Κεφάλαιο 2. Ο κυματοσωματιδιακός δυισμός της ύλης

Εδάφια:

Στο κεφάλαιο αυτό θα περιγράψουμε επιγραμματικά τα φαινόμενα και την πορεία της έρευνας που οδήγησε στην έννοια της κυματικής συμπεριφοράς των σωματιδίων. Η κυματική συμπεριφορά των σωματιδίων και η σωματιδιακή συμπεριφορά της ακτινοβολίας (που περιγράφηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο) αποτελούν τις δύο συνιστώσες της *αρχής του κυματοσωματιδιακού δυισμού* η οποία ήταν ένα από τα πιο θεμελιώδη βήματα στη γέννηση της κβαντικής θεωρίας.

2.a Η σύσταση και η μορφή των ατόμων

Η υπόθεση ότι η ύλη αποτελείται από αδιαίρετες μονάδες, τα άτομα, υπήρχε από την Αρχαία Ελλάδα (Δημόκριτος). Η πρώτες επιστημονικές μαρτυρίες όμως ήλθαν την περίοδο του Διαφωτισμού. Πειράματα που έδρασαν αποφασιστικά στην ανάπτυξη της ιδέας του ατόμου ήταν

- Τα πειράματα ηλεκτρόλυσης του Faraday, που οδήγησαν στον νόμο της ηλεκτρόλυσης.
- Το πείραμα του Thomson, όπου μετρήθηκε ο λόγος *e/m* (φορτίο προς μάζα) για το ηλεκτρόνιο και άρα ανακαλύφθηκε στην ουσία το ηλεκτρόνιο (για την ανακάλυψή του αυτή ο Thomson πήρε το βραβείο Nobel, το 1908).
- Το πείραμα του Millikan, όπου μετρήθηκε το φορτίο του ηλεκτρονίου (βραβείο Nobel 1923).

Τα πειράματα του Thomson απέδειξαν την ύπαρξη του ηλεκτρονίου και οδήγησαν στα πρώτα μοντέλα του ατόμου. Στο μοντέλο του Thomson τα ηλεκτρόνια ήταν ομοιόμορφα κατανεμημένα μέσα στο άτομο. Το μοντέλο αυτό αμφισβητήθηκε από τον Lenard, ο οποίος στα πειράματά του διαπίστωσε ότι τα ηλεκτρόνια μπορούσαν να περάσουν εύκολα από λεπτά υμένια, πράγμα που σήμαινε ότι το άτομο θα πρέπει να είναι σχετικά άδειο.

Ο Rutherford, επηρεασμένος από τη δουλειά του Lenard, επιχείρησε να ελέγξει πειραματικά το μοντέλο του Thomson. Το πείραμα του Rutherford συνίστατο στο βομβαρδισμό λεπτών υμενίων χρυσού με ισχυρά διεισδυτικά σωματίδια α (πυρήνες He). Το πείραμα αυτό έδειξε ότι κάποια από τα σωματίδια α υφίσταντο έντονη σκέδαση και κάποια άλλα περνούσαν σχεδόν ανεμπόδιστα από τα υμένια. Η ανάλυση των αποτελεσμάτων οδήγησε στο πλανητικό μοντέλο του ατόμου, σύμφωνα με το οποίο σχεδόν όλη η μάζα του ατόμου είναι συγκεντρωμένη σε μια μικρή περιοχή, τον πυρήνα, ενώ τα ηλεκτρόνια κινούνται σε μεγάλη απόσταση από τον πυρήνα.

Το μοντέλο του ατόμου Rutherford δεν μπορούσε να εξηγηθεί με βάση την κλασική θεωρία. Σύμφωνα με την κλασική θεωρία κάθε επιταχυνόμενο φορτίο ακτινοβολεί. Έτσι, το ηλεκτρόνιο, όντας επιταχυνόμενο γύρω από τον πυρήνα (κεντρομόλος επιτάχυνση) θα ακτινοβολεί χάνοντας συνεχώς ενέργεια, μέχρι την πτώση του τελικά στον πυρήνα.

2.b Ατομικά φάσματα

Αντίθετα από τα θερμικά φάσματα των στερεών ή των υγρών σωμάτων, τα οποία είναι συνεχή (όπως συζητήθηκε στο κεφάλαιο της ακτινοβολίας μέλανος σώματος), τα φάσματα εκπομπής των μεμονωμένων ατόμων είναι γραμμικά. Εκπέμπονται δηλαδή μόνο ορισμένες συχνότητες, οποίες εμφανίζονται ως φωτεινές γραμμές πάνω σε ένα σκοτεινό υπόβαθρο. Οι γραμμές αυτές (φασματικές γραμμές) είναι χαρακτηριστικές κάθε στοιχείου. (Εκτός από τα φάσματα εκπομπής υπάρχουν και τα φάσματα απορρόφησης, τα οποία παίρνουμε όταν φωτίσουμε ένα αέριο με συνεχές φως. Τα φάσματα αυτά αποτελούνται από σκοτεινές γραμμές σε φωτεινό υπόβαθρο - οι σκοτεινές αυτές γραμμές είναι στις ίδιες συχνότητες με τις φωτεινές γραμμές του φάσματος εκπομπής του αερίου.)

Στο δεύτερο μισό του 19ου αι. υπήρχε μεγάλος αριθμός πειραματικών δεδομένων πάνω στα τα φάσματα των ατόμων, δεν υπήρχε όμως θεωρητική ερμηνεία (η ερμηνεία, τουλάχιστον για το άτομο του Υδρογόνου, δόθηκε το 1913, με τις εργασίες του Bohr). Για τις φασματικές γραμμές του ατόμου του Υδρογόνου υπήρχε ο φαινομενολογικός τύπος

$$1/\lambda = f/c = R\,[\,1/n^2 - 1/m^2] \qquad (1)$$

όπου n, m ακέραιοι και and $R = 1.10\times10^7$ m^{-1} η σταθερά του Rydberg. Για n=1 και $m>n$ έχουμε τη σειρά Lyman (στο υπεριώδες), για n=2 τη σειρά Balmer (ορατό και υπεριώδες) και για n=3 φωτόνια στο υπέρυθρο.

2.c Το μοντέλο του Bohr για το άτομο

Το μοντέλο του Bohr για το άτομο αναπτύχθηκε στην προσπάθεια ερμηνείας των ατομικών φασμάτων και της σταθερότητας του ατόμου στο μοντέλο του Rutherford. Ερμηνεύει εξαιρετικά το φάσμα του Υδρογόνου, τη σταθερότητα του ατόμου, το έργο ιονισμού του, και υπολογίζει την τάξη μεγέθους του ατόμου. (Για το μοντέλο του αυτό, ο Bohr πήρε το βραβείο Nobel, το 1922.)

Οι υποθέσεις (αξιώματα) που έκανε ο Bohr (αυθαίρετα) στην την ανάπτυξη της θεωρίας του είναι οι εξής:

1) Οι ενεργειακές καταστάσεις του ατόμου είναι κβαντωμένες. Το άτομο σε αυτές τις καταστάσεις δεν ακτινοβολεί. Ακτινοβολεί μόνο κατά τη μετάβαση από μια κατάσταση σε άλλη. Η ενέργεια του εκπεμπόμενου φωτονίου ισούται με την ενεργειακή διαφορά των δύο καταστάσεων.

2) Επιτρέπονται μόνο εκείνες οι κυκλικές τροχιές στις οποίες η στροφορμή του ηλεκτρονίου, L, είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της ανηγμένης σταθεράς του Planck, $\hbar$ $(\hbar=h/2\pi)$, δηλαδή

$$L = m\,v\,r = n\,\hbar \text{ (συνθήκη κβάντωσης)}, \; n=1, 2, 3, \ldots \qquad (2)$$

Ο ακέραιος αριθμός n που αριθμεί τα κβάντα (ελάχιστες διακριτές ποσότητες) της στροφορμήε λέγεται κβαντικός αριθμός της κάθε τροχιάς. Από τη συνθήκη κβάντωσης της στροφορμής και από τις εξισώσεις της κυκλικής κίνησης (δύναμη Coulomb (ke^2/r^2) = κεντρομόλος δύναμη (mv^2/r), $v=\omega r$), υπολογίζεται η ακτίνα της τροχιάς, a_n, η ενέργεια, E_n, και η ταχύτητα v_n του ηλεκτρονίου που βρίσκεται στην τροχιά με κβαντικό αριθμό n στο άτομο του Υδρογόνου:

$$r_n = \frac{\hbar^2}{kme^2} n^2 = n^2 a_0, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{kme^2} = 0.529 \text{ A} \tag{3}$$

$$E_n = \frac{k^2 m^2 e^4}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -13.6 \frac{1}{n^2} \text{eV} \ , \qquad v_n = \frac{ke^2}{\hbar n} = \frac{c}{137} \frac{1}{n} \tag{4}$$

Για άτομα με Z πρωτόνια στον πυρήνα, το e^2 στους παραπάνω τύπους γίνεται Ze^2.

Για τη θεωρία του Bohr ισχύει η γνωστή *Αρχή της αντιστοιχίας*: Στο όριο των μεγάλων κβαντικών αριθμών τα αποτελέσματα του Bohr θα συμπίπτουν με τα αντίστοιχα κλασικά.

Ερωτήσεις: Πώς το μοντέλο του Bohr ερμηνεύει τη σταθερότητα του ατόμου; Πώς ερμηνεύει τα ατομικά φάσματα; Ποια είναι τα κλασικά όρια της θεωρίας του Bohr και γιατί; (απαντήσεις στις σημειώσεις Σ. Τραχανά)

2.d Η κυματική συμπεριφορά των σωμάτων: Υλικά κύματα

Ενώ το μοντέλο του Bohr έδινε ικανοποιητικές απαντήσεις στα διάφορα μέχρι τότε προβλήματα, υπήρχαν αρκετά θέματα που παρέμεναν ανερμήνευτα (σχετική ένταση ατομικών φασμάτων, φάσματα βαριών στοιχείων, μη περιοδικές κινήσεις κλπ). Επιπλέον δεν υπήρχε μια θεμελίωση/ερμηνεία των βασικών υποθέσεων του Bohr.

Η ερμηνεία αυτή δόθηκε από τον De Broglie, το 1923. O De Broglie, υποκινούμενος από τις εργασίες πάνω στην διττή φύση της ακτινοβολίας, υπέθεσε την ίδια διττή φύση και για τα σωματίδια. Αφού τα φωτόνια συμπεριφέρονται ως σωματίδια γιατί και τα σωματίδια να μην συμπεριφέρονται ως κύματα; (Επιπλέον, για τα κύματα η κβάντωση ήταν κάτι ήδη γνωστό, π.χ. στάσιμα κύματα σε χορδή).

Το βασικό αξίωμα De Broglie ήταν το εξής: Κάθε σωματίδιο συμπεριφέρεται και ως κύμα. Οι σχέσεις που συνδέουν τα κυματικά του χαρακτηριστικά (συχνότητα, μήκος κύματος) με τα σωματιδιακά (ενέργεια, ορμή) είναι οι

$$f=E/h, \qquad \lambda=h/p \tag{5}$$

οι οποίες είναι οι ίδιες που είχαν διατυπωθεί από τον Αϊνστάιν για τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα.

Δεχόμενοι ότι η κίνηση του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα έχει κυματικό χαρακτήρα (δηλ. τα e^- όταν κινούνται γύρω από τον πυρήνα συμπεριφέρονται ως κύματα) και άρα επιτρέπονται μόνο εκείνες οι κυκλικές τροχιές που φτιάχνουν στάσιμα κύματα ($2\pi r=n\lambda$, με $\lambda=h/p$) μπορούμε να ερμηνεύσουμε αβίαστα τη συνθήκη κβάντωσης της στροφορμής του

Bohr. Επιπλέον, αφού η συχνότητα, $\omega=2\pi f=v/r$, είναι κβαντισμένη, είναι φυσιολογική η κβάντωση και της ενέργειας.

Από τους αμέσως προηγούμενους τύπους, σε συνδυασμό με τη σχέση ενέργειας ορμής, μπορεί να εξαχθεί εύκολα η σχέση ενέργειας-μήκους κύματος για υλικά κύματα (σωματίδια):

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \tag{6}$$

Εφαρμογή: Υπολογίστε το μήκος κύματος για ένα ηλεκτρόνιο ενέργειας 2 eV. Εξηγήστε γιατί ένα ηλεκτρονικό μικροσκόπιο που λειτουργεί με e^- ενέργειας 2 eV θα έχει μεγαλύτερη διακριτική ικανότητα από ένα οπτικό μικροσκόπιο.

Η κυματική συμπεριφορά των e^- αποδείχθηκε πειραματικά για πρώτη φορά το 1927, από τους Davisson-Germer. Οι Davisson-Germer πραγματοποίησαν πειράματα περίθλασης ηλεκτρονίων από κρυστάλλους Ni, και η εικόνα περίθλασης που παρατήρησαν ήταν ανάλογη με εκείνη της περίθλασης ακτίνων Χ. Απέδειξαν έτσι την κυματική συμπεριφορά του e^- και επιβεβαίωσαν το μήκος κύματος De Broglie.

2.e. Ο κυματοσωματιδιακός δυισμός της ύλης: Αρχή αβεβαιότητας

Μια θεμελιώδης αρχή που απορρέει από τον κυματικό χαρακτήρα των σωματιδίων είναι η "Αρχή της αβεβαιότητας (ή απροσδιοριστίας)" του Heisenberg. Σύμφωνα με την αρχή αυτή, είναι αδύνατον να μετρηθεί ταυτόχρονα τη θέση και η ορμή ενός σωματιδίου με απόλυτη ακρίβεια. Συγκεκριμένα, "Το γινόμενο των αβεβαιοτήτων θέσης και ορμής ενός σωματιδίου δεν μπορεί να είναι μικρότερο από το μισό της σταθεράς του Planck $\hbar$", δηλ.

$$\Delta x\, \Delta p > \hbar/2 \tag{7}$$

Με άλλα λόγια, όσο πιο αυστηρά καθορισμένη είναι η θέση ενός σωματιδίου, τόσο μεγαλύτερη είναι η αβεβαιότητα στην ορμή του. Στην πράξη, για μικροσκοπικά σωματίδια όπως π.χ. ηλεκτρόνια, το γινόμενο των αβεβαιοτήτων θέσης ορμής είναι περίπου ίσο με $\hbar$, μπορεί κανείς δηλαδή να θεωρήσει ότι $\Delta x\, \Delta p \approx \hbar$.

Η αρχή της αβεβαιότητας δεν είναι τίποτε άλλο από μια άλλη έκφραση της κυματικής συμπεριφοράς των σωματιδίων. Στην κυματική θεωρία είναι γνωστό (και αποδεικνύεται εύκολα) ότι για να κατασκευαστεί ένα κύμα περιορισμένο χωρικά (όπως θα περίμενε κανείς να είναι ένα σωματίδιο) θα πρέπει να γίνει υπέρθεση πολλών επίπεδων κυμάτων με παραπλήσια μήκη κύματος, άρα και διαφορετικές παραπλήσιες ορμές ($p=h/\lambda=\hbar k$, όπου k ο κυματαριθμός, $k=2\pi/\lambda$), και όσο πιο εντοπισμένο χωρικά είναι ένα κύμα τόσο πιο μεγάλο είναι το εύρος μηκών κύματος (άρα και των ορμών) που περιέχει (δηλ. που θα πρέπει να χρησιμοποιήσει κανείς για να το κατασκευάσει). Αν θεωρήσουμε ότι ένα σωματίδιο περιγράφεται από ένα τέτοιο κύμα, η ταχύτητά του, v, θα είναι ίση με την ταχύτητα ομάδας v_g του κύματος ($v_g=\Delta\omega/\Delta k=\Delta E/\Delta p=p/m=v$).

Ερωτήσεις: Πώς η αρχή της αβεβαιότητας εξηγεί τη σταθερότητα του ατόμου; Γιατί δεν πέφτουν τα ηλεκτρόνια στον πυρήνα; Πώς ο εντοπισμός των σωματιδίων κάνει πιο έκδηλη την κβαντική τους συμπεριφορά; (Για τις απαντήσεις δείτε τις σημειώσεις Σ. Τραχανά.)

Εκτός από τη σχέση αβεβαιότητας θέσης-ορμής υπάρχει και μια άλλη σχέση αβεβαιότητας: αυτή ενέργειας-χρόνου,

$$\Delta E\ \tau > \hbar \tag{8}$$

όπου τ είναι ο χρόνος που χρειάζεται να περιμένουμε για να δούμε μια μεταβολή στην ενεργειακή κατάσταση ενός φυσικού συστήματος και ΔE η αβεβαιότητα στην ενέργεια του συστήματος. Η σχέση (8) μπορεί να ερμηνευτεί ως εξής: όσο πιο αργά μεταβάλλεται ένα φυσικό σύστημα τόσο πιο καλά καθορισμένη είναι η ενέργειά του.

Θα πρέπει να αναφέρουμε τέλος ότι η αβεβαιότητα ενός μεγέθους x ορίζεται ως $(\Delta x)^2=<|x-<x>|^2>$ και μπορεί να αποδειχτεί εύκολα ότι ισούται με $(\Delta x)^2=<x^2>-<x>^2$, όπου $<x>$ είναι η μέση τιμή του x.

2.f. Κυματοσυνάρτηση και κυματική εξίσωση

Αφού τα σωματίδια συμπεριφέρονται σαν κύματα, θα πρέπει να περιγράφονται και αυτά, όπως και κάθε κύμα, από μια κυματοσυνάρτηση, π.χ. $\Psi(x,t)=exp[i(kx-\omega t)]$. Κάθε κυματοσυνάρτηση όμως περιγράφει μια μεταβολή (ταλάντωση) κάποιας φυσικής ποσότητας, π.χ. των τμημάτων ταλαντούμενης χορδής, των μορίων νερού κλπ. Στην περίπτωση ενός σωματιδίου (εντοπισμένης ποσότητας) τι θα μπορούσε να περιγράφει η κυματοσυνάρτηση; Δεν θα μπορούσε να περιγράφει π.χ. τη θέση ενός σωματιδίου γιατί τότε θα έπρεπε να είναι παντού μηδέν εκτός από ένα δεδομένο σημείο. *Εδώ η κυματοσυνάρτηση εκφράζει πιθανότητα.* Δίνει το πλάτος πιθανότητας να βρούμε το σωμάτιο στη μια ή την άλλη περιοχή του χώρου. Δηλαδή:

Αυτό που είναι κύμα (απλωμένο) δεν είναι το ίδιο το σωμάτιο αλλά η πιθανότητα να το βρούμε στη μια ή την άλλη περιοχή του χώρου.

Αν ένα σωματίδιο περιγράφεται από μια κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$, τότε:

Το $|\Psi(x,t)|$ λέγεται πλάτος πιθανότητας

Η ποσότητα

$|\Psi(x,t)|^2=P(x)$ λέγεται πυκνότητα πιθανότητας

(πιθανότητα ανά μονάδα μήκους).

Άρα για ένα σωματίδιο που εκτελεί μονοδιάστατη κίνηση (π.χ. μπορεί να κινηθεί μόνο κατά τον άξονα των x) η ποσότητα $|\Psi(x,t)|^2dx$ είναι η πιθανότητα να το βρούμε μεταξύ x και $x+dx$. Το ολοκλήρωμα αυτής της ποσότητας ως προς dx σε όλο το διαθέσιμο χώρο δίνει την πιθανότητα το σωματίδιο να υπάρχει κάπου στο χώρο (τη συνολική πιθανότητα) και είναι φυσικά μονάδα.

Γνωρίζοντας την κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου μπορούμε να υπολογίσουμε σχεδόν όλα τα χαρακτηριστικά της κίνησής του. Π.χ. η μέση τιμή της θέσης του ή οποιασδήποτε συνάρτησης της θέσης, $f(x)$, θα δίνεται από

$$<x>=\int_{-\infty}^{+\infty} x|\Psi(x,t)|^2dx \quad \text{ή} \quad <f(x)>=\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)|\Psi(x,t)|^2dx \tag{9}$$

(Οι παραπάνω τύποι δεν είναι παρά εφαρμογή του ορισμού της μέσης τιμής.)

Κυματική εξίσωση (εξίσωση Schrodinger):

Η κυματοσυνάρτηση *Ψ(x,t)* ενός υλικού κύματος (σωματιδίου), όπως και κάθε είδους κύματος, δίδεται/υπολογίζεται και εδώ από τη λύση μιας κυματικής εξίσωσης, χαρακτηριστικής του προβλήματος. Η εξίσωση αυτή στην περίπτωσή μας λέγεται **εξίσωση Schrödinger** και είναι η **βασική εξίσωση της Κβαντομηχανικής**.

Για ένα σωμάτιο που κινείται σε δυναμικό *V(x)* η εξίσωση Schrödinger έχει τη μορφή:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x)\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \qquad (10)$$

Η (10) είναι γνωστή ως χρονοεξαρτημένη εξ. Schrödinger) Πρόκειται για μια απλή διαφορική εξίσωση με σταθερούς συντελεστές, και οι λύσεις της μπορούν να γραφούν ως

$$\Psi(x,t)=\psi(x)e^{(-iE/\hbar)t} \qquad (11)$$

δηλαδή ως γινόμενο μιας συνάρτησης της θέσης και μιας συνάρτησης του χρόνου. Το χωρικό κομμάτι της κυματοσυνάρτησης, *ψ(x)*, θα ικανοποιεί τη γνωστή ως χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger, η οποία προκύπτει αν αντικαταστήσουμε στην χρονοεξαρτημένη εξίσωση (10) την πιο πάνω λύση (11):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x) \qquad (12)$$

Άσκηση: Δείξτε ότι για κυματοσυναρτήσεις της μορφής (11) ισχύει $|\Psi(x,t)|^2=|\psi(x)|^2$ (δηλαδή ότι η πυκνότητα πιθανότητας είναι ανεξάρτητη του χρόνου).

Στα πλαίσια του μαθήματος θα ασχοληθούμε αποκλειστικά με προβλήματα της μορφής (10) όπου το δυναμικό είναι συνάρτηση μόνο του χώρου και όχι του χρόνου και θα εστιαστούμε κυρίως στη χρονοανεξάρτητη εξ. Schrödinger (το χρονικό κομμάτι της κυματοσυνάρτησης θα είναι πάντα της μορφής (11) – το χωρικό θα εξαρτάται από το δυναμικό του συγκεκριμένου προβλήματος).