που αντιστοιχούν σε ακέραιο αριθμό κυμάτων.

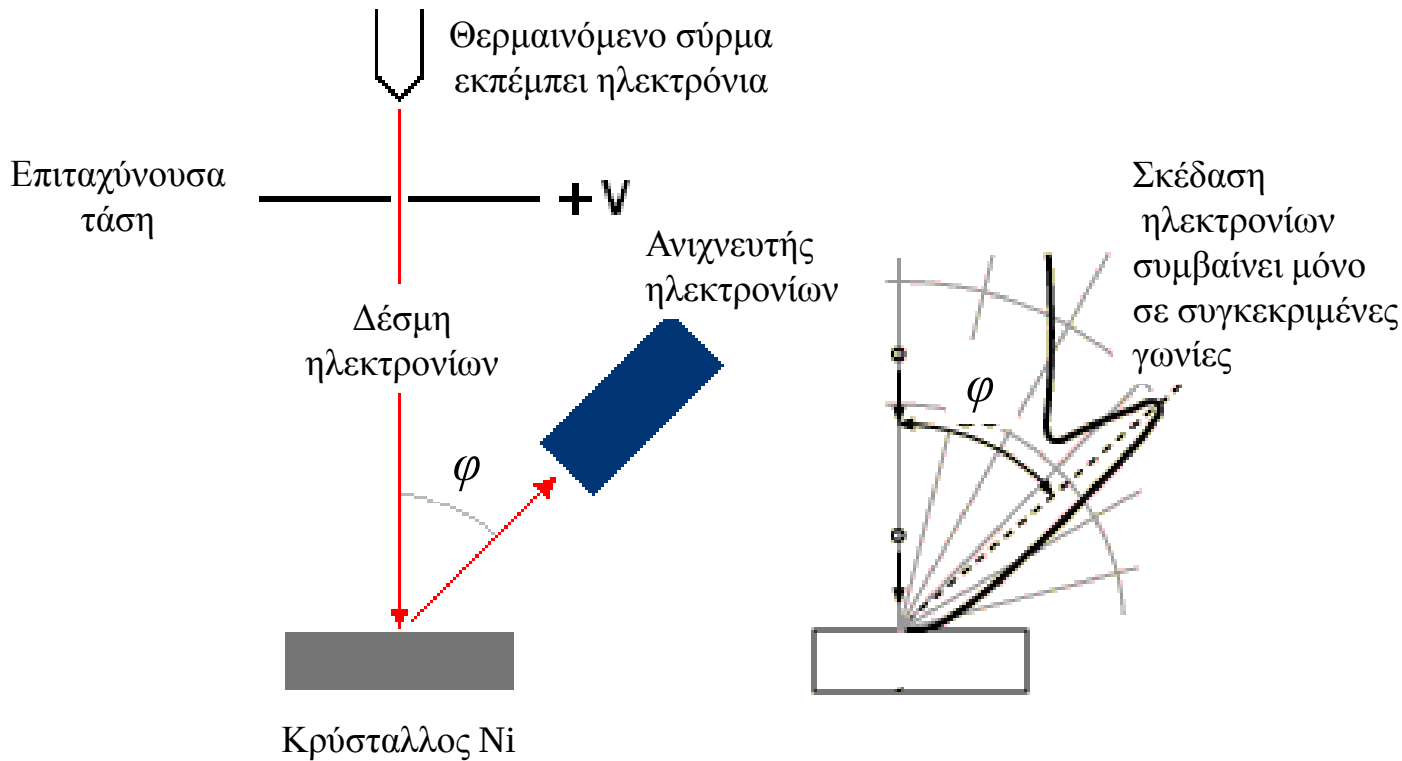
$$\left. \begin{aligned} 2\pi \cdot r &= n \cdot \lambda \\ \lambda &= \frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot v} \end{aligned} \right\} \rightarrow m \cdot v \cdot r = L = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$$



Η αξιωματική παραδοχή του Bohr αντικαταστάθηκε από μία (επίσης αξιωματική προς το παρόν) παραδοχή. Όμως είναι μια πρώτη ένδειξη της ορθότητας της υπόθεσης De Broglie.

Ο τελικός κριτής θα είναι το πείραμα....

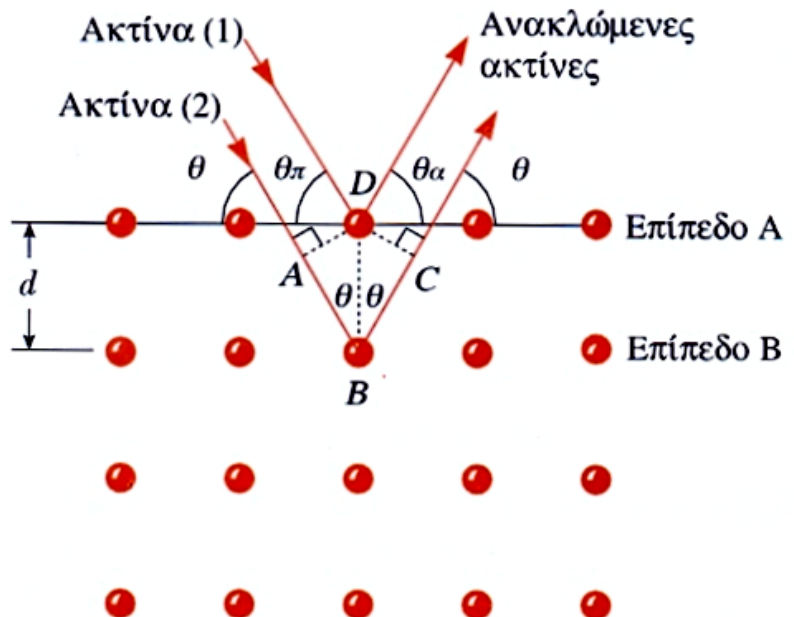
2. Το πείραμα Davisson-Germer: περίθλαση ηλεκτρονίων



Υπενθύμιση: Η περίθλαση Bragg ακτίνων X

$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

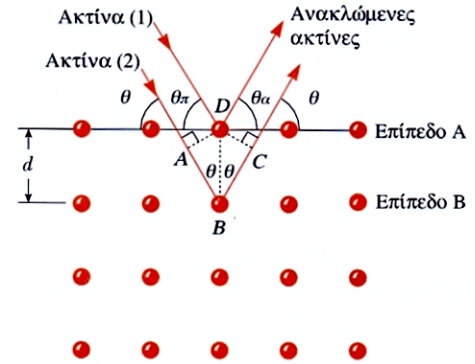
$$n = 1, 2, \dots$$



2. Το πείραμα Davisson-Germer: περίθλαση ηλεκτρονίων

...μόνο που οι Davisson & Germer χρησιμοποίησαν

- διαφορετικό ανακλαστικό επίπεδο και, κυρίως...,
- ηλεκτρόνια αντί για ακτίνες X



$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

Από περίθλαση ακτίνων X για το Ni ήταν ήδη γνωστό ότι:

$$a=0.215 \text{ nm}, \quad \omega=25^\circ$$

$$\text{Άρα } d=a\sin\omega=0.091 \text{ nm}$$

$$2\theta + \varphi = 180^\circ \rightarrow \theta=90^\circ-\varphi/2$$

$$\varphi_{\text{πειρ}} = 50^\circ$$

$$n=1$$

$$\lambda = 2 \cdot 0.091 \cdot \sin(90^\circ - 50^\circ / 2) = 0.165 \text{ nm}$$

Ενώ η υπόθεση de Broglie προβλέπει:

$$K = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{p^2}{2m_e} = 54 \text{ eV}$$

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

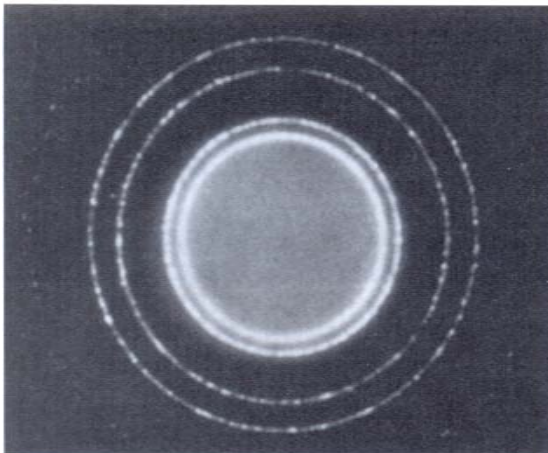
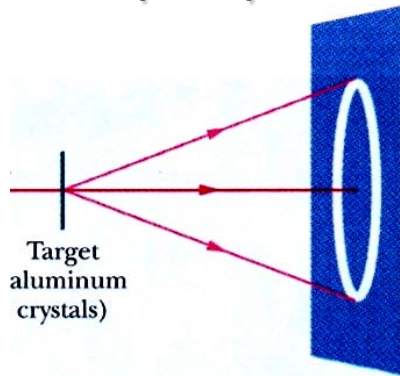
$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e K}} = 0.167 \text{ nm}$$

$$1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$$

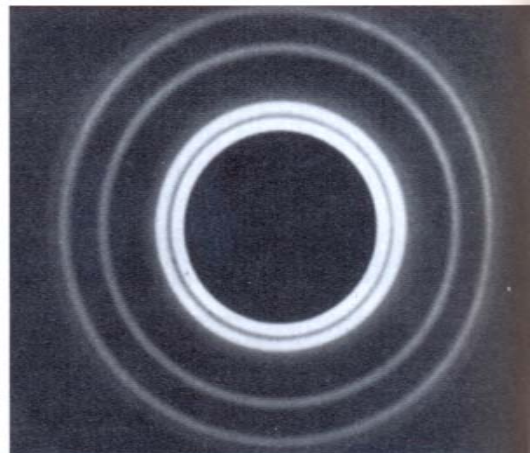
2. Το πείραμα Davisson-Germer: περίθλαση ηλεκτρονίων

- Ο G. P. Thomson (γιός του J.J. Thomson που απέδειξε ότι τα ηλεκτρόνια είναι σωματίδια !) επανέλαβε το πείραμα με φύλλα Χρυσού αντί κρύσταλλο Νικελίου, επιβεβαιώνοντας τα αποτελέσματα των Davisson-Germer
- Οι Davisson-Germer επανέλαβαν το πείραμα βάζοντας με ένα ηλεκτρόνιο τη φορά και κατέγραψαν τα ίδια αποτελέσματα

Η περίθλαση ακτίνων-X & ηλεκτρονίων είναι πανομοιότυπη



Ακτίνες X



Ηλεκτρόνια
~ίδιου μήκους κύματος

Το πρόβλημα της περιγραφής του κύματος-“πιλότου” μέσω ενός αρμονικού κύματος

$$v_{ph} = \lambda f = \frac{c^2}{v_\sigma} = \frac{c}{v_\sigma} c > c$$

...και η Αρχή της Απροσδιοριστίας του Heisenberg (1927)

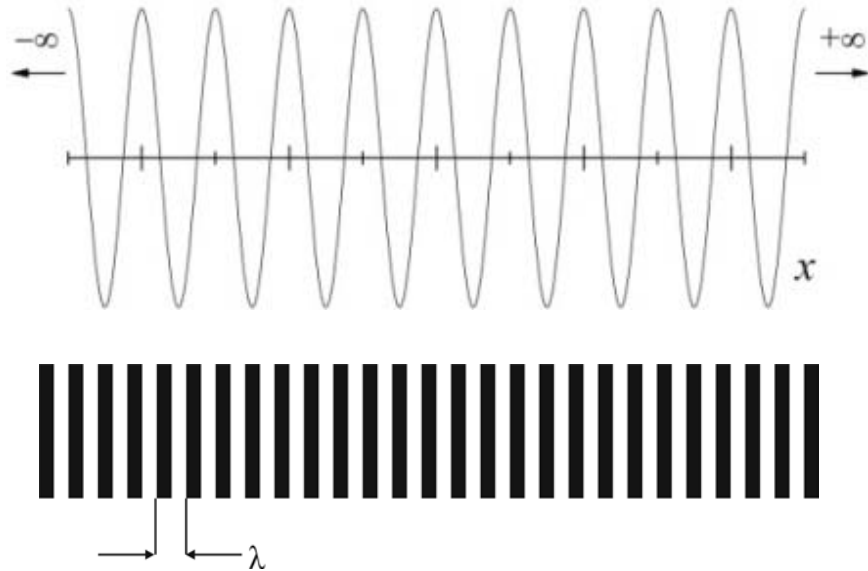
Αρμονικό κύμα

$$y(x, t) = A \cos(kx - \omega t)$$

$$\omega = 2\pi f$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k}$$



- Μία μόνο συχνότητα
- Εξιδανίκευση & Απλούστευση (την οποία όμως θα συνεχίσουμε να χρησιμοποιούμε μερικές φορές...). Άπειρη χωρική έκταση
- Δεν υπάρχει στη πραγματικότητα
..και προφανώς δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί
για την περιγραφή ενός σωματιδίου εντοπισμένου στο χώρο
- Το αρμονικό κύμα διαδίδεται με τη φασική του ταχύτητα.
Η ταχύτητα αυτή δεν ταυτίζεται με την ταχύτητα του σωματιδίου
- Η Φύση χρησιμοποιεί παλμούς (κυματο-ομάδες)
- Οι παλμοί μπορούν να περιγραφούν ως άθροισμα πολλών αρμονικών κυμάτων, το συνηθέστερο με διαφορετικά μήκη κύματος (ορμές)

Παράδειγμα: Δύο ελαφρά διαφορετικές συχνότητες ω_1 και ω_2 :
- Διακρότημα -

$$y_1(x, t) = A \cos(k_1 x - \omega_1 t)$$



$$y_2(x, t) = A \cos(k_2 x - \omega_2 t)$$



Υπέρθεση...

+

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



$$\cos(a) + \cos(b) = 2 \cos\left(\frac{a+b}{2}\right) \cos\left(\frac{a-b}{2}\right)$$

$$y_{tot}(x, t) = 2A \cos\left(\frac{k_1 + k_2}{2} x - \frac{\omega_1 + \omega_2}{2} t\right) \cos\left(\frac{k_1 - k_2}{2} x - \frac{\omega_1 - \omega_2}{2} t\right)$$

$$\omega_1 - \omega_2 \ll \omega_{1,2}$$

$$\bar{\omega} = \frac{\omega_1 + \omega_2}{2} \approx \omega_{1,2}$$

$$\bar{k} = \frac{k_1 + k_2}{2} \approx k_{1,2}$$

$$y_{tot}(x, t) = 2A \cos(\bar{k}x - \bar{\omega}t) \cos\left(\frac{\Delta k}{2} x - \frac{\Delta \omega}{2} t\right)$$

↑

↑

Ενώ το φέρον ταξιδεύει με τη φασική ταχύτητα $v_{ph} = \frac{\omega}{k}$ $v_g = \frac{d\omega}{dk} \approx \frac{\Delta \omega}{\Delta k}$

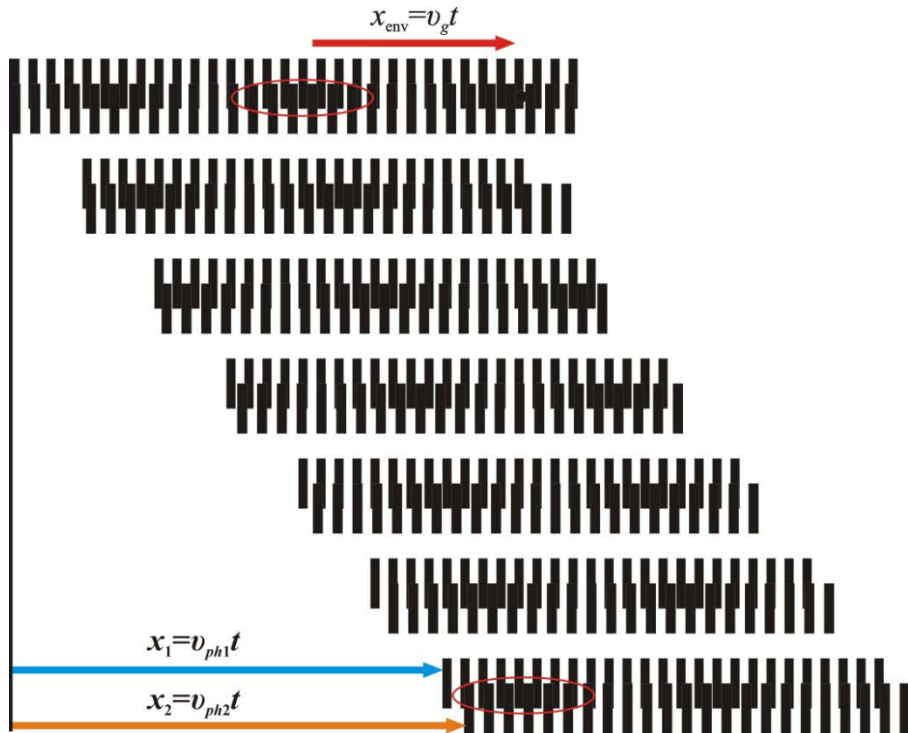
Ο φάκελος (και η πληροφορία) ταξιδεύει με την ταχύτητα ομάδας

Η ταχύτητα ομάδας...

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

$$\omega(k) = v_{ph}(k)k$$

$$v_g = v_{ph} + k \frac{dv_{ph}}{dk}$$



Ποια η σχέση ταχύτητας ομάδας – ταχύτητας σωματιδίου;

$E = \left[p^2 c^2 + m_0^2 c^4 \right]^{1/2}$	$E = \gamma m_0 c^2$	$v_\sigma = \frac{pc^2}{E}$
	$p = \gamma m_0 v_\sigma$	
	$E = \hbar \omega$	$\frac{dE}{dp} = \frac{d\omega}{dk} = v_{\text{g}}$
	$p = \hbar k$	
$\frac{dE}{dp} = \frac{d\left[p^2 c^2 + m_0^2 c^4 \right]^{1/2}}{dp} = \frac{pc^2}{E} = v_\sigma$		$v_\sigma = v_{\text{g}}$

Οι συνέπειες... Αρχή της Απροσδιοριστίας

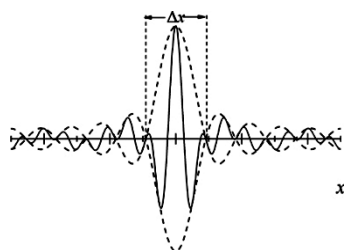
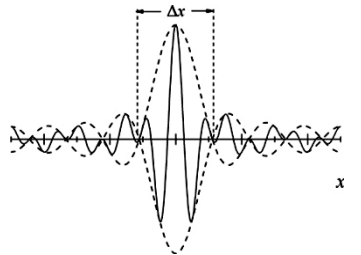
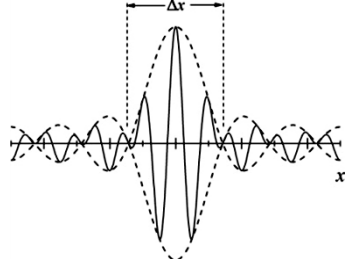
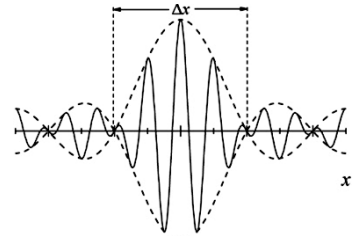
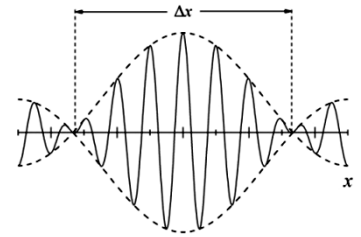
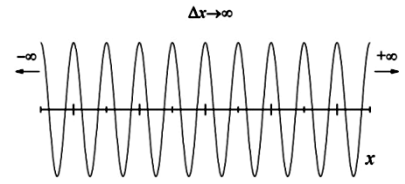
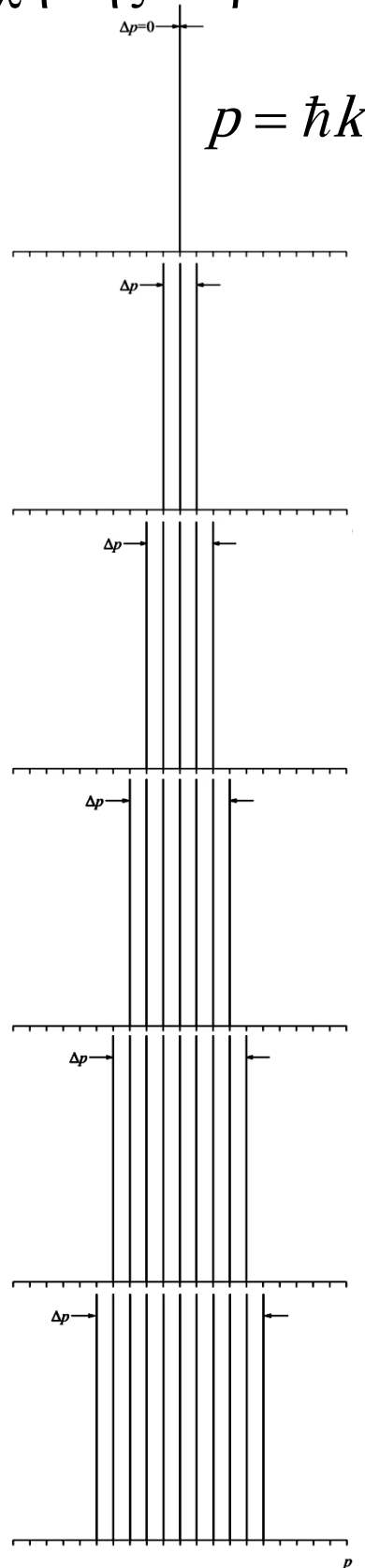
Προσθέτοντας
περισσότερα
αρμονικά κύματα...

- Όσο κερδίζουμε
σε εντοπισμό θέσης
(μικρό Δx)
τόσο χάνουμε
στη γνώση της ορμής
(μεγάλο Δp)
και αντίστροφα.

- Μάλιστα, η κλασική
κυματική μας λέει ότι...

$$\Delta p \Delta x = \text{σταθερά}$$

δηλαδή Δp και Δx
αντιστρόφως ανάλογα



Αρχή της Απροσδιοριστίας

- Είναι φανερό ότι οι κλασσικές έννοιες των καλά καθορισμένων τροχιών (θέσεων) και των προβλέψιμων ορμών, που βασίζονται στον νόμο του Νεύτωνα, αποτυγχάνουν όταν εφαρμοστούν στα πλαίσια του μικρόκοσμου.
- Στον μικρόκοσμο η σωματιδιακή φύση του φωτός και η κυματική φύση της ύλης δεν μπορεί να αγνοηθεί, με συνέπεια η διαταραχή που εισάγεται από μια διεργασία μέτρησης να μη μπορεί να γίνει αυθαίρετα μικρή (αντίθετα με την κλασσική αντίληψη).
- Τα παραπάνω συνοψίζονται στην Αρχή της Απροσδιοριστίας (ή Αβεβαιότητας) του Heisenberg (1927) που γράφεται ως...

Το “ασυμπίεστο”
των αβεβαιοτήτων

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

Ζεύγος θέσης-ορμής

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

Ζεύγος ενέργειας-χρόνου

Εγγενής συνέπεια του κβαντικού κόσμου.

Η αβεβαιότητα στην μέτρηση ορισμένων μεγεθών θα υπάρχει ακόμη και με ιδεατά όργανα που δεν εισάγουν σφάλματα.

Η αρχή αποδεικνύεται μέσω μιας σειράς νοητικών “πειραμάτων”.

Η προσπάθεια εύρεσης ισχυρότερου κάτω-ορίου συνεχίζεται ακόμη και σήμερα στα πλαίσια της Θεωρίας της Κβαντικής Πληροφορίας.

Αρχή της Απροσδιοριστίας

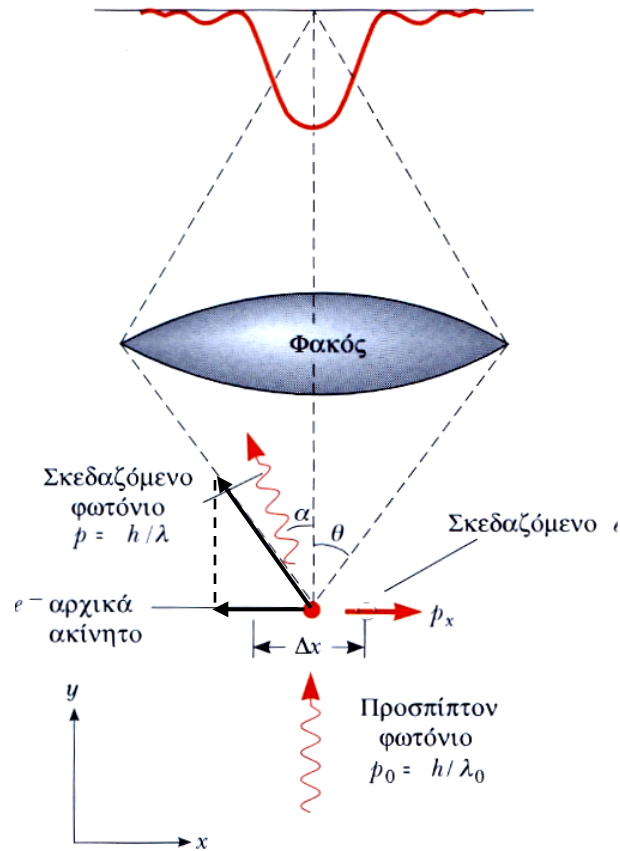
$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$

Το νοητικό “πείραμα” του οπτικού μικροσκοπίου

- Αρχικά ακίνητο ηλεκτρόνιο...
Το φωτόνιο (μήκους κύματος λ) σκεδάζεται από το ηλεκτρόνιο που, έστω, ότι κινείται οριζόντια μετά την κρούση.
- Για να ανιχνευτεί το φωτόνιο πρέπει να περάσει από το φακό δηλαδή γωνία σκέδασης $\pm\theta$.
Συνεπώς, η μέγιστη ορμή του σωματιδίου είναι ίση με...

$$p_x^{\max} = p_{\phi} \sin \theta = (h/\lambda) \sin \theta$$

$$\rightarrow \Delta p_x = 2h \sin \theta / \lambda$$



- Από την άλλη, από την περίθλαση γνωρίζουμε ότι ακόμη και για φακό χωρίς ατέλειες (σφάλματα) δύο σημεία διαχωρίζονται μόνον όταν η απόστασή τους είναι τουλάχιστον ίση με...

$$\Delta x = \lambda / (2 \sin \theta)$$

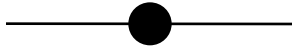
Συνεπώς...

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} \frac{2h \sin \theta}{\lambda} = h$$

Καμία μέτρηση όσο ακριβής και να είναι δεν μπορεί να το ανατρέψει...

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

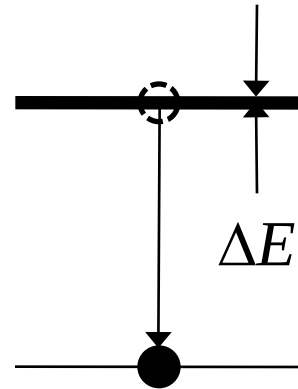
Διεγερμένη κατάσταση



$$P \propto e^{-\frac{t}{\tau}}$$

Αποδιέγερση

$$\Delta t = \tau$$



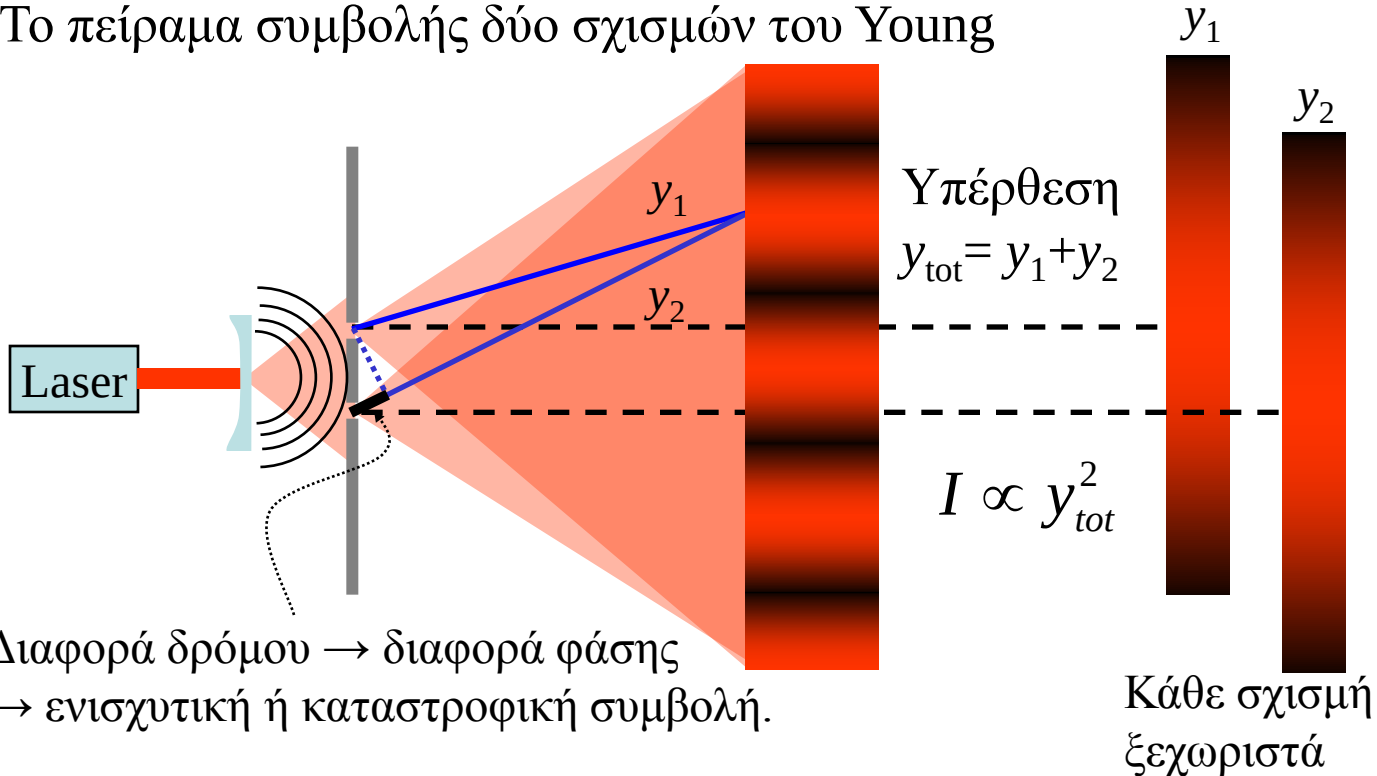
Θεμελιώδης κατάσταση

- Κάθε διεγερμένη κατάσταση ενός κβαντικού συστήματος (άτομα, πυρήνες...) έχει πεπερασμένο χρόνο ζωής. Κάποια στιγμή το σύστημα αποδιεγείρεται, οδηγούμενο προς χαμηλότερες (σταθερότερες) καταστάσεις.
- Δεν γνωρίζουμε πότε ακριβώς θα αποδιεγερθεί: Η πιθανότητα μειώνεται εκθετικά. Αυθαίρετα, ορίζουμε το χρόνο ζωής ως τη χρονική διάρκεια $\Delta t = \tau$ όπου η πιθανότητα έχει μειωθεί στο e^{-1} της αρχικής της τιμής.
- Ο χρόνος ζωής δεν είναι απλώς ένα (αυθαίρετο) μετρούμενο χρονικό διάστημα αλλά χαρακτηριστικός χρόνος εξέλιξης του συστήματος.
- Η αβεβαιότητα ως προς τη στιγμή αποδιέγερσης οδηγεί σε μια αβεβαιότητα $\Delta E \sim \hbar/\tau$ της ενέργειας της διεγερμένης κατάστασης. Η κατάσταση αποκτά ενεργειακό (φασματικό) εύρος.

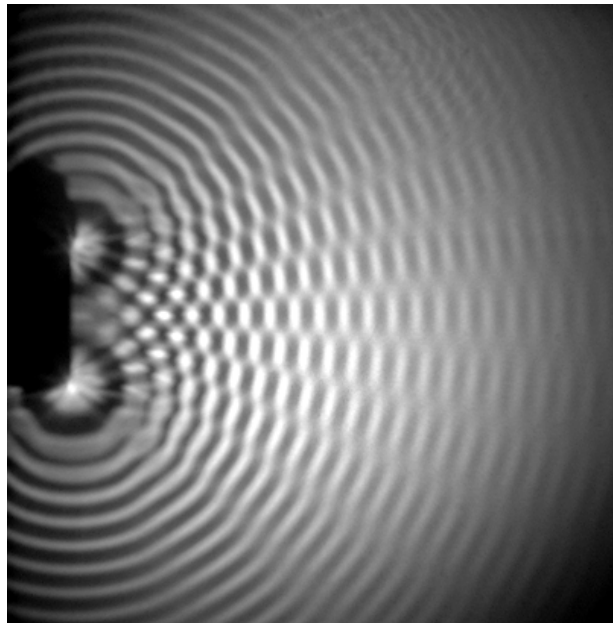
Καμία μέτρηση όσο ακριβής και να είναι δεν μπορεί να το ανατρέψει...

Σύνθεση: Κυματοσωματιδιακός δυϊσμός

Το πείραμα συμβολής δύο σχισμών του Young

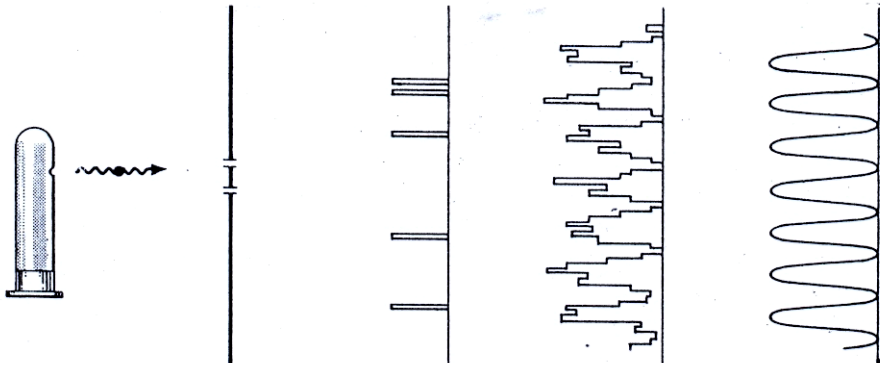


Όταν η ένταση του φωτός είναι αρκετά μεγάλη (τεράστιος αριθμός φωτονίων) παράγονται φαινόμενα συμβολής (όπως και με κάθε άλλο τύπο κύματος, π.χ. υδάτινου) χωρίς να γίνεται αντιληπτός ο σωματιδιακός του χαρακτήρας.

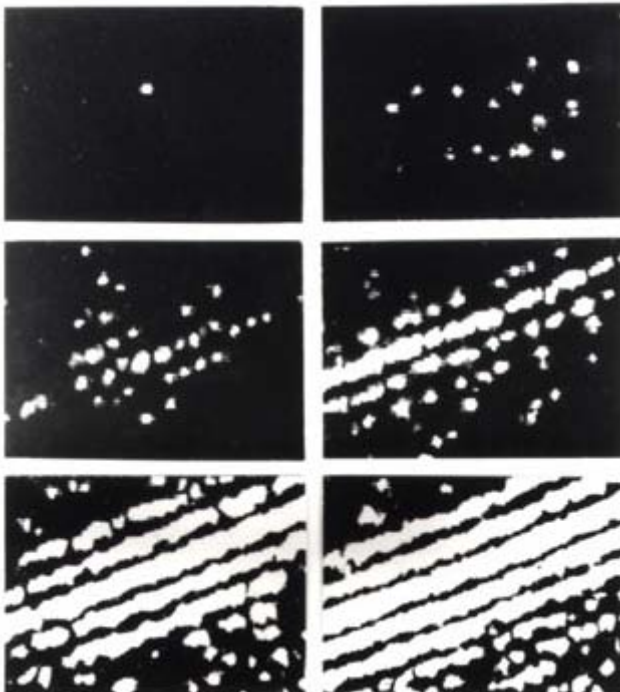


Σύνθεση: Κυματοσωματιδιακός δυϊσμός

Το πείραμα συμβολής δύο σχισμών του Young



Όταν η ένταση του φωτός είναι πολύ μικρή (εκπέμπεται ένα φωτόνιο τη φορά) επίσης παράγεται συμβολή παρ' όλο που τα φωτόνια δρουν και **ανιχνεύονται μεμονωμένα**. Τα λίγα αρχικά φωτόνια ανιχνεύονται σε θέσεις που φαίνονται τυχαίες. Όταν όμως μετρηθεί ένας τεράστιος αριθμός αυτών βλέπουμε τη κλασική εικόνα συμβολής (G. I. Taylor, 1909).

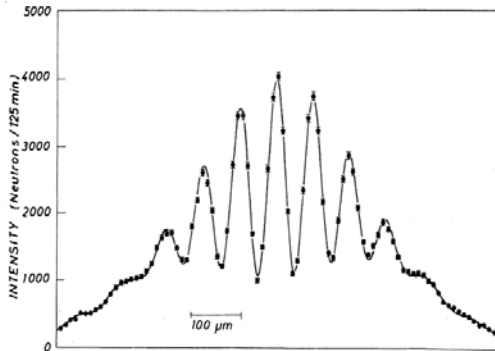


...ακριβώς όπως παρατηρείται
και με τα ηλεκτρόνια (1976)...

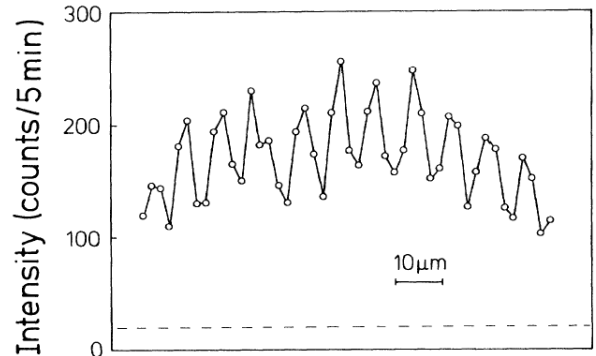
Σύνθεση: Κυματοσωματιδιακός δυϊσμός

Το πείραμα συμβολής δύο σχισμών του Young

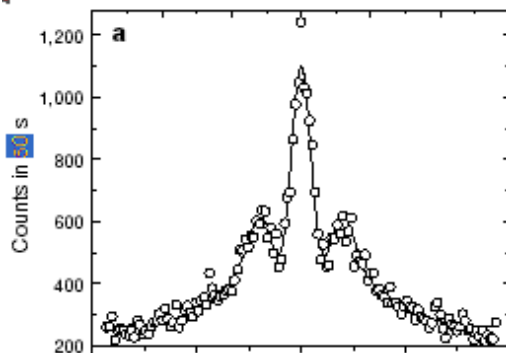
...τα νετρόνια (1988)



...τα άτομα He (1991)



...και τα μόρια C₆₀ (1999)



Γιατί στο μακρόκοσμο δεν παρατηρούμε την κυματική φύση των σωματιδίων;
... η περίθλαση είναι ανιχνεύσιμη όταν το μήκος κύματος (de Broglie) είναι συγκρίσιμο με την απόσταση των “χαραγών” των φυσικών ή τεχνητών φραγμάτων περίθλασης...

$$n\lambda = 2d \sin \theta \rightarrow \lambda \sim d$$

Π.χ. ποιο το μήκος κύματος de Broglie ενός αυτοκινήτου της Formula 1 που ζυγίζει 1000 kg και τρέχει με 360 km/h;

$$1 \text{ h} = 3600 \text{ sec}$$

$$v = 360 \times 10^3 / 3600 = 100 \text{ m/sec}$$

$$m \cdot v = 1000 \cdot 100 = 10^5 \text{ kg} \cdot \text{m/sec}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6.6 \times 10^{-34}}{10^5} = 6.6 \times 10^{-39} \text{ m}$$

Δεν υπάρχει τεχνητό ή φυσικό φράγμα (κρύσταλλος) με συγκρίσιμη απόσταση d ...

Σύνθεση: Κυματοσωματιδιακός δυϊσμός

Το πείραμα συμβολής δύο σχισμών του Young

Τα σωματίδια του μικρόκοσμου (δηλαδή *κβαντικά* σωματίδια όπως φωτόνια, ηλεκτρόνια κλπ) ανιχνεύονται κάθε φορά ως ξεχωριστές, αδιαίρετες μονάδες. Η τελική κατανομή τους στο χώρο είναι αυτή που περιμένουμε από ένα κλασσικό πείραμα συμβολής ή περίθλασης

Ποια η φυσική σημασία των υλικών κυμάτων de Broglie;

- Κατά τη συμβολή/περίθλαση των κυμάτων, η ένταση I είναι μέγιστη σε ορισμένες θέσεις μιας οθόνης παρατήρησης
- Η ένταση είναι ανάλογη του αριθμού των ανιχνευόμενων σωματιδίων
- Εκεί όπου η ένταση είναι μέγιστη, έχουμε μέγιστη ΠΙΘΑΝΟΤΗΤΑ να ανιχνεύσουμε σωματίδια (και αντίστροφα)
- Συνεπώς, τα κύματα de Broglie $\Psi(x,t)$ θεωρούνται ως τα κύματα εκείνα των οποίων η “ένταση” $I \propto |\Psi(x,t)|^2$ μας δίνει την ΠΙΘΑΝΟΤΗΤΑ εύρεσης του σωματιδίου στη θέση x τη χρονική στιγμή t .

Κάθε σχισμή ξεχωριστά

$$I_1(x,t) \propto P_1(x,t) = |\Psi_1(x,t)|^2$$



$$I_2(x,t) \propto P_2(x,t) = |\Psi_2(x,t)|^2$$

Υπέρθεση



$$P_{tot}(x,t) = |\Psi_1(x,t) + \Psi_2(x,t)|^2$$

Σύνθεση: Κυματοσωματιδιακός δυϊσμός

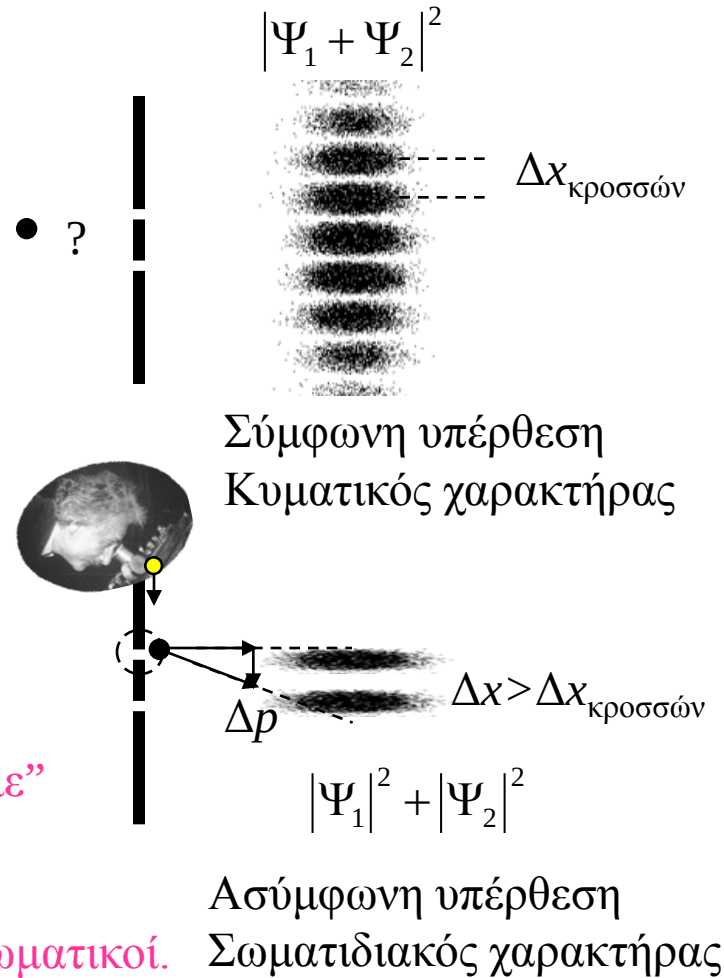
Το πείραμα συμβολής δύο σχισμών του Young

Όμως....

• Εάν κβαντικά σωματίδια βάλλονται ένα-προς-ένα και προσπαθήσουμε να βρούμε από ποια σχισμή πέρασε το καθένα η εικόνα συμβολής εξαφανίζεται...

• Απόρροια της Αρχής της Απροσδιοριστίας: Η διαταραχή που προκαλούμε κατά τη μέτρηση προσδιορισμού της σχισμής από την οποία προήλθαν δημιουργεί μια απροσδιοριστία στη θέση τους στην οθόνη, που είναι μεγαλύτερη από την απόσταση μεταξύ διαδοχικών κροσσών.

• Συνεπώς, δεν μπορούμε να “δούμε” ταυτόχρονα τον κυματικό και σωματιδιακό χαρακτήρα τους. Οι δύο χαρακτήρες είναι συμπληρωματικοί.



Richard Feynman: “...το πείραμα του Young με κβαντικά σωματίδια είναι αδύνατον, απολύτως αδύνατον, να εξηγηθεί με οποιοδήποτε κλασσικό τρόπο και βρίσκεται στη καρδιά της *Κβαντικής Μηχανικής*. Στη πραγματικότητα εμπεριέχει το *μόνο μυστήριο* της θεωρίας αυτής”.

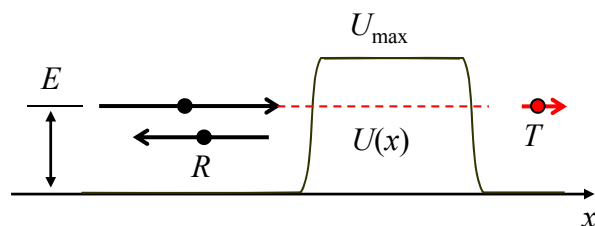
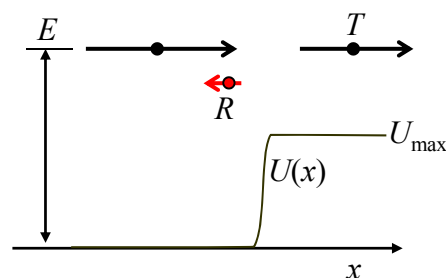
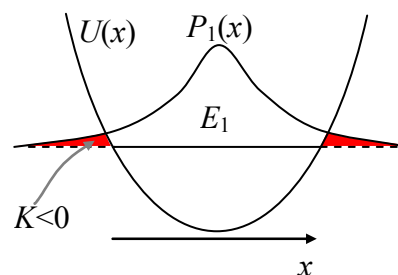
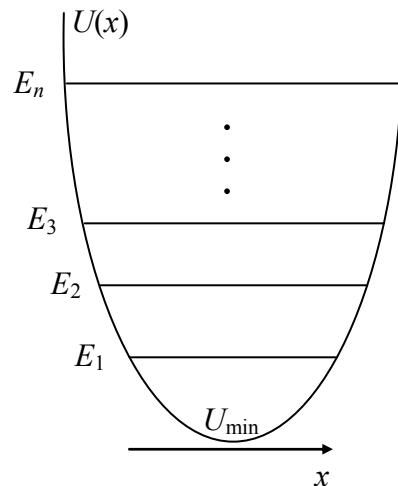


Δ. Η “Κυματική” Εξίσωση (Schrödinger)

Ο παράξενος αλλά και συναρπαστικός κβαντικός (μικρό)κοσμος

Τι περιλαμβάνει το menu...

- Διακριτοποίηση ενέργειας χωρικά περιορισμένων σωματιδίων.
- Η ελάχιστη ενέργεια πάντα μεγαλύτερη της ελάχιστης δυναμικής ενέργειας ($E_1 > U_{\min}$), διαφορετικά $\Delta x=0$, $\Delta p \rightarrow \infty$
- Πεπερασμένη πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου σε κλασικά απαγορευμένες περιοχές, αρνητικής κινητικής ενέργειας
- Μη-μηδενική πιθανότητα ανάκλασης του σωματιδίου, ακόμη και όταν $E > U_{\max}$, που δεν προβλέπεται κλασικά.
- Μη-μηδενική πιθανότητα διέλευσης του σωματιδίου, ακόμη και όταν $E < U_{\max}$, που δεν προβλέπεται κλασικά (φαινόμενο σήραγγας).



• • •

Η Εξίσωση Schrödinger & Παραδείγματα 2/20

Η κλασσική κυματική εξίσωση

$$\frac{d^2 y(x,t)}{dx^2} - \frac{1}{v^2} \frac{d^2 y(x,t)}{dt^2} = 0 \quad v = \omega / k$$

...επιδέχεται ως (πραγματικές) λύσεις τα επίπεδα κύματα

$$y(x,t) = \cos(kx - \omega t)$$

...ή σε συντομογραφία...

$$y(x,t) = \sin(kx - \omega t)$$

$$y(x,t) = e^{i(kx - \omega t)} \quad e^{\pm i\varphi} \equiv \cos \varphi \pm i \sin \varphi$$

Περιπλοκότερες κυματικές μορφές προκύπτουν από την υπέρθεση των αρμονικών κυμάτων, πχ $y_{\text{tot}} = Ay_1(x,t) + By_2(x,t)$

• Ελεύθερο σωματίδιο (μηδενική Δυναμική Ενέργεια)

Ψάχνουμε μία “κυματική εξίσωση” που θα αναπαραγάγει τη σχέση ενέργειας-ορμής για ένα μη-σχετικιστικό σωματίδιο. Θεωρούμε ως λύση ένα επίπεδο κύμα...

$$\Psi(x,t) = e^{i(kx - \omega t)} \xrightarrow{E = \hbar\omega, p = \hbar k} \Psi(x,t) = e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

και θα πρέπει να μπορούμε να κατασκευάσουμε περιπλοκότερες μορφές ξανά μέσω υπέρθεσης..

$$\frac{d\Psi(x,t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} E e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi \quad E = K = \frac{p^2}{2m}$$

$$\frac{d\Psi(x,t)}{dx} = \frac{i}{\hbar} p e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \quad \frac{d^2\Psi(x,t)}{dx^2} = -\frac{1}{\hbar^2} p^2 \Psi$$

Συνδυάζοντας τα παραπάνω...

Η Εξίσωση Schrödinger & Παραδείγματα 3/20

Ελεύθερο
σωματίδιο

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

Παρατηρούμε σημαντικές διαφορές με την κλασσική κυματική εξίσωση

- Απλή αντί για διπλή χρονική παράγωγος
- Η $\Psi(x,t)$ είναι μιγαδική

Πράγματι, ενώ η συνάρτηση $\Psi(x,t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$ είναι λύση...

οι συναρτήσεις $A \cos\left[\frac{1}{\hbar}(px-Et)\right]$ & $A \sin\left[\frac{1}{\hbar}(px-Et)\right]$ ΔΕΝ είναι...

Συνεπώς, από μόνη της η Ψ δεν μπορεί να έχει φυσική σημασία, ενώ η $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$ έχει. Σήμερα, υιοθετούμε ότι...

(Στατιστική ερμηνεία (Born 1926) – Κύματα Πιθανότητας)

$$P(x,t)dx = |\Psi(x,t)|^2 dx$$

...είναι η πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο στο διάστημα μεταξύ x και $x+dx$, τη χρονική στιγμή t . Η $|\Psi(x,t)|^2$ είναι η πυκνότητα πιθανότητας (πιθανότητα ανά μονάδα μήκους)

Κατά τη περιγραφή του ελεύθερου σωματιδίου με ένα απλό αρμονικό κύμα η κυματοσυνάρτηση προβλέπει σταθερή πιθανότητα για κάθε x & t ...

$$P(x,t) = \left| Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \right|^2 = |A|^2$$

Συνεπώς, δεν έχουμε καμία πληροφορία για το που μπορεί να βρίσκεται το σωματίδιο ($\Delta x \rightarrow \infty$). Από την άλλη, γνωρίζουμε με απόλυτη ακρίβεια την ορμή και ενέργειά του ($\Delta p = 0$).

- Όταν η δυναμική ενέργεια δεν είναι μηδενική

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

Δεν αποδεικνύεται: Θεμελιώδης εξίσωση της Κβαντομηχανικής.
Η “αλήθεια” της ελέγχεται από τη δυνατότητα να κάνει προβλέψεις σε συμφωνία με το πείραμα.

Μας λέει το “Πώς” λειτουργεί η Φύση αλλά όχι το “Γιατί”

- Όταν η δυναμική ενέργεια δεν εξαρτάται από το χρόνο, $U(x)$

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t) \quad \varphi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Εξ. Schrödinger
ανεξάρτητη του
χρόνου

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

Τότε...

$$P(x,t)dx = |\Psi(x,t)|^2 dx = |\psi(x)|^2 |\varphi(t)|^2 dx \quad |\varphi(t)|^2 = \left| e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right|^2 = 1$$

Οπότε...

$$P(x,t)dx = |\psi(x)|^2 dx = P(x)dx$$

Η πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου στο διάστημα μεταξύ x και $x+dx$
δεν μεταβάλλεται με το χρόνο $\rightarrow$ ΣΤΑΣΙΜΕΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ

- ♣ Ενώ η Ψ είναι αναγκαστικά μιγαδική, η ψ μπορεί να είναι πραγματική

Οι ιδιότητες της $\psi(x)$

- Η $\psi(x)$ πρέπει να είναι πεπερασμένη και μονότιμη (η πιθανότητα δεν απειρίζεται και έχει μία τιμή για κάθε θέση)

- Η ολική πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στο πλήρες διάστημα $(-\infty, +\infty)$ είναι:

$$\Pi_{tot} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx$$

Η πιθανότητα να βρεθεί στο διάστημα $[a, b]$;

Η ολική πιθανότητα πρέπει να είναι ίση με 1: $\Pi_{tot} = 1$

(εάν δεν είναι, η $\psi(x)$ πολλαπλασιάζεται επί κατάλληλο αριθμητικό παράγοντα)

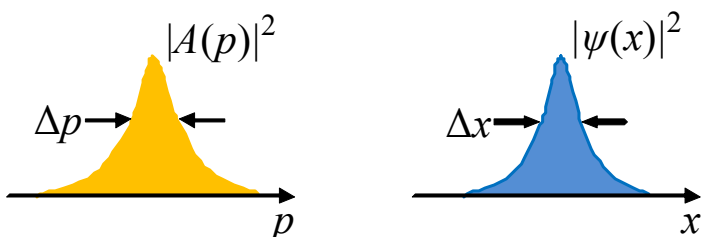
Κανονικοποίηση

Συνεπώς απαιτείται ότι

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty$$

Η $\psi(x)$ ονομάζεται τότε **τετραγωνικά ολοκληρώσιμη**

Το απλό αρμονικό κύμα $e^{i\frac{p}{\hbar}x}$ δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμο, γεγονός που αντανακλά το ότι αποτελεί απλουστευμένη και όχι ρεαλιστική περιγραφή του ελεύθερου σωματιδίου. Οι υπερθέσεις αρμονικών κυμάτων όμως μπορούν να κανονικοποιηθούν...

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp$$


Οι ιδιότητες της $\psi(x)$

- Η $\psi(x)$ πρέπει να είναι **ομαλή**, ώστε να μην υπάρχουν «άλματα» πιθανότητας. Δηλαδή, πρέπει

$\psi(x)$ και $d\psi(x)/dx$ να είναι **συνεχείς** για κάθε τιμή του x .

...ακόμα και εάν η δυναμική ενέργεια παρουσιάζει ασυνέχειες (αρκεί να είναι πεπερασμένη).

- Η $\psi(x)$ έχει διαστάσεις...

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \text{ δηλαδή αδιάστατο, συνεπώς οι διαστάσεις της } \psi \text{ είναι...;}$$

- Μέση τιμή του x :
$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x P(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x)|^2 dx$$

...και των συναρτήσεων του x :
$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) |\psi(x)|^2 dx$$

Θυμηθείτε...

Τυπική απόκλιση
$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - (\langle x \rangle)^2}$$

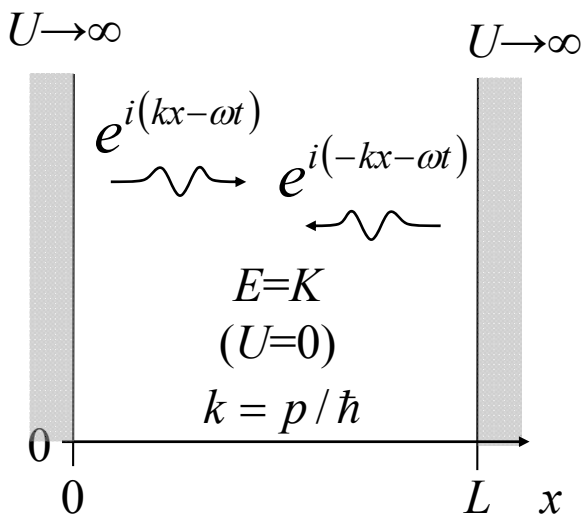
$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx \quad \dots \text{και} \dots \quad \Delta p \sim \hbar / \Delta x$$

Προφανώς υπάρχει και αυστηρός υπολογισμός της Δp ...

Η Εξίσωση Schrödinger & Παραδείγματα 7/20

Παράδειγμα 1^ο: Σωματίδιο εγκλωβισμένο σε αδιαπέραστο

τετραγωνικό “κουτί”

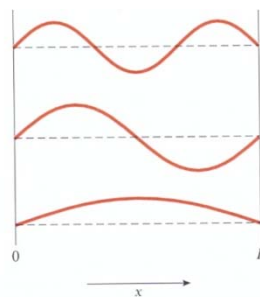
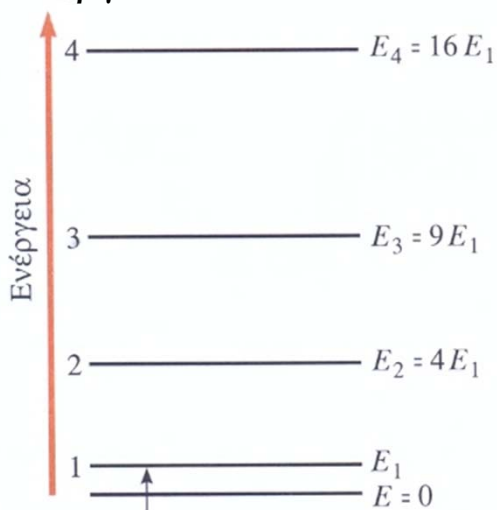


Απλό μοντέλο περιγραφής του εγκλωβισμού των ηλεκτρονίων της ζώνης σθένους κατά τη μελέτη της ηλεκτρικής αγωγιμότητας των μετάλλων

Τα κύματα de Broglie εν δράσει...

Το σωματίδιο μπορεί να οδεύει είτε προς τα αριστερά είτε προς τα δεξιά. Το αναπαριστούμε μέσω της υπέρθεσης δύο *τρεχόντων* επιπέδων κυμάτων που οδεύουν προς αντίθετες κατευθύνσεις. Η υπέρθεση δημιουργεί ένα *στάσιμο κύμα* με τα όρια του κουτιού να αποτελούν ακλόνητα σημεία. Το μήκος του κουτιού πρέπει να είναι ίσο με ακέραιο αριθμό ημικυμάτων...

Διάγραμμα
Ενεργειακών Επιπέδων



$$L = n \frac{\lambda}{2} \rightarrow \lambda_n = \frac{2L}{n}$$

$$p_n = \hbar k_n = \hbar \frac{2\pi}{\lambda_n} \rightarrow p_n = \frac{\pi \hbar}{L} n$$

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} \rightarrow E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

Κβάντωση (διακριτοποίηση) ενέργειας

Η Εξίσωση Schrödinger & Παραδείγματα 8/20

1. Σωματίδιο εγκλωβισμένο σε αδιαπέραστο τετραγωνικό “κουτί”

Αυστηρή Κβαντομηχανική Περιγραφή

Εφόσον η δυναμική ενέργεια δεν εξαρτάται από τον χρόνο,
η γενική λύση της *χρονοανεξάρτητης* εξίσωσης Schrödinger γράφεται:

$$U = 0 \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$
$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar} \quad \text{επιβεβαιώστε...}$$

Οριακές Συνθήκες: Μηδενική πιθανότητα εύρεσης του
σωματιδίου έξω από το διάστημα $0 \leq x \leq L \rightarrow \psi(0) = \psi(L) = 0$

$$\psi(0) = A + B = 0 \rightarrow B = -A \quad \text{συνεπώς} \quad \psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA \sin(kx)$$

$$\psi(L) = 2iA \sin(kL) = 0 \rightarrow k_n L = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots \quad k_n = \frac{n\pi}{L}$$

που οδηγεί, όπως και πριν,
στην ενεργειακή κβάντωση $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad \psi_n(x) = 2iA \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right)$

Οι οριακές συνθήκες προσδιορίζουν τόσο τα ενεργειακά επίπεδα
όσο και τις αντίστοιχες ψ , εκτός του παράγοντα A ...

...που προσδιορίζεται μέσω της
κανονικοποίησης $\int_0^L P_n(x) dx = \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1$

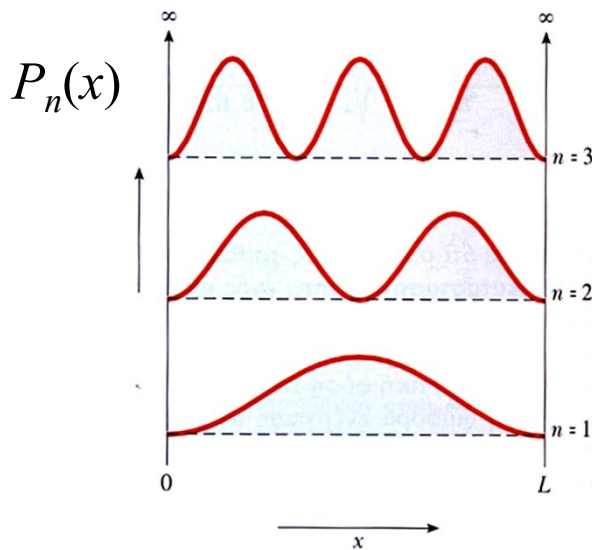
$$4|A|^2 \int_0^L \sin^2\left(n\pi \frac{x}{L}\right) dx = 1 \rightarrow |A| = \frac{1}{\sqrt{2L}}$$

επιβεβαιώστε...

Πως θα επιλέξουμε τον A ώστε η
 ψ να είναι πραγματική;

Η Εξίσωση Schrödinger & Παραδείγματα 9/20

1. Σωματίδιο εγκλωβισμένο σε αδιαπέραστο τετραγωνικό “κουτί”

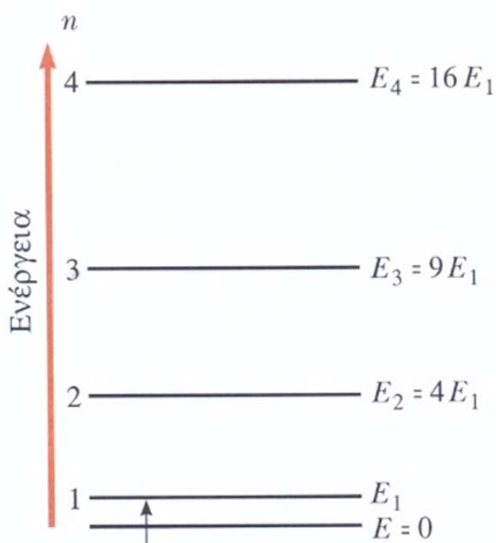


$$P_n(x) = \frac{2}{L} \sin^2\left(n\pi \frac{x}{L}\right)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Υπάρχουν σημεία *μέσα* στο κουτί όπου η πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου είναι μηδενική!

Κινείται ακόμη και στο απόλυτο μηδέν!



$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} > 0$$

Ενέργεια
μηδενικού
σημείου

Κλασσικά, η μέση ενέργεια ενός σωματιδίου που είναι ελεύθερο να κινείται σε μονοδιάστατο κουτί είναι $kT/2$. Για $T=0$, $E=0$ και συνεπώς θα πρέπει να παραμένει ακίνητο.

Κβαντικά, η τιμή του κβαντικού αριθμού $n=0$ (που αντιστοιχεί σε $E=0$) δεν είναι αποδεκτή, καθώς προβλέπει $P(x)=0$ για κάθε x .

Τα κβαντικά σωματίδια δεν πέφτουν ποτέ στον πάτο του πηγαδιού (Αρχή της Απροσδιοριστίας).

Διαφορετικά, $E=0 \rightarrow p=0$ και $\Delta p=0$.

Επίσης, το σωματίδιο θα βρισκόταν συνεχώς σε κάποια δεδομένη θέση $\rightarrow \Delta x=0$ και $\Delta p \Delta x=0 < \hbar$

Η Εξίσωση Schrödinger & Παραδείγματα 10/20

1. Σωματίδιο εγκλωβισμένο σε αδιαπέραστο τετραγωνικό “κουτί”

Αρχή της Αντιστοιχίας (Bohr 1922)

“...στο όριο των μεγάλων κβαντικών αριθμών, οι κβαντικές και κλασικές προβλέψεις πρέπει να συμπίπτουν...”

Παρόλο που οι ενέργειες των επιπέδων αυξάνουν ανάλογα του n^2 , για μεγάλους κβαντικούς αριθμούς, η σχετική αύξηση

$$\frac{\Delta E_{n+1,n}}{E_n} = \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{E_1[(n+1)^2 - n^2]}{E_1 n^2} = \frac{2n+1}{n^2} \xrightarrow{n \gg 1} \frac{2}{n}$$

μειώνεται ($\propto 1/n$) και τα επίπεδα πλησιάζουν τόσο πολύ που πλέον διαμορφώνουν ένα συνεχές πεδίο επιτρεπτών ενεργειακών τιμών (όπως προβλέπεται από την Κλασική Φυσική)

Τέλος... ακόμη και για μικρούς κβαντικούς αριθμούς τα μακροσκοπικά σωματίδια σε μακροσκοπικά “κουτιά” δεν εμφανίζουν κβαντική συμπεριφορά...

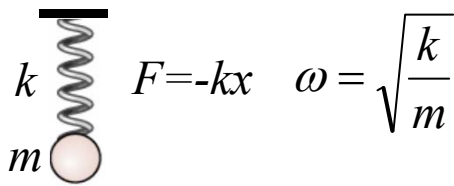
$$m = 1 \text{ gr}, L = 1 \text{ cm} \quad E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = 5.5 \times 10^{-58} \text{ J} = 3.4 \times 10^{-39} \text{ eV}$$

$$v_1 = \sqrt{\frac{2E_1}{m}} = 3.3 \times 10^{-26} \text{ m/sec}$$

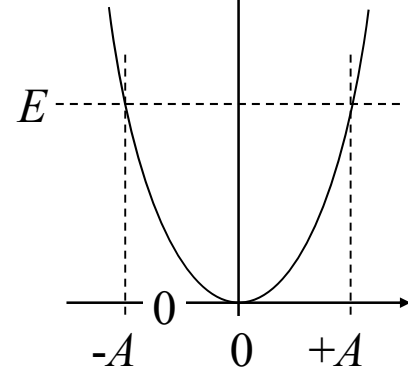
Θα διανύσει το κουτί σε 3×10^{23} sec, δηλαδή σε χρόνο ένα εκατομμύριο φορές μεγαλύτερο από την ηλικία του σύμπαντος...

...ένας άλλος τρόπος για να λέμε “ακίνητο”!

Παράδειγμα 2ο: Ο αρμονικός ταλαντωτής



$$U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$



...αλλά και προσεγγιστικό μοντέλο περιγραφής της ταλάντωσης των ατόμων ενός διατομικού μορίου...



Κλασσικά, κάθε ενέργεια E είναι επιτρεπτή ...ακόμη και η τιμή $E=0$

Κβαντικά.... Η Αρχή της Απροσδιοριστίας εν δράσει...

$$\Delta x \sim A$$

$$\Delta p \sim \hbar / \Delta x \sim \hbar / A$$

$$E = K(x) + U(x) \geq K$$

$$K = \frac{p^2}{2m} \geq \frac{\Delta p^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2mA^2}$$

$$E = U(A) = \frac{1}{2} m \omega^2 A^2$$

$$A^2 = \frac{2E}{m\omega^2} \quad (1)$$

$$E \geq \frac{\hbar^2}{2mA^2} \xrightarrow{(1)} E \geq \frac{\hbar^2 \omega^2}{4E} \rightarrow E^2 \geq \frac{\hbar^2 \omega^2}{4}$$

$$E \geq \frac{\hbar \omega}{2}$$

“Ενέργεια μηδενικού σημείου”

Τα κβαντικά σωματίδια δεν πέφτουν ποτέ στον πάτο του πηγαδιού...

Η Εξίσωση Schrödinger & Παραδείγματα 12/20

2. Ο αρμονικός ταλαντωτής

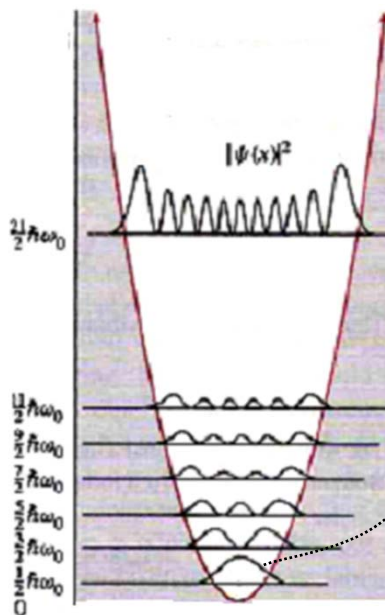
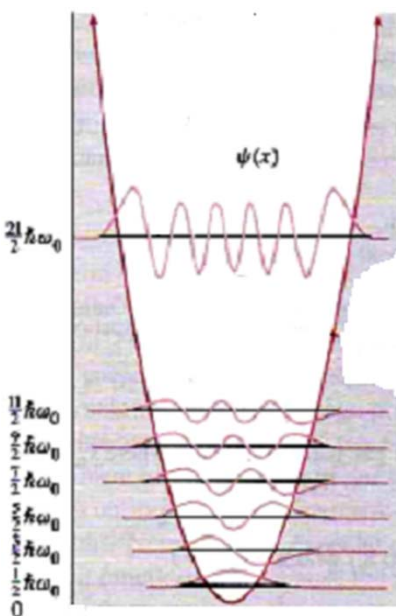
Επιπλέον, κβαντικά....
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x)$$

δεν είναι κάθε ενέργεια επιτρεπτή...

Κβάντωση Ενέργειας $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, n = 0,1,2,\dots$ Planck (Μέλαν σώμα): $E_n = n\hbar\omega$

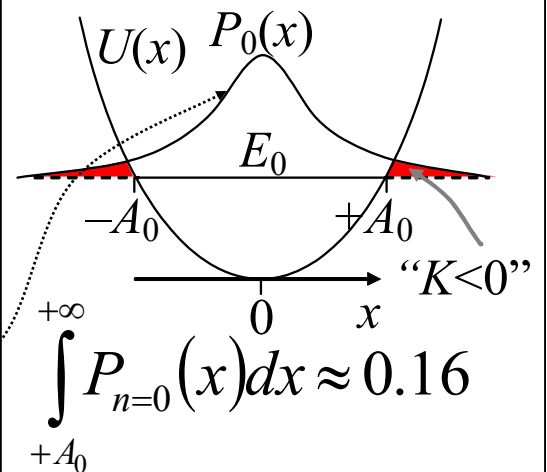
Αρχή της Αντιστοιχίας: Για μεγάλους κβαντικούς αριθμούς, τα ενεργειακά επίπεδα διαμορφώνουν ένα συνεχές πεδίο επιτρεπτών ενεργειακών τιμών; Ποια η συμπεριφορά της σχετικής ενεργειακής διαφοράς $\Delta E_{n+1,n}/E_n$ για $n \gg 1$;

- Κυματοσυναρτήσεις και πιθανότητες



Θεμελιώδης κατάσταση

$$P_{n=0}(x) = C e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$$



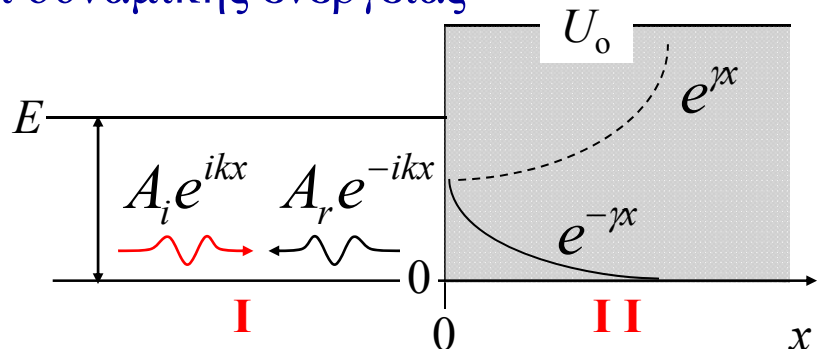
“Αρνητική κινητική ενέργεια”; Στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή αποδεικνύεται ότι η αβεβαιότητα $\Delta K = \Delta p^2/2m > E_0$! Η προσπάθεια εύρεσης του σωματιδίου στην περιοχή αυτή οδηγεί σε πλήρη άγνοια όσον αφορά την κινητική του ενέργεια.

ΣΚΕΛΑΣΗ

Παράδειγμα 3^ο: Σκαλοπάτι δυναμικής ενέργειας

(α) $E < U_0$

Η εξίσωση Schrödinger προβλέπει...



$$\psi_I(x) = A_i e^{ikx} + A_r e^{-ikx} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi_{II}(x) = B_+ e^{\gamma x} + B_- e^{-\gamma x} \quad \gamma = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

0 $\longrightarrow$ διότι διαφορετικά... $\psi_{II}(x \rightarrow \infty) \rightarrow \infty$

• $\psi(x)$ και $d\psi(x)/dx$ πρέπει να είναι συνεχείς παντού, συμπεριλαμβανομένου και του σημείου $x=0$

$$\boxed{\psi_I(0) = \psi_{II}(0)}$$

Από αυτές τις δύο οριακές συνθήκες βρίσκουμε ότι...

$$\left. \frac{d\psi_I(x)}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi_{II}(x)}{dx} \right|_{x=0}$$

$$\psi'_I(x) = ik(A_i e^{ikx} - A_r e^{-ikx})$$

$$\psi'_{II}(x) = -\gamma B_- e^{-\gamma x}$$

$$A_i + A_r = B_-$$

$$ik(A_i - A_r) = -\gamma B_-$$

...και, καθώς το A_i είναι πειραματικά ελέγξιμο

(ροή εισερχομένων σωματιδίων)...

3. Σκαλοπάτι δυναμικής ενέργειας ($E < U_0$)

έχουμε...

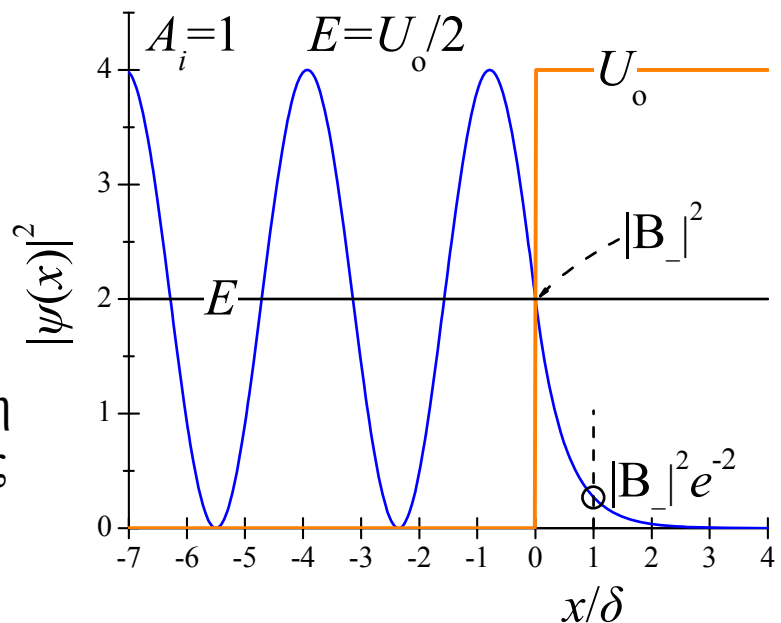
$$\frac{A_r}{A_i} = \frac{k - i\gamma}{k + i\gamma} \quad \frac{B_-}{A_i} = \frac{2k}{k + i\gamma}$$

Συντελεστής (Πιθανότητα) Ανάκλασης...

$$R = \left| \frac{A_r}{A_i} \right|^2 = 1 \quad \text{για κάθε } E < U_0$$

Καμία πιθανότητα διέλευσης
σε συμφωνία με την
κλασσική πρόβλεψη...

...εκτός από τη διείσδυση
στην κλασσικά απαγορευμένη
περιοχή “αρνητικής κινητικής
ενέργειας”



• Το μήκος διείσδυσης (ορισμός)

$$e^{-2} \approx 0.135$$

$$|\psi_{II}(x)|^2 \propto e^{-2\gamma x} = e^{-2\frac{x}{\delta}}$$

$$\delta \equiv \frac{1}{\gamma} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - E)}}$$

μεγαλώνει...

- όσο μικραίνει η μάζα του σωματιδίου
(τα ελαφριά σωματίδια είναι “πιο κβαντικά” από τα βαριά)
- όσο η E πλησιάζει το ύψος του σκαλοπατιού U_0

3. Σκαλοπάτι δυναμικής ενέργειας ($E < U_0$)

“Αρνητική κινητική ενέργεια”; Τι λέει η Αρχή της Απροσδιοριστίας;

Μια μέτρηση ικανή να εντοπίσει το σωματίδιο στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή πρέπει να έχει αβεβαιότητα θέσης μικρότερη ή το πολύ

$$\Delta x \leq \delta$$

ίση με το μήκος διεξόδου:

Συνεπώς...αβεβαιότητα ορμής:

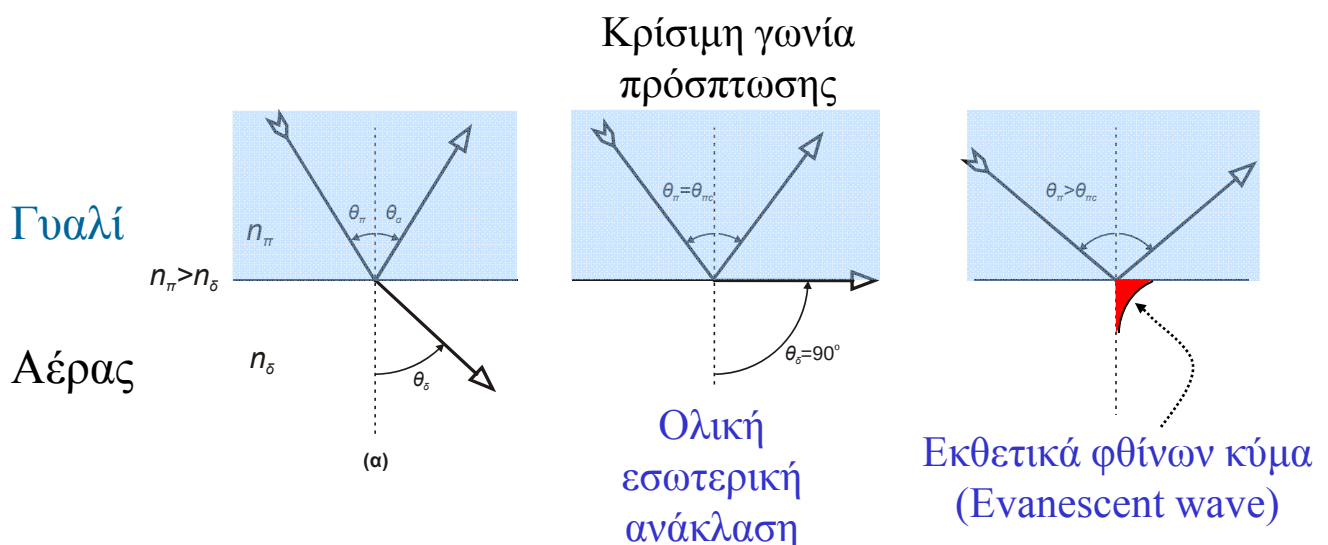
$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{\delta} = \sqrt{2m(U_0 - E)}$$

...και αβεβαιότητα κινητικής ενέργειας:

$$\Delta K = \frac{\Delta p^2}{2m} \geq U_0 - E$$

Άρα, μια μέτρηση ικανή να εντοπίσει το σωματίδιο στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή *διαταράσσει την ενέργειά του κατά το ποσό που απαιτείται ώστε το σωματίδιο να υπερβεί το σκαλοπάτι δυναμικής ενέργειας!*

- Και όμως υπάρχει κλασσικό ανάλογο
(αλλά για τα Η/Μ κύματα όχι τα σωματίδια!)

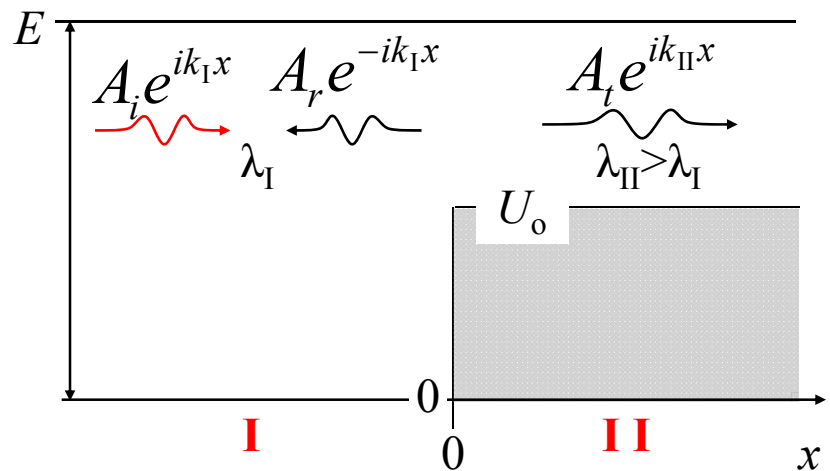


Το φως διεισδύει αλλά δεν διαδίδεται...

3. Σκαλοπάτι δυναμικής ενέργειας

(β) $E > U_0$

Η εξίσωση Schrödinger προβλέπει...



$$\psi_I(x) = A_i e^{ik_I x} + A_r e^{-ik_I x} \quad k_I = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi_{II}(x) = A_t e^{ik_{II} x} + \cancel{B} e^{-ik_{II} x} \quad k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$$

0 $\longrightarrow$ διότι έχουμε εισερχόμενο σωματίδιο μόνο από αριστερά

• $\psi(x)$ και $d\psi(x)/dx$ πρέπει να είναι συνεχείς παντού, συμπεριλαμβανομένου και του σημείου $x=0$

...εφαρμόζοντας την ίδια διαδικασία όπως και προηγουμένως...

Πιθανότητες

Συντελεστής Ανάκλασης

$$R = \left| \frac{A_r}{A_i} \right|^2 = \frac{(k_I - k_{II})^2}{(k_I + k_{II})^2}$$

Συντελεστής Διέλευσης

$$T = \left| \frac{A_t}{A_i} \right|^2 = \frac{4k_I k_{II}}{(k_I + k_{II})^2}$$

$$R + T = 1$$

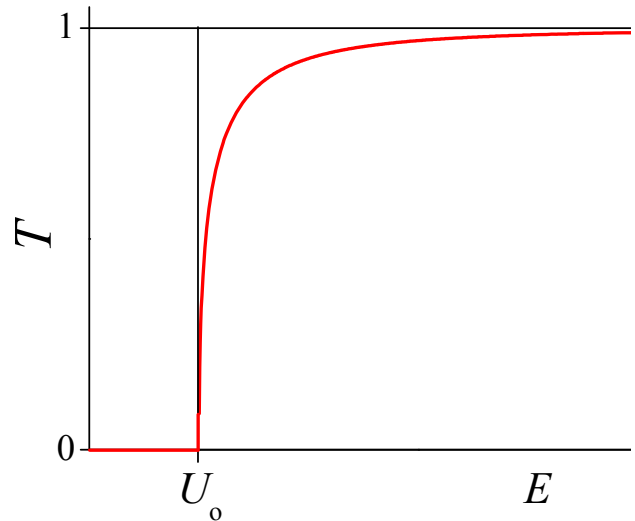
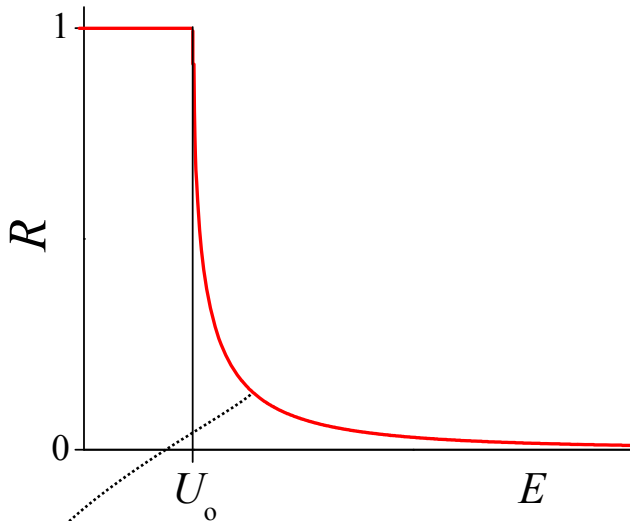
Το από αριστερά εισερχόμενο σωματίδιο

είτε θα ανακλαστεί είτε θα διέλθει

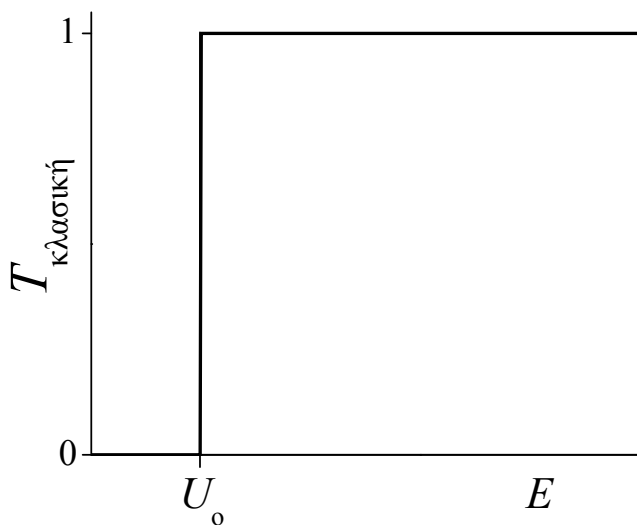
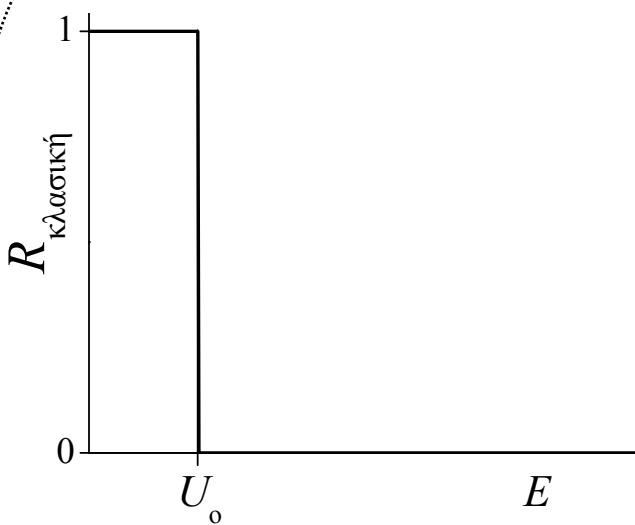
3. Σκαλοπάτι δυναμικής ενέργειας

Συνολική Εικόνα

Σύγκριση Κβαντικής πρόβλεψης...



...με την Κλασσική πρόβλεψη...



Τα κβαντικά σωματίδια μπορεί να ανακλαστούν ακόμη και όταν τους επιτρέπεται να διέλθουν...

Το φαινόμενο είναι τόσο εντονότερο όσο η ενέργειά τους E πλησιάζει (εκ των άνω) το ύψος του σκαλοπατιού U_0

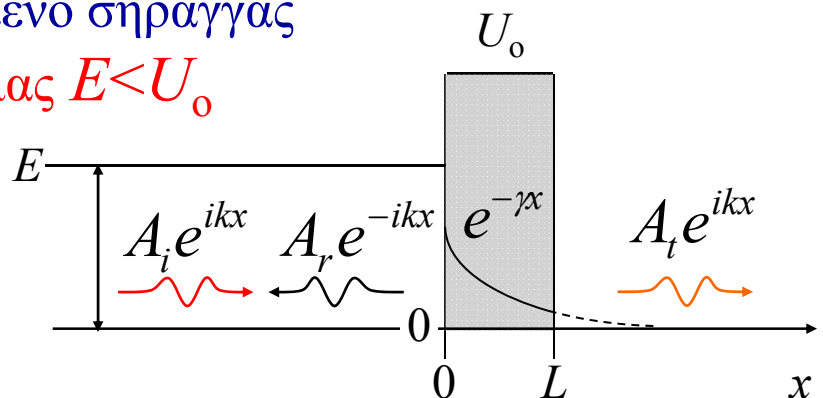
ΣΚΕΔΑΣΗ

Παράδειγμα 4^ο: Το φαινόμενο σήραγγας

Φράγμα δυναμικής ενέργειας $E < U_0$

Εάν η κυματοσυνάρτηση

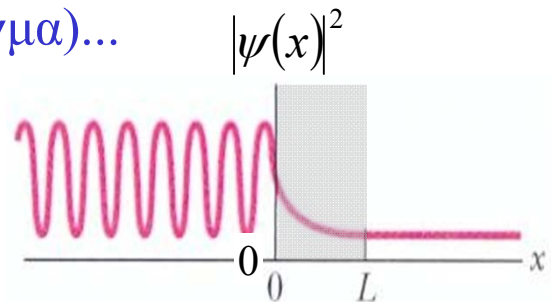
$$\psi_{II} \propto e^{-\gamma x}$$



δεν έχει σβήσει τελείως
στο τέλος του φράγματος

τότε, *προσεγγιστικά* (ψηλό, ευρύ φράγμα)...

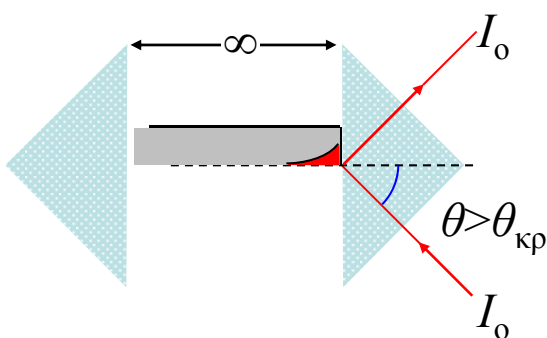
$$T = \left| \frac{A_t}{A_i} \right|^2 \sim e^{-2\gamma L} = e^{-2\sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} L}$$



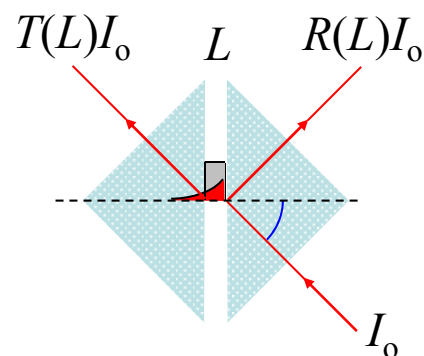
...και το σωματίδιο μπορεί να έχει

μη-μηδενική πιθανότητα να διαπεράσει το φράγμα!

- Το κλασσικό ανάλογο (αλλά για τα H/M κύματα όχι τα σωματίδια!)



Ολική Εσωτερική Ανάκλαση



Ανικανοποίητη

Ολική Εσωτερική Ανάκλαση

Το *φως* διεισδύει *και* διαδίδεται...

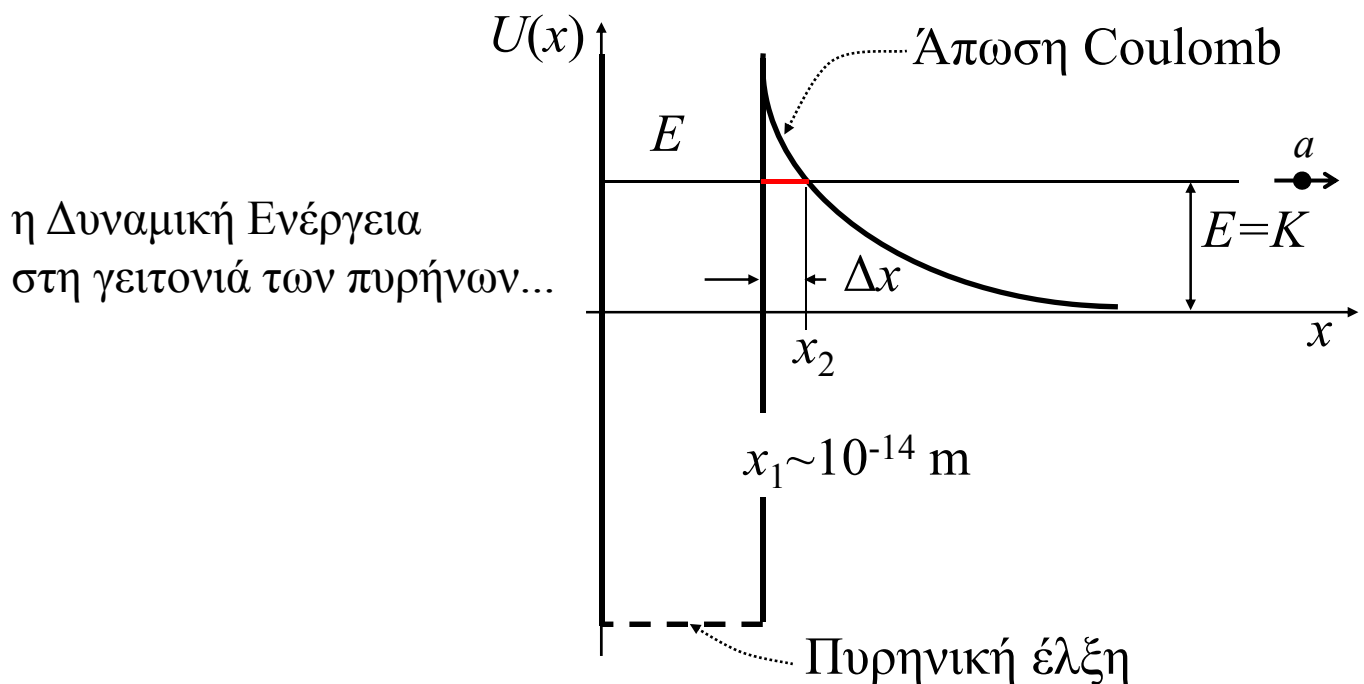
4: Το φαινόμενο σήραγγας

$$T \sim e^{-2\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}L}$$

Τεράστια (*εκθετική*) ευαισθησία

- στο μήκος του φράγματος (L)
- τη μάζα του σωματιδίου (m)
- την διαφορά ενέργειας $U_0 - E$

• Η ευαισθησία αυτή εξηγεί γιατί, ενώ η κινητική ενέργεια των εκπεμπόμενων σωματιδίων α κατά τη πυρηνική διάσπαση μεταβάλλεται σε μια μικρή περιοχή των μερικών MeV, οι χρόνοι ημιζωής των πυρήνων εκτείνονται από 10^{-7} sec (μεγάλο T) έως και 10^{10} yrs (αμελητέο T)!



... με μόνη διαφορά ότι λόγω της μεταβολής της $U(x)$ το $\gamma\Delta x$ πρέπει να αντικατασταθεί από τη “μέση του τιμή”:

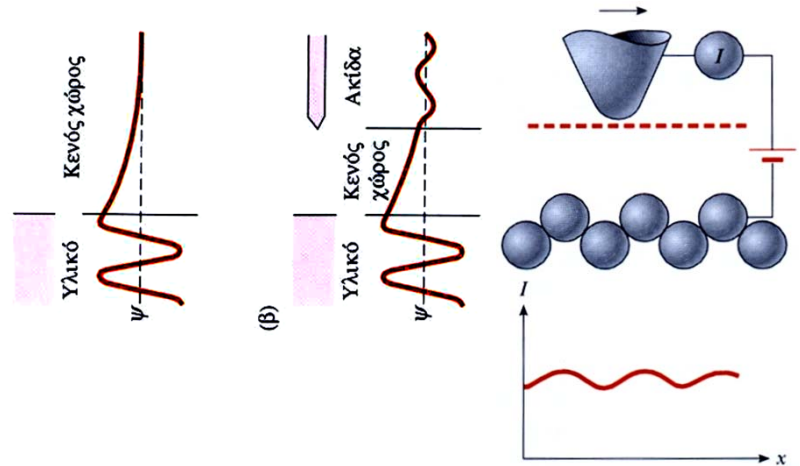
$$\gamma\Delta x = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar} \Delta x \rightarrow \bar{\gamma}\Delta x = \int_{x_1}^{x_2} \frac{\sqrt{2m(U(x)-E)}}{\hbar} dx$$

Η Εξίσωση Schrödinger & Παραδείγματα 20/20

4: Το φαινόμενο σήραγγας

- Το μικροσκόπιο σήραγγας (Binnig & Rohrer, Βρ. Nobel 1986)

Τα ηλεκτρόνια ενός υλικού είναι εγκλωβισμένα σε αυτό (πηγάδι δυναμικής ενέργειας βάθους ίσου με το έργο εξόδου). Πλησιάζοντας μια μεταλλική ακίδα στην επιφάνεια, ο μεταξύ τους χώρος αντιστοιχεί σε ένα φράγμα δυναμικής ενέργειας.



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 την αποτυπώνει και την “χαρτογραφεί”

- Το “κβαντικό μαντρί”

Ακόμη, η ακίδα ασκεί μικρή δύναμη, ικανή να κινήσει μεμονωμένα άτομα....

48 άτομα σιδήρου σε κυκλικό σχηματισμό επάνω σε μια επιφάνεια χαλκού. Οι εσωτερικοί κυματισμοί αντιστοιχούν σε κύματα de Broglie ηλεκτρονίων παγιδευμένων στο “μαντρί”

