Αν τα κύματα του φωτός έχουν και σωματιδιακή φύση, μήπως κάποια σωματίδια έχουν και κυματική φύση?

Κυματική θεωρία της ύλης **(**1924) *Κάθε κινούμενο μικρό σωματίδιο, π.χ. ηλεκτρόνιο, παρουσιάζει διττή φύση, σωματιδίου και κύματος***.**

$$\lambda = \frac{h}{m\,u} = \frac{h}{p}$$

εξίσωση de Broglie

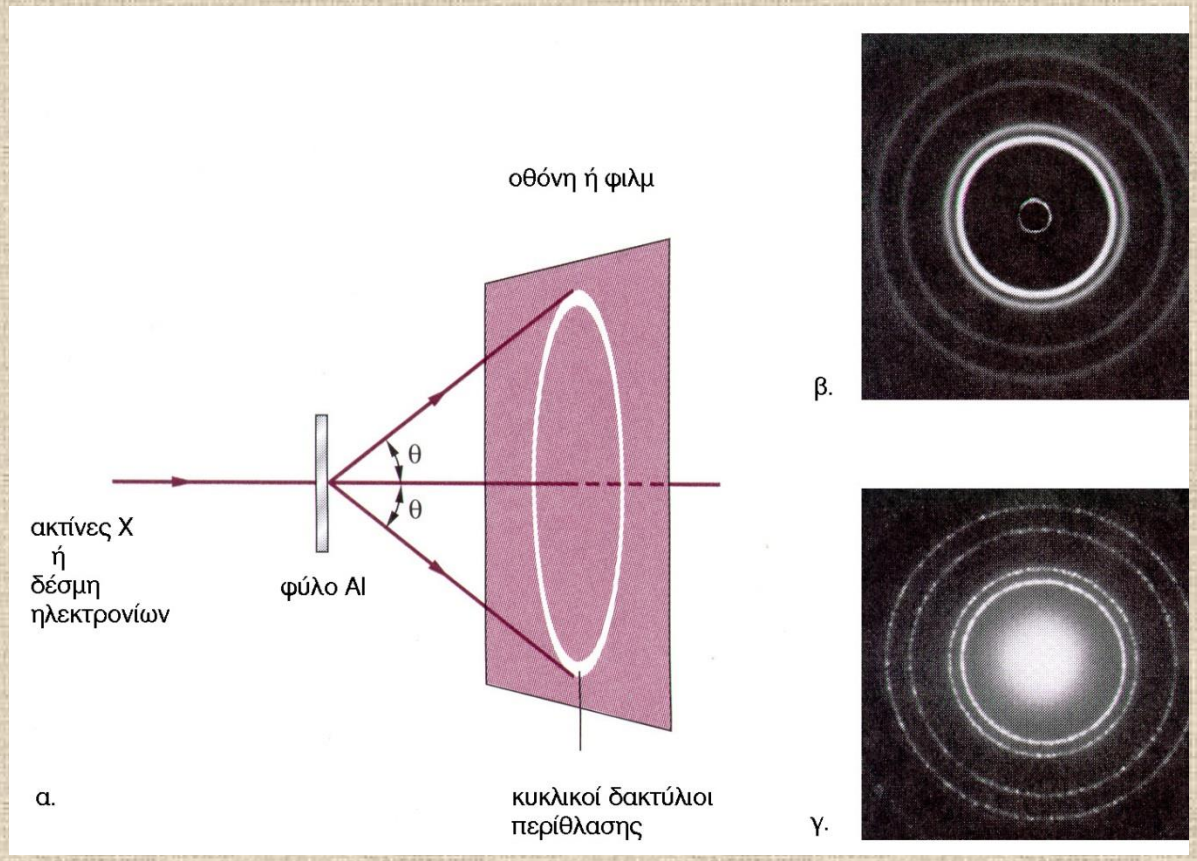
m: ιδιότητα σωματιδίου.
λ: ιδιότητα κύματος.
u: κοινή ιδιότητα σωματιδίου και κύματος

Τι είναι το ηλεκτρόνιο?

Κύμα ή σωματίδιο?

Sir G. P. Thomson (1937)
πειραματική απόδειξη της κυματικής φύσης των e

Διαγράμματα περίθλασης δέσμης ακτίνων Χ (πάνω) και ηλεκτρονίων (κάτω) μέσω λεπτού φύλλου αλουμινίου.



Joseph John Thomson (1856-1940)

ανακάλυψη ηλεκτρονίου
(1897)

Να υπολογίσετε το μήκος κύματος ενός πρωτονίου που κινείται με ταχύτητα 7,30 km/s.

Δίνονται: h = 6.63x10^{-34} J.s, m=1.67252x10^{-24} g

2. Χρησιμοποιούμε την εξίσωση του de Broglie ($\lambda = h/m\upsilon$), όπου m η μάζα του πρωτονίου ($1{,}67262 \times 10^{-27}$ kg), υ η ταχύτητα του πρωτονίου ($7{,}30$ km/s $= 7{,}30 \times 10^{3}$ m/s) και h η σταθερά του Planck ($h = 6{,}626 \times 10^{-34}$ kg · m^2/s):

$$\lambda = \frac{h}{m\upsilon} = \frac{6{,}626 \times 10^{-34}\ \text{kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}}{(1{,}67262 \times 10^{-27}\ \text{kg}) \times (7{,}30 \times 10^{3}\ \text{m/s})} = 5{,}4\underline{2}7 \times 10^{-11}\ \text{m} = 5{,}43 \times 10^{-11}\ \text{m}\ (54{,}3\ \text{pm})$$

Το μήκος κύματος των 54 pm εμπίπτει στην περιοχή των ακτίνων X του φάσματος.

3. Όταν φως που έχει συχνότητα $2{,}00 \times 10^{16}$ Hz προσπέσει σε επιφάνεια μετάλλου, αποσπώνται ηλεκτρόνια με κινητική ενέργεια $7{,}50 \times 10^{-18}$ J.

Υπολογίστε:

(α) Τη συχνότητα ν_o που αντιστοιχεί στην ελάχιστη ενέργεια E_o για απόσπαση ενός ηλεκτρονίου από το μέταλλο.

(β) Το μήκος κύματος των εκπεμπόμενων ηλεκτρονίων.

Υπόδειξη: Για τον υπολογισμό του μήκους κύματος των εκπεμπόμενων ηλεκτρονίων, εφαρμόστε την εξίσωση του de Broglie.

V_o = 8,668 x 10^{15} s^{-1}

$$\lambda = \frac{h}{m_e \upsilon}$$

$$\upsilon = \sqrt{\frac{2E_{\kappa\iota\nu}}{m_e}} = \sqrt{\frac{2 \times 7{,}50 \times 10^{-18}\,\mathrm{J}}{9{,}109 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg}}} \Rightarrow \upsilon = 4{,}06 \times 10^{6}\ \mathrm{m\,s^{-1}}$$

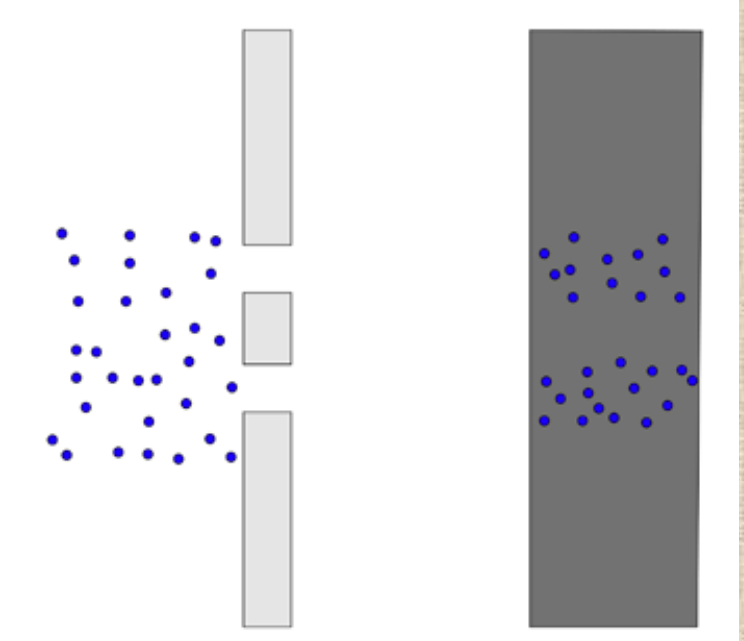
$$\lambda = \frac{h}{m_e \upsilon} \Rightarrow \lambda = \frac{6{,}626 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}}{9{,}109 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg} \times 4{,}06 \times 10^{6}\,\mathrm{m\,s^{-1}}} \Rightarrow \lambda = 1{,}79 \times 10^{-10}\,\mathrm{m} = 179\ \mathrm{pm}$$

Σωστό ή Λάθος?

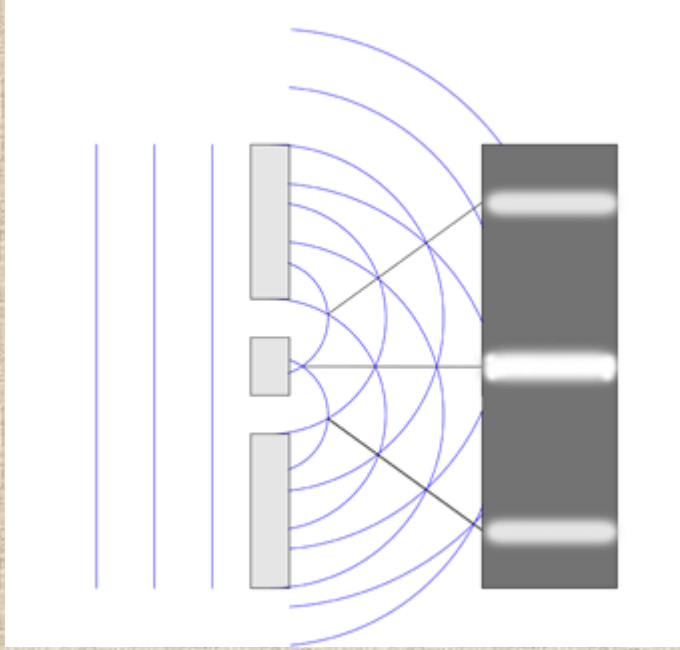
Στα ραδιοκύματα, που έχουν μεγάλο μήκος κύματος, είναι δύσκολο να αποδείξουμε το σωματιδιακό τους χαρακτήρα, ενώ στις ακτίνες Χ, που έχουν πολύ μικρό μήκος κύματος, είναι δύσκολο να αποδείξουμε τις κυματικές τους ιδιότητες;

Πείραμα των 2 σχισμών

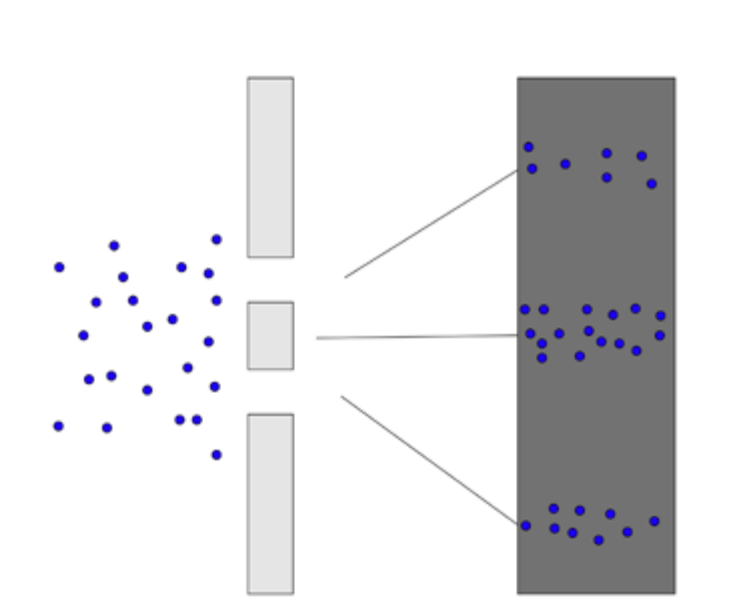
σωματίδια

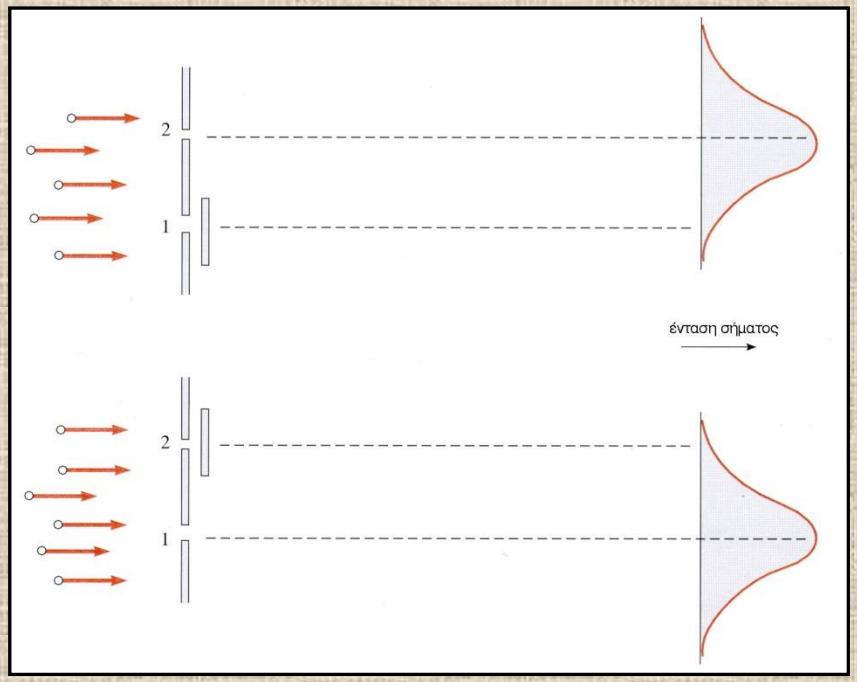


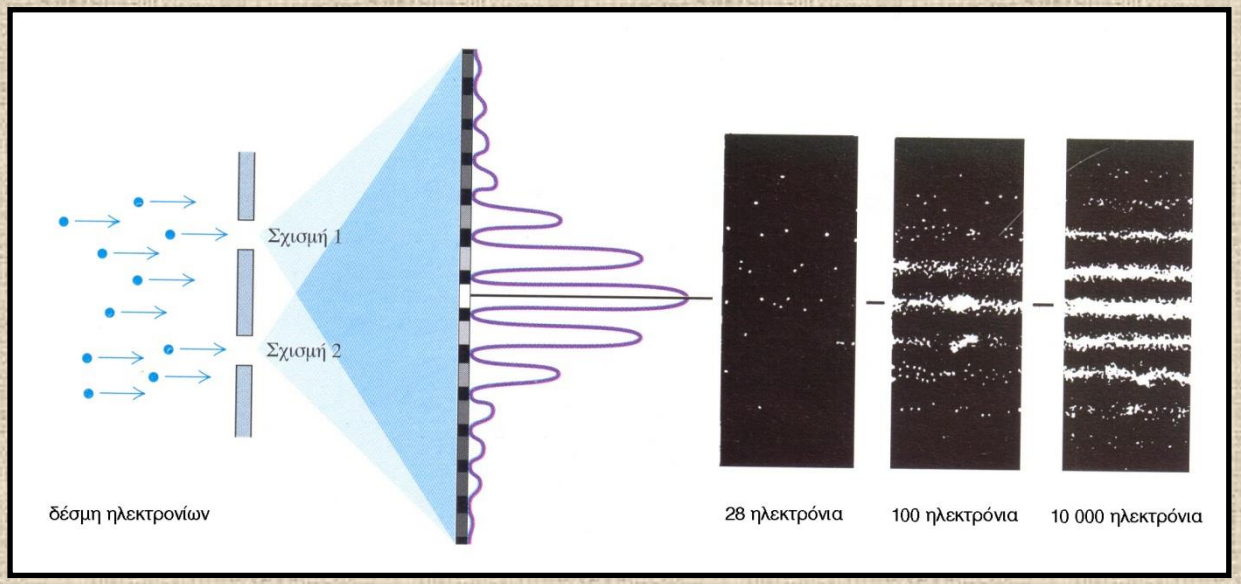
κύματα

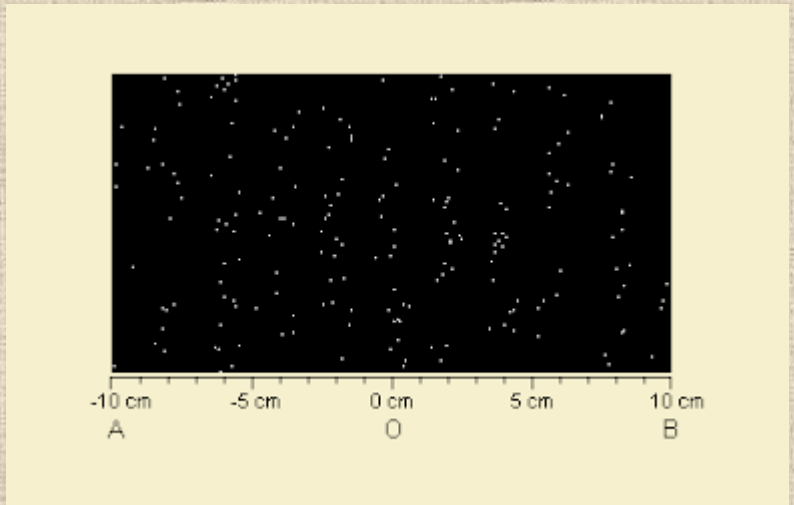


ηλεκτρόνια

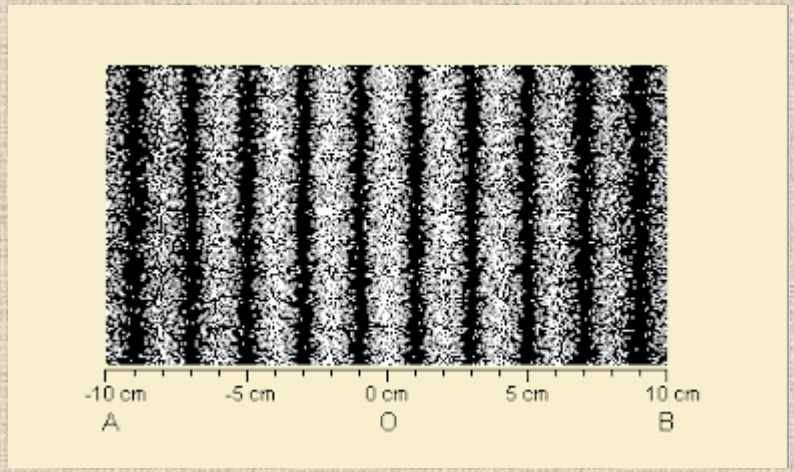



2
1
ένταση σήματος
2
1


Σχισμή 1
Σχισμή 2
δέσμη ηλεκτρονίων
28 ηλεκτρόνια
100 ηλεκτρόνια
10 000 ηλεκτρόνια

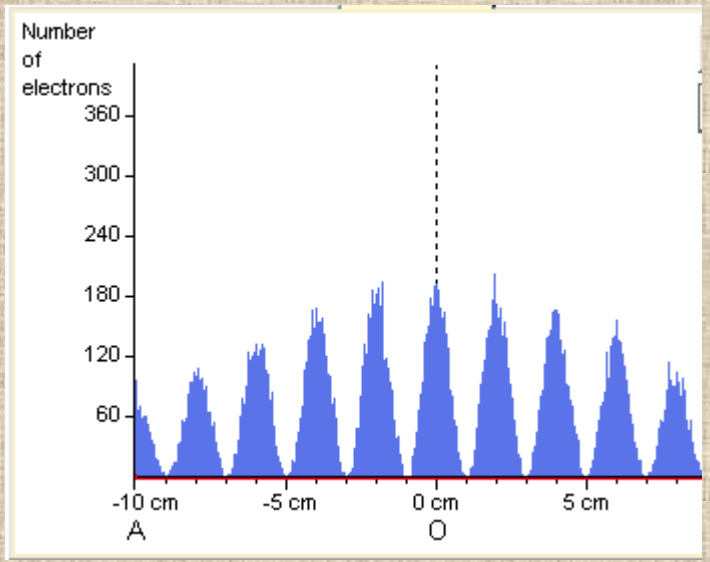


Δεν μπορούμε να προβλέψουμε με βεβαιότητα που θα πάει ένα μεμονωμένο ηλεκτρόνιο

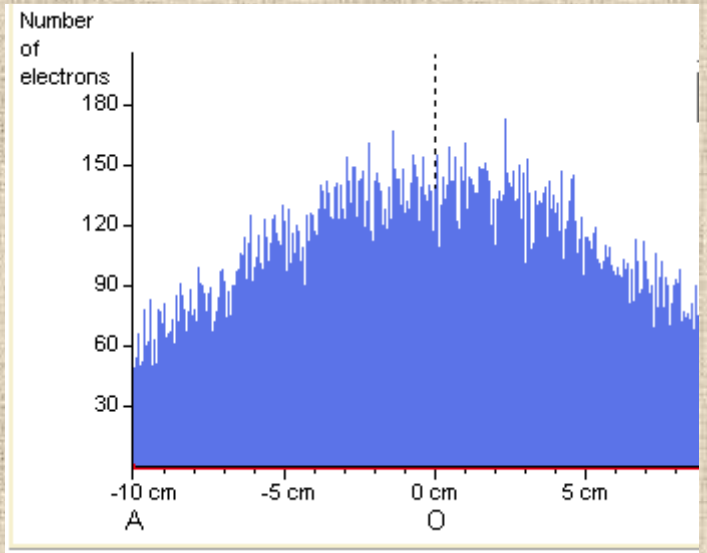


Μπορούμε να προβλέψουμε με απόλυτη ακρίβεια που θα πάει ένας μεγάλος αριθμός ηλεκτρονίων

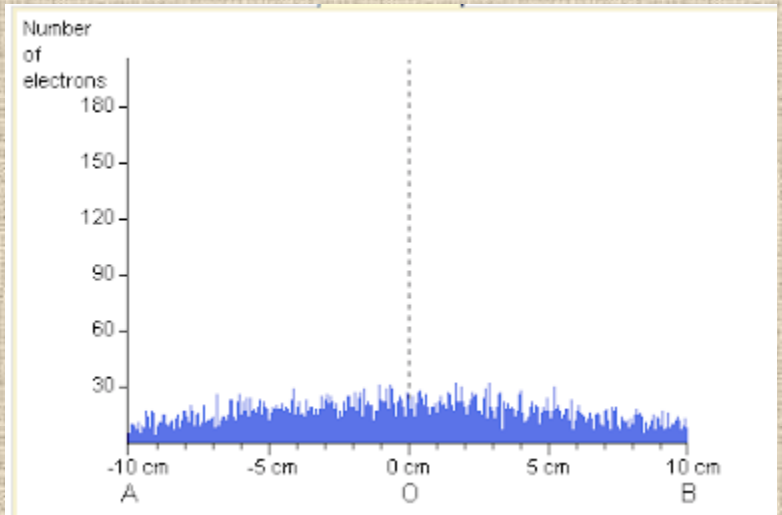
Με 2 σχισμές ανοιχτές

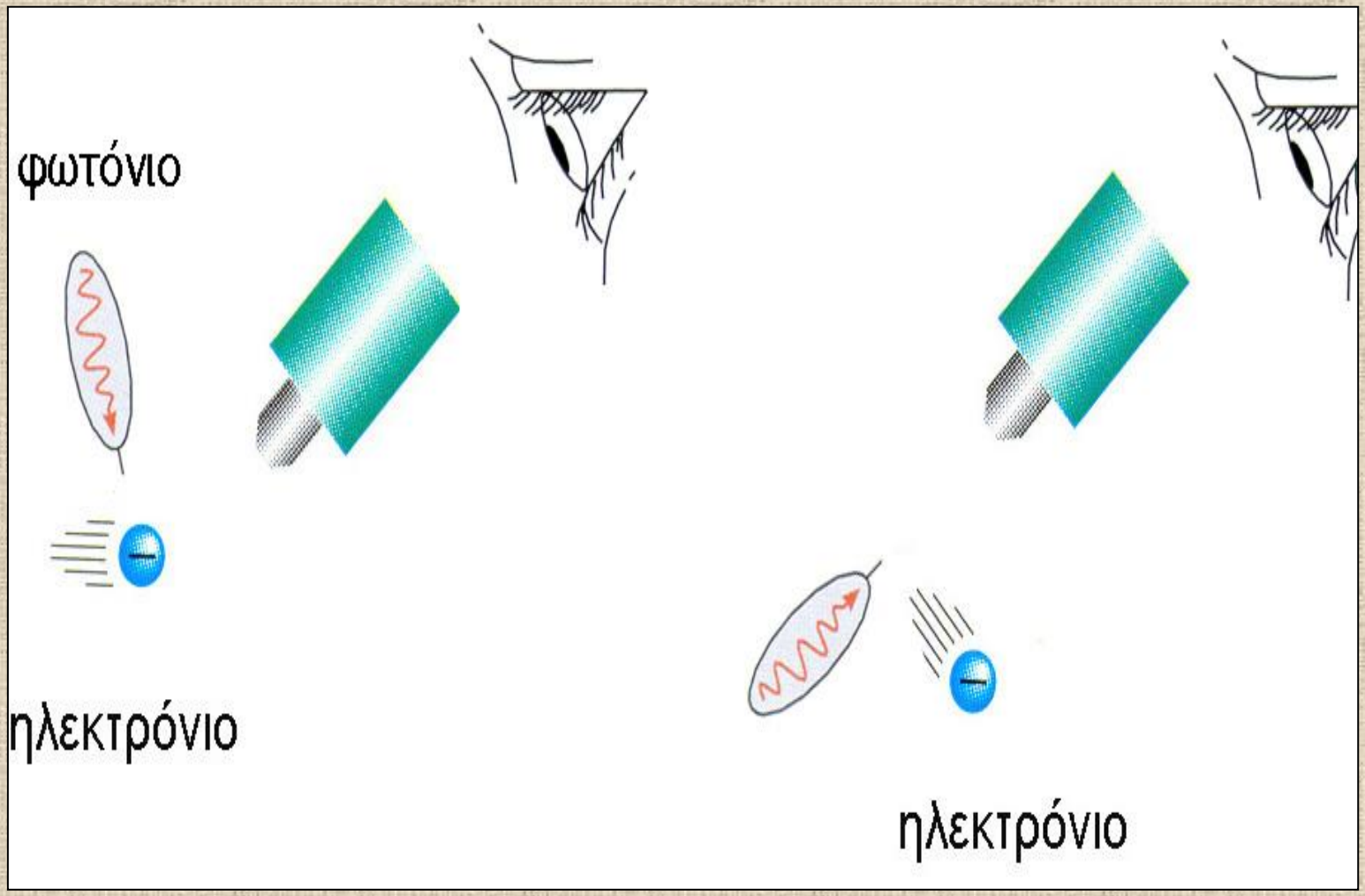


Με 1 σχισμή ανοιχτή



Με σύστημα παρατήρησης ηλεκτρονίων




φωτόνιο
ηλεκτρόνιο
ηλεκτρόνιο

Αρχή της αβεβαιότητας (απροσδιοριστίας)
Heisenberg - 1927

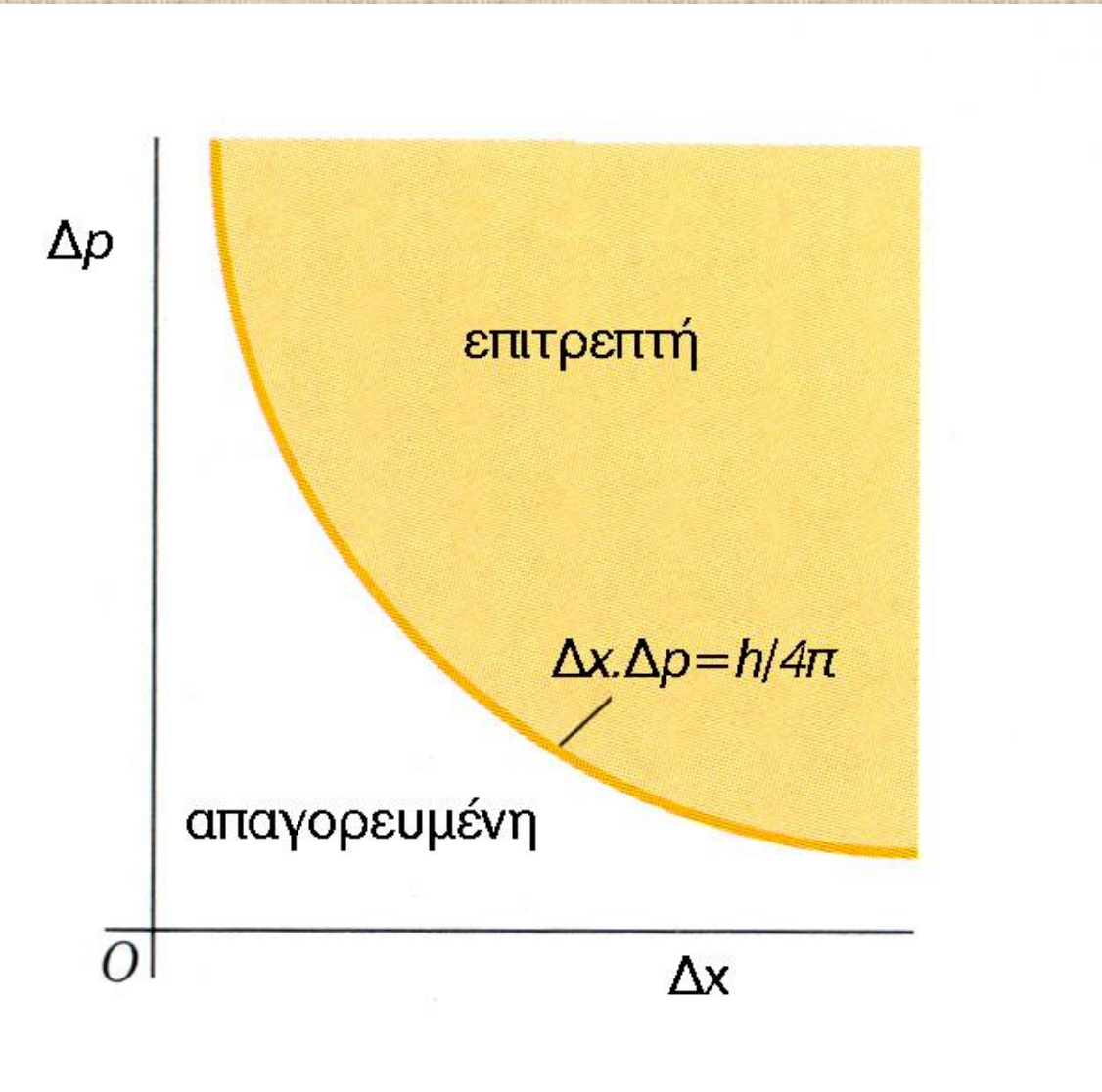
Είναι αδύνατο να προσδιορισθεί με ακρίβεια συγχρόνως η θέση και η ορμή ενός μικρού σωματιδίου, π.χ. ηλεκτρονίου.

$$\Delta x \,.\, \Delta p \geq h / 4\pi$$

Αν γνωρίζουμε με απόλυτη ακρίβεια τη θέση ενός μικρού σωματιδίου, δηλαδή Δx=0, τότε έχουμε απόλυτη άγνοια για την ορμή αυτού, δηλαδή Δp=∞.

Αν γνωρίζουμε με απόλυτη ακρίβεια την ορμή ενός μικρού σωματιδίου, δηλαδή Δp=0, τότε έχουμε απόλυτη άγνοια για τη θέση που βρίσκεται το σωματίδιο, δηλαδή Δx=∞.

Δp . Δx ≥ h / 4π



Τελικά "παίζει ζάρια ο καλός Θεός;"

→**4.6** Ποια από τα παρακάτω σημεία της θεωρίας του Bohr έρχονται σε αντίθεση προς την Αρχή της Αβεβαιότητας του Heisenberg και γιατί;

(**a**) καθορισμένες στάθμες ενέργειας

(**b**) απλές κυκλικές τροχιές

(**c**) κβαντικοί αριθμοί

(**d**) τροχιακά ηλεκτρονίων

(**e**) εκπομπή και απορρόφηση φωτονίων.

Να υπολογισθεί η αβεβαιότητα στον προσδιορισμό της ταχύτητας ενός σώματος μάζας 1g και ενός ηλεκτρονίου, όταν η αβεβαιότητα της θέσης είναι 10^{-8}cm
Τι συμπέρασμα εξάγεται από τα αποτελέσματα
(Δίδονται $h=6,63.10^{-34}$ J.s, m_e $=9,11.10^{-31}$kg)

Να υπολογισθεί η αβεβαιότητα της θέσης του ηλεκτρονίου του υδρογόνου στη θεμελιώδη κατάσταση αν η ταχύτητα του ηλεκτρονίου υπολογίζεται με ακρίβεια περίπου 1%

Μηχανική συνθήκη Bohr →

$$m \cdot u \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi}$$

Ενέργεια e στην n στιβάδα →

$$E_n = \frac{-2{,}18 \cdot 10^{-18}}{n^2} \text{ J}$$

Ενέργεια που εκπέμπεται ή απορροφάται κατά την μετακίνηση ηλεκτρονίου από την n_i στην n_f τροχιά (άτομο Η) →

$$\Delta E = \left| 2{,}18 \quad 10^{18} \left(\frac{1}{n_f^2} \quad \frac{1}{n_i^2} \right) \right|$$

Ακτίνα τροχιάς e στην στιβάδα n →

$$r = a_o \cdot n^2$$

$$\alpha_o = 0.0529 \text{ nm}$$

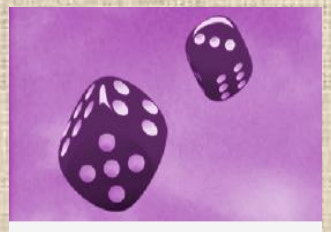
Να προσδιοριστεί το σφάλμα προσδιορισμού της θέσης ενός ηλεκτρονίου Δ*x*, αν η αβεβαιότητα προσδιορισμού της ταχύτητας Δ*u* είναι $2x10^4$ m s^{-1}. Δίνονται: σταθερά Plank $h=6.63x10^{-34}$ j.s, Μάζα ηλεκτρονίου $m=9.11x10^{-28}$ g

https://mathesis.cup.gr/

Στέφανος Τραχανάς
ΙΤΕ - Πανεπιστήμιο Κρήτης

ΦΥΣ1.1 Εισαγωγή στην Κβαντική Φυσική 1: Οι βασικές αρχές (Ε)

Έναρξη: 2/10/2017



Στέφανος Τραχανάς
ΙΤΕ - Πανεπιστήμιο Κρήτης

ΦΥΣ1.2 Εισαγωγή στην Κβαντική Φυσική 2: Οι βασικές εφαρμογές (Ε)

Έναρξη: 13/11/2017

Στέφανος Τραχανάς
ΙΤΕ - Πανεπιστήμιο Κρήτης

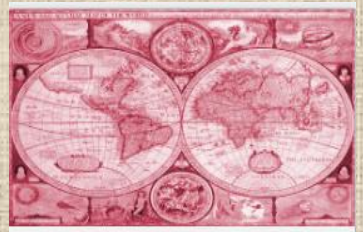
ΦΥΣ3.1 Εφαρμοσμένη Κβαντομηχανική 1: Άτομα (Ε)

Αυτομελέτη

Στέφανος Τραχανάς
ΙΤΕ - Πανεπιστήμιο Κρήτης

ΦΥΣ3.2 Εφαρμοσμένη Κβαντομηχανική 2: Μόρια (Ε)

Αυτομελέτη



Μαρία Ευθυμίου
Πανεπιστήμιο Αθηνών

ΙΣΤ3.1 Παγκόσμια Ιστορία 1: Ο άνθρωπος απέναντι στη φύση

Αυτομελέτη

Μαρία Ευθυμίου
Πανεπιστήμιο Αθηνών

ΙΣΤ3.2 Παγκόσμια Ιστορία 2: Ο άνθρωπος απέναντι στο Θείο

Αυτομελέτη

Μαρία Ευθυμίου
Πανεπιστήμιο Αθηνών

ΙΣΤ3.3 Παγκόσμια Ιστορία 3: Ο άνθρωπος απέναντι στον εαυτό του - Μέρος Α΄ (Νέο)

Έναρξη: 13/11/2017

Κυματική εξίσωση του Schrödinger (1926)

$$H\,\Psi = E\,\Psi$$

H: τελεστής Hamilton (Hamiltonian operator)

εκτέλεση μαθηματικών πράξεων επί της κυματοσυνάρτησης *Ψ*.

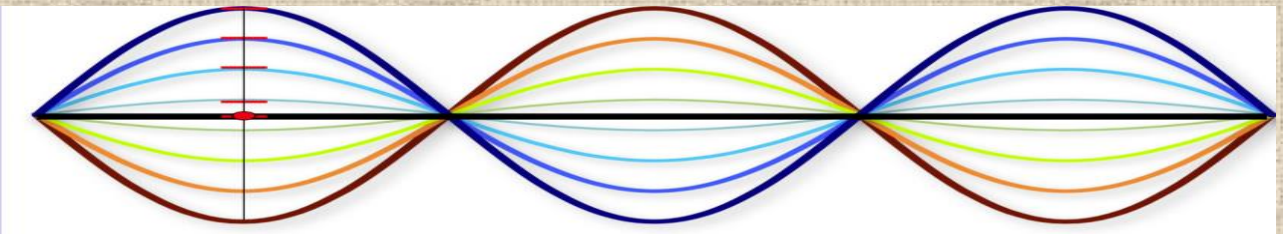
E: ολική ενέργεια των ηλεκτρονίων

δυναμική ενέργεια + κινητική ενέργεια ηλεκτρονίου (μετρήσιμη ιδιότητα του συστήματος)

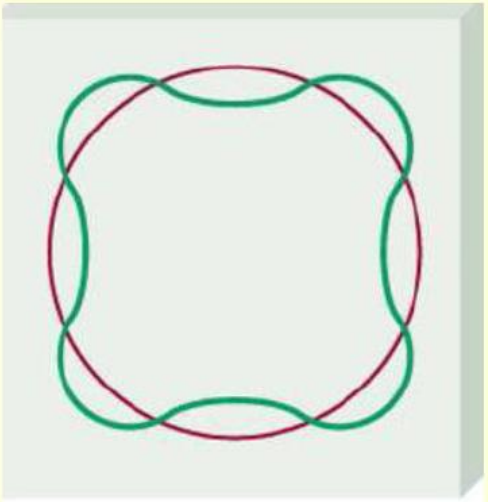
$$\Psi = f(x, y, z, t)$$

Στάσιμα κύματα

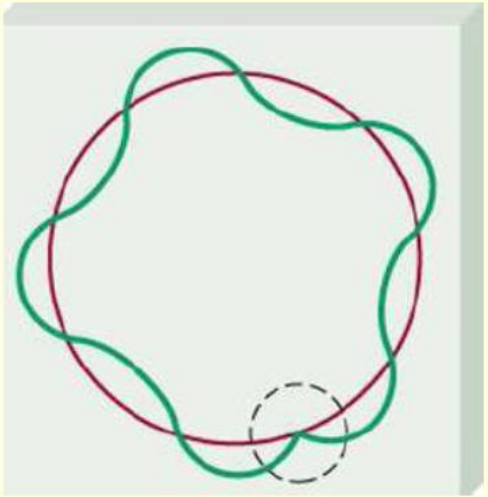
ευθύγραμμη τροχιά



κυκλική τροχιά



στάσιμο κύμα



μη στάσιμο κύμα

Η περιφέρεια της τροχιάς του ηλεκτρονίου πρέπει να είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του μήκους κύματος του ηλεκτρονίου

$$2\pi r = n\lambda$$

$$\left[\frac{-h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)+V\right]\Psi = E\Psi$$

$$H = \frac{-h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$$

κινητική ενέργεια e

δυναμική ενέργεια e

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2 m\,Eκ}{h^2}\Psi = 0$$

***x, y, z:** καρτεσιανές συντεταγμένες*

***h:** σταθερά του Planck.*

***m:** μάζα του ηλεκτρονίου*

***e:** το φορτίο του ηλεκτρονίου.*

***E:** ολική ενέργεια του ηλεκτρονίου.*

***r:** η απόσταση ηλεκτρονίου-πυρήνα.*

***Z:** το φορτίο του πυρήνα (στο άτομο του υδρογόνου Z=1).*

***ε_0:** διηλεκτρική σταθερά του κενού.*

Η κυματική εξίσωση του Schrödinger:

- **προκύπτει από την εμπειρική επιλογή της εξίσωσης του στάσιμου κύματος για την περιγραφή της κίνησης του ηλεκτρονίου**
- **η ισχύς της εξίσωσης επαληθεύεται από πειραματικά δεδομένα**
- **είναι μια εξίσωση κύματος στην οποία περιλαμβάνεται η μάζα**
- **είναι ανεξάρτητη του χρόνου. Τα δέσμια ηλεκτρόνια βρίσκονται σε στάσιμη κατάσταση ανεξάρτητη του χρόνου.**
- **στην εξίσωση γνωστά μεγέθη είναι η μάζα *m* και η δυναμική ενέργεια *V*, ενώ τα άγνωστα είναι η κυματική συνάρτηση *Ψ* και η ολική ενέργεια *E*.**
- **η δυναμική ενέργεια *V* είναι συνάρτηση της θέσης, επομένως η εξίσωση πρέπει να επιλυθεί ξεχωριστά σε διάφορες περιοχές του χώρου.**

Οι αποδεκτές λύσεις της εξίσωσης ονομάζονται *κυματικές συναρτήσεις* ή *ατομικά τροχιακά.*

Η συνάρτηση Ψ μπορεί να λάβει θετικές, αρνητικές, μηδέν, φανταστικές ή μιγαδικές τιμές.

ποια η φυσική σημασία της Ψ ;

$\Psi = 0$ ⟶ απουσία e

$\Psi \neq 0$ ⟶ πιθανή παρουσία e

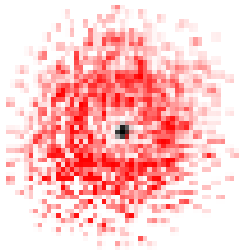
$|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$:

- **σχετίζεται με την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε κάποιο σημείο του χώρου γύρω από τον πυρήνα (με συντεταγμένες *x, y, z*), σε δεδομένη χρονική στιγμή.**
- **εκφράζει την πιθανότητα ανά μονάδα όγκου και έχει μονάδες vol^{-1}.**

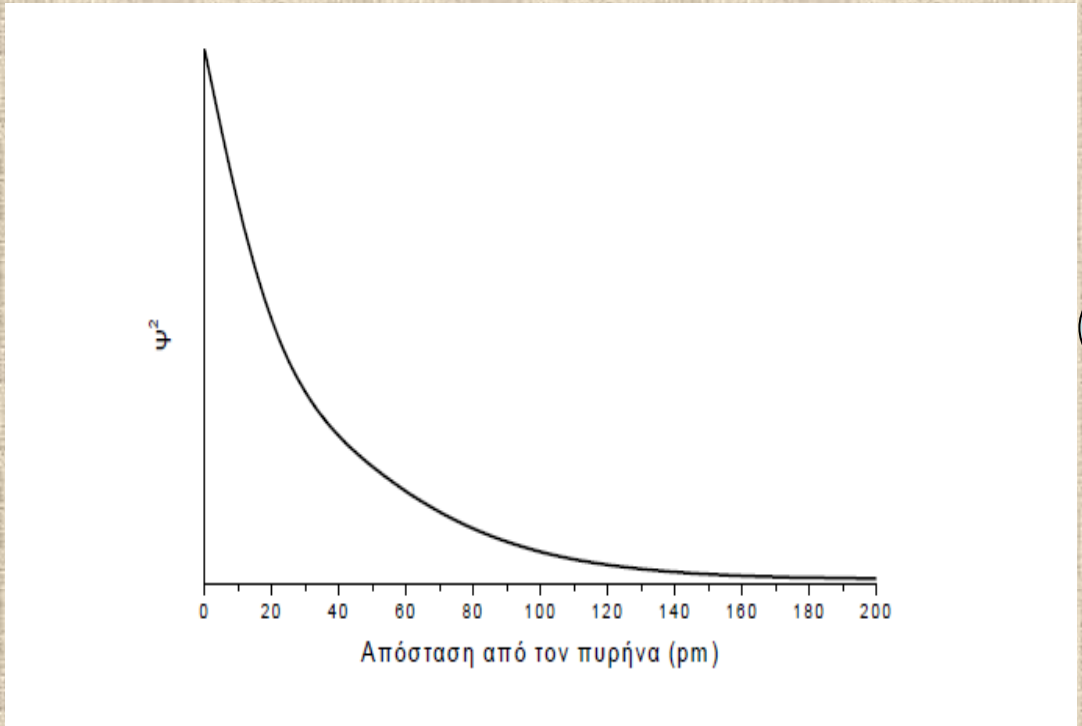
$|\Psi|^2 \cdot dV$:

- **καθορίζει τον *αριθμό κατοχής* (*occupation number*), του ηλεκτρονίου στο στοιχειώδη όγκο d*V* γύρω από τον πυρήνα.**
- **ανάλογο με την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σ' ένα στοιχειώδη χώρο d*V*.**

ηλεκτρονιακό νέφος: μια τρισδιάστατη "κηλίδα ηλεκτρονίων

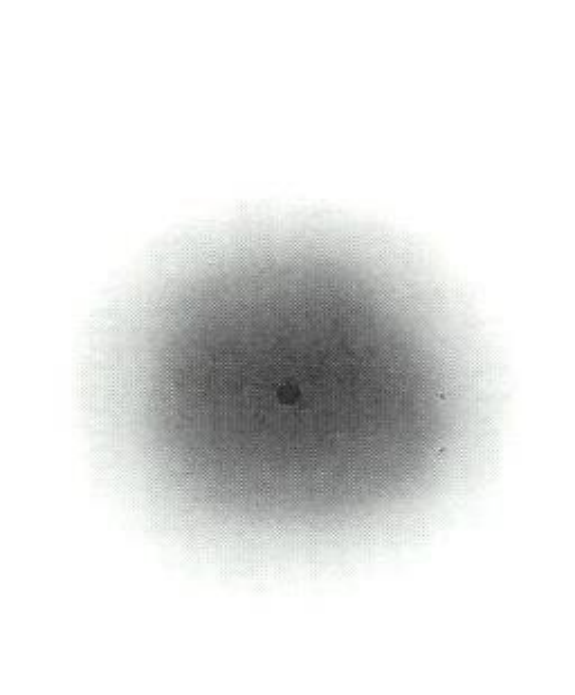


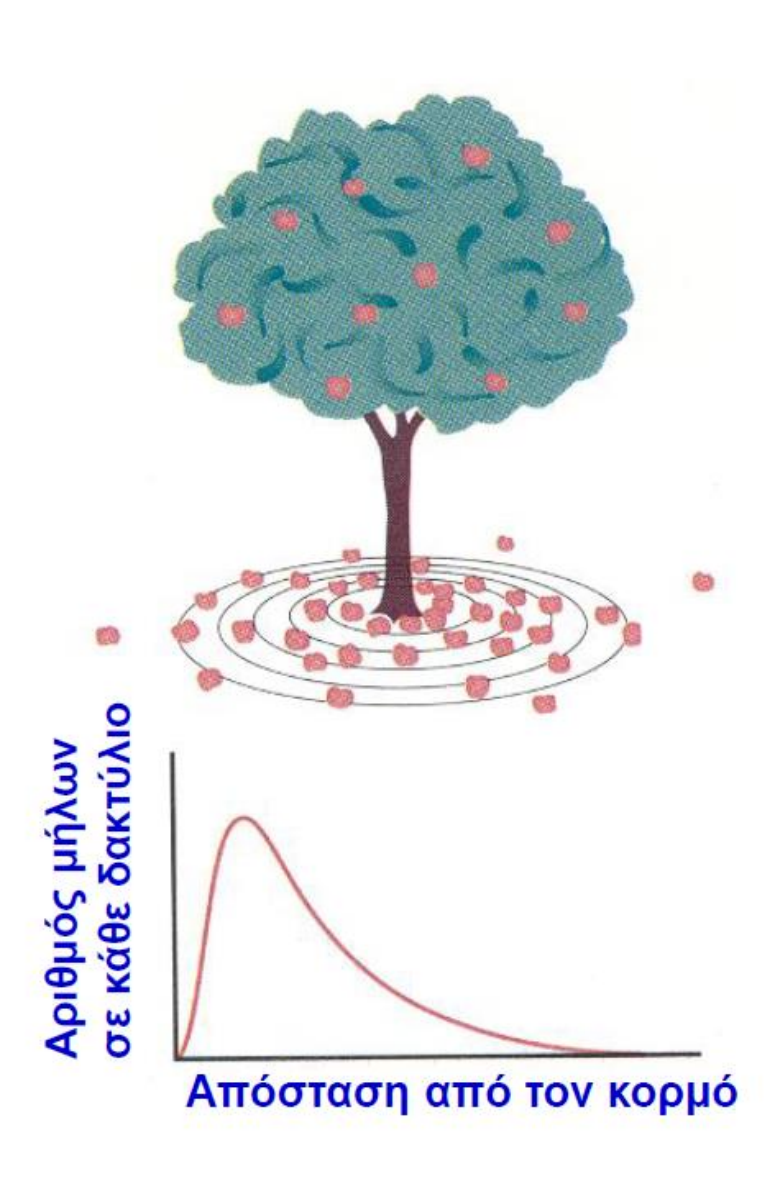
$-e|\Psi|^2$: ***πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους***



Η ηλεκτρονική πυκνότητα είναι μέγιστη στον πυρήνα

Το ηλεκτρονικό νέφος είναι πυκνότερο κοντά στον πυρήνα





το ηλεκτρονικό νέφος μπορεί να είναι πυκνότερο στον πυρήνα, όμως το μεγαλύτερο μέρος του νέφους βρίσκεται σε κάποια απόσταση από αυτόν.

Ποια από τα παρακάτω είναι υδρογονοειδή; $_1H^+$, $_2He^-$, $_2He^+$, $_3Li^+$, $_3Li^{2+}$

Η κυματοσυνάρτηση Ψ για το άτομο του υδρογόνου έχει τις τιμές Ψ=0.1 στο σημείο Α και Ψ=-0.3 στο Β. Που υπάρχει μεγαλύτερη πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο;

Σε μια περιοχή γύρω από ένα σημείο Α η πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους είναι μεγαλύτερη από αυτή που είναι γύρω από ένα σημείο Β. Τι σημαίνει αυτό;

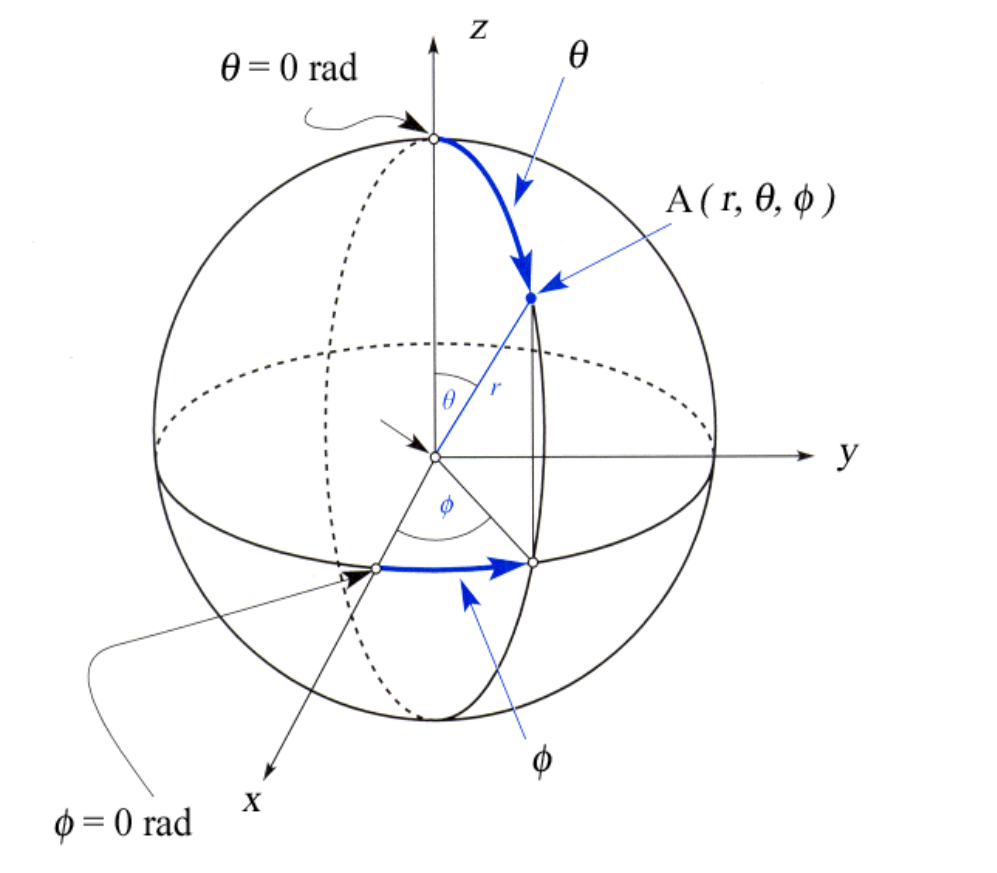
Α. Στην περιοχή Β κινούνται λιγότερα ηλεκτρόνια από ότι στην περιοχή Α.

Β. Τα ηλεκτρόνια ξοδεύουν λιγότερο χρόνο στην περιοχή Β.

Γ. Το σημείο Β βρίσκεται πιο μακριά από τον πυρήνα του ατόμου.

Δ. Η τιμή της κυματοσυνάρτησης Ψ στο σημείο Α είναι μεγαλύτερη από ότι η αντίστοιχη τιμή στο σημείο Α.

Εξίσωση Schrödinger σε πολικές συντεταγμένες



A: πολικό σημείο

r: η απόσταση του από την αρχή των αξόνων

r: πολική ακτίνα

θ: ζενιθιακή γωνία

φ: αζιμουθιακή γωνία

$$x = r \cdot ημθ \cdot συνφ$$

$$y = r \cdot ημθ \cdot ημφ$$

$$z = r \cdot συνθ$$

Στο πολικό σύστημα συντεταγμένων η εξίσωση Schrödinger παίρνει την μορφή:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2 m\,Eκ}{h^2}\Psi=0$$

$$\Downarrow$$

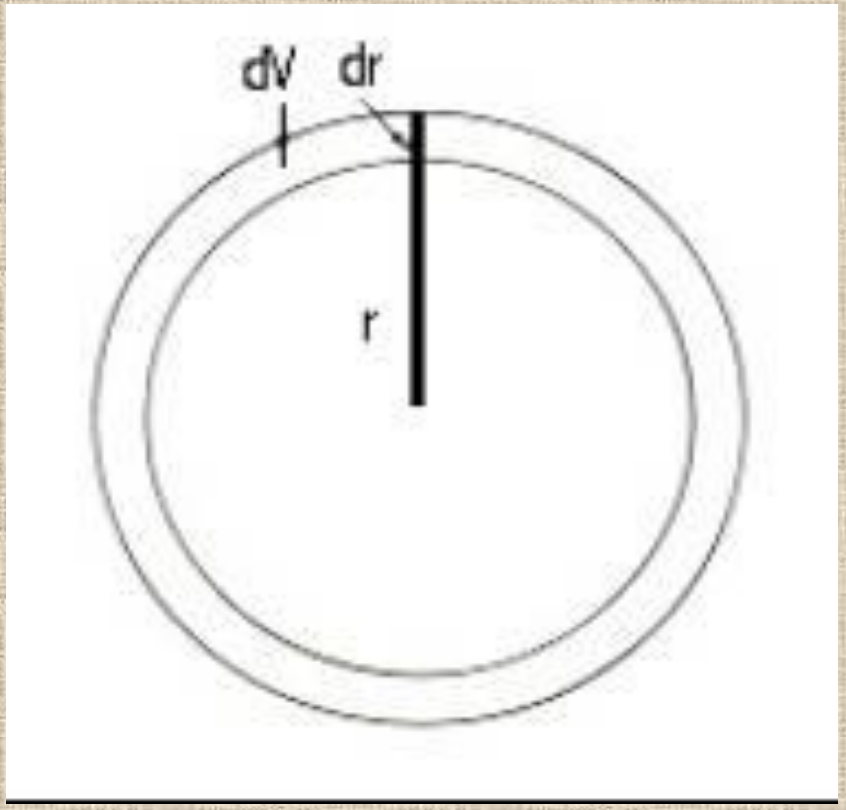
$$\underbrace{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)}_{R(r)}+\underbrace{\frac{1}{r^2\eta\mu\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\eta\mu\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right)}_{\Theta(\theta)}+\underbrace{\frac{1}{r^2\eta\mu^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}}_{\Phi(\varphi)}+\frac{8\pi^2 m\,Eκ}{h^2}\Psi=0$$

Η γραφική παράσταση $\Psi(r,\theta, \varphi)$ προϋποθέτει τετραδιάστατο γράφημα. Για να παρακάμψουμε το πρόβλημα μπορούμε να δώσουμε δύο γραφικές παραστάσεις:

- τη γραφική παράσταση της ακτινικής συνάρτησης $R(r)$ σε σχέση με την απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα. Το διάγραμμα αυτό συσχετίζεται με το **μέγεθος** του τροχιακού.
- τη γραφική παράσταση της γωνιακής συνάρτησης $A(\theta,\varphi)$ σε σχέση με τις σφαιρικές γωνιακές συντεταγμένες θ, φ. Το διάγραμμα αυτό συσχετίζεται με το **σχήμα** του τροχιακού.

Η γραφική παράσταση των ηλεκτρονιακών νεφών (συναρτήσεων πυκνότητας πιθανότητας) $|\Psi|^2$ περιλαμβάνει:

- τη γραφική παράσταση του $R^2(r)$ προς r
- τη γραφική παράσταση της συνάρτησης $A^2(\theta, \varphi)$ προς θ-φ

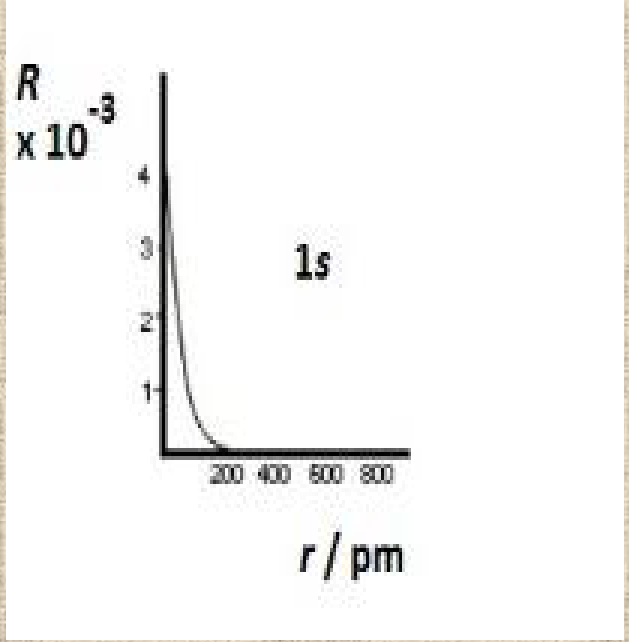
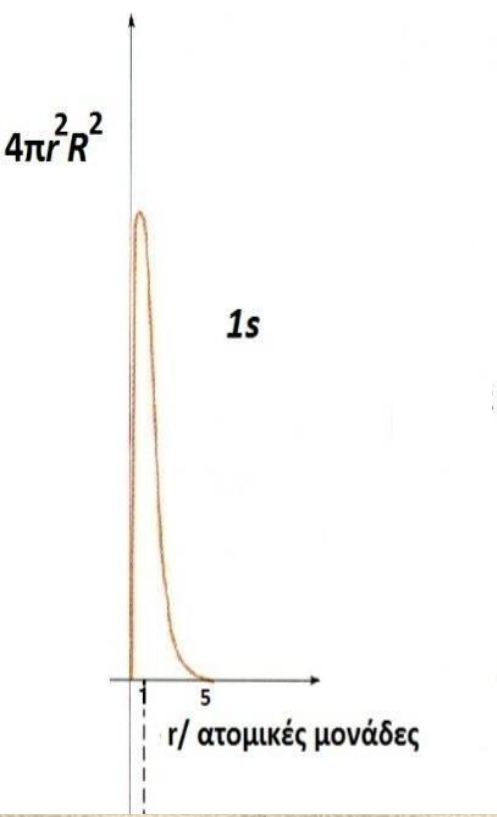
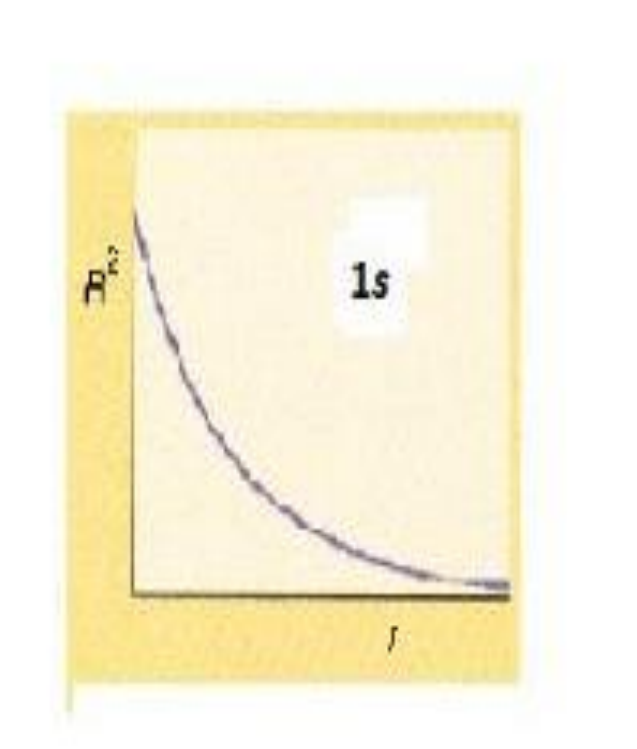


Ένας πιο συνηθισμένος τρόπος εξέτασης της κατανομής του ηλεκτρονιακού νέφους είναι να θεωρήσουμε ότι το άτομο συγκροτείται από «φλοιούς», όπως είναι το κρεμμύδι.

Η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στο φλοιό όγκου d*V* εσωτερικής ακτίνας *r* και εξωτερικής ακτίνας *r*+d*r* είναι:

$$\mathbf{R^2 dV = R^2 d(4\pi r^3/3) = R^2 4\pi r^2 dr}$$

Ο όγκος φλοιού πάχους dr είναι:

$$dV = d(4\pi r^3/3) = 4\pi r^2 dr$$

Γραφική παράσταση των ακτινικών συναρτήσεων R(r), $R^2(r)$ και της συνάρτησης ακτινικής πιθανότητας $4\pi r^2R^2$ για τροχιακό 1s