Κέρκυρα

Εισαγωγή στην κβαντομηχανική

2022

Στο σημείωμα αυτό περιλαμβάνεται μία ιστορική αναδρομή χωρισμένη σε περιόδους, μία πρόταση σχετική με την εξαγωγή της εξίσωσης Schrodinger, και κάποιες εφαρμογές της εξίσωσης. Παρουσιάζεται επίσης η αρχή της αβεβαιότητας καθώς και το φαινόμενο της διπλής σχισμής. Τέλος προτείνονται ορισμένα πειράματα σχετικά με το θέμα.

Μουρούζης Π

Στοιχεία Κβαντομηχανικής

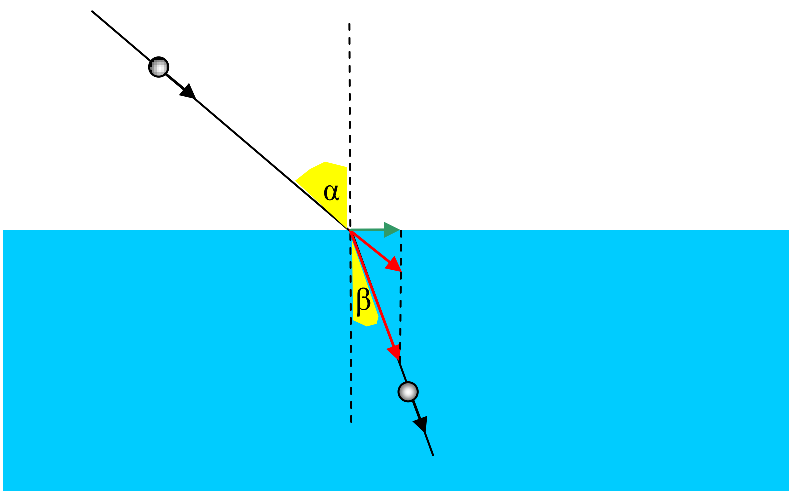
1. Η εποχή του Νεύτωνα (1670-1820)
Η επικράτηση της σωματιδιακής θεωρίας του φωτός

Όλα ξεκίνησαν από τη προσπάθεια ερμηνείας της φύσης του φωτός. Το 1665 μ.χ ο Νεύτωνας (Isaac Newton) παραμένοντας στο σπίτι του για δύο χρόνια λόγω κάποιας επιδημίας μελετάει εκτός των άλλων τη φύση του φωτός και με τη βοήθεια ενός πρίσματος ανακαλύπτει ότι το λευκό φως αποτελείται από όλα τα χρώματα. Στην συνέχεια διατυπώνει τη σωματιδιακή θεωρία του φωτός, θεωρώντας ότι το φως αποτελείται από μικρά ελαστικά σωματίδια.

Με τη θεωρία αυτή ερμηνεύει τα φαινόμενα της ανάκλασης και της διάθλασης ερχόμενος σε ρήξη με το σύγχρονο του Χόιχενς (Christian Huygens) ο οποίος θεωρεί ότι το φως είναι κύμα με χαρακτηριστικά όπως πχ τα κύματα της θάλασσας.

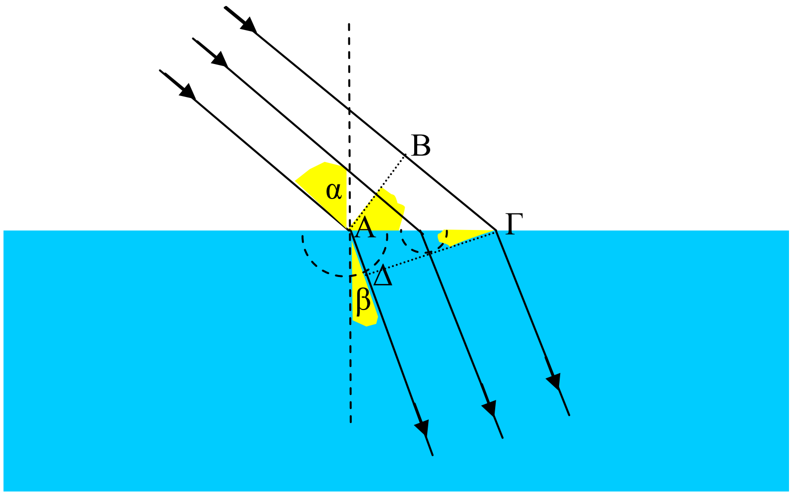
Τότε συνέβη και κάτι μοναδικό στην ιστορία της φυσικής επιστήμης. Οι δύο αντιμαχόμενες θεωρίες για το φως, η σωματιδιακή του Νεύτωνα και η κυματική του Χόιχενς καταλήγανε στον ίδιο σωστό τύπο του Σνελ (Snell) σχετικά με τη διάθλαση του φωτός.

Με τη θεωρία του Νεύτωνα το φως αποτελείται από μικρά ελαστικά σωματίδια. Όταν αλλάζει μέσο, τότε κατά μήκος της επιφάνειας των δύο μέσων δεν ασκούνται δυνάμεις στα σωματίδια, άρα ισχύει η Αρχή Διατήρησης της Ορμής στον άξονα x . Επομένως:



$$p_1 ημα = p_2 ημβ \rightarrow \frac{ημα}{ημβ} = \frac{mu_2}{mu_1} \rightarrow \frac{ημα}{ημβ} = \frac{u_2}{u_1} = σταθερό \qquad (1)$$

Η κυματική θεωρία του Χόιχενς έλεγε ότι σε κάθε σημείο που πέφτει το κύμα, το σημείο γίνεται δευτερογενής πηγή κυμάτων. Το νέο μέτωπο κύματος δημιουργείται από την κοινή εφαπτομένη όλων των δευτερογενών κυμάτων.



Ο χρόνο που θα κάνει το κύμα να διανύσει την απόσταση ΒΓ στο μέσον (1) είναι ίσος με τον χρόνο που θα κάνει το κύμα να διανύσει την απόσταση ΑΔ στο μέσο (2). Έτσι θα έχουμε:

$$t_{\mathrm{B\Gamma}} = t_{\mathrm{A\Delta}} \rightarrow \frac{\mathrm{B\Gamma}}{u_1} = \frac{\mathrm{A\Delta}}{u_2} \rightarrow \frac{(\mathrm{A\Gamma})\eta\mu\alpha}{u_1} = \frac{(\mathrm{A\Gamma})\eta\mu\beta}{u_2} \rightarrow \frac{\eta\mu\alpha}{\eta\mu\beta} = \frac{u_1}{u_2} = \sigma\tau\alpha\theta\varepsilon\rho\acute{o} \qquad (2)$$

Παραδόξως και οι δύο θεωρήσεις καταλήγουν στο ότι το πηλίκο των ημιτόνων είναι σταθερό (νόμος Σνέλ), με την εξής όμως διαφορά. Η σωματιδιακή θεώρηση προέβλεπε ότι το φως κινείται πιο γρήγορα σε ένα διαφανές μέσο, όπως πχ στο γυαλί ή στο νερό από ότι στον αέρα! Μέχρι όμως περίπου το 1820, δεν είχε γίνει κατορθωτή η μέτρηση της ταχύτητας του φωτός μέσα σε διαφανή μέσα.

2. Η επικράτηση της κυματικής θεωρίας του φωτός (1820-1870)
Η ολοκλήρωση του κλασσικού οικοδομήματος

Λόγω της μεγάλης αναγνώρισης του Νεύτωνα τόσο από τους σύγχρονούς του, όσο και από τους μετέπειτα φυσικούς, η σωματιδιακή άποψη του για τη φύση του φως θα επικρατήσει για πολλά χρόνια έως το 1820. Τότε ο Γιάνγκ (Thomas Young) με το περίφημο πείραμα της διπλής σχισμής ανατρέπει περίτρανα την σωματιδιακή θεωρία και αναδεικνύει την ορθότητα την κυματικής φύσης του φωτός.

Πείραμα 1^{o}
http://dide.ker.sch.gr/ekfe/epiloges/3_prot_peiramata/16_metrisi_mhkous_kymatos.htm
Το βίντεο του πειράματος https://www.youtube.com/watch?v=SIX9KTyiyXU

Η άποψη ότι το φως είναι κύμα ενισχύεται από τα πειράματα του Φιζώ (Hippolyte Fizeau) και λίγο αργότερα του Φουκώ (Jean Bernard Léon Foucault) οι οποίοι μέτρησαν την ταχύτητα του φωτός σε διαφανή μέσα. Τα πειράματα αυτά απέδειξαν ότι το φως τρέχει πιο αργά στα διαφανή μέσα από ότι στον αέρα, ένα γεγονός που έρχεται σε αντίθεση με τη σωματιδιακή θεωρία. Η ολοκληρωτική επικράτηση της κυματικής φύσης του φωτός γίνεται με τη διατύπωση των τεσσάρων εξισώσεων του Μάξγουελ (Maxwell, 1875) όπου αναδεικνύεται ότι το φως είναι ηλεκτρομαγνητικό κύμα. Ταυτόχρονα ενοποιούνται τα οπτικά και τα ηλεκτρομαγνητικά φαινόμενα. Το οικοδόμημα της κλασσικής φυσικής έχει ολοκληρωθεί. Τα μηχανικά φαινόμενα και τα φαινόμενα βαρύτητας ερμηνεύονται από τη μηχανική του Νεύτωνα. Τα οπτικά και ηλεκτρομαγνητικά φαινόμενα ερμηνεύονται από τη θεωρία του Μάξγουελ.

Πείραμα 2^o

https://blogs.sch.gr/mourouzis/files/2022/04/63_measuring_speed_of_light.pdf

3. Τα πρώτα ρήγματα του κλασσικού οικοδομήματος (1870-1900)

- Κατά τα τέλη του 18ου αιώνα και στις αρχές του 19^{ου} ο Νεύτωνας παίρνει την εκδίκησή του. Πρώτος ο Κίρκοφ (Gustav Robert Kirchhoff) μελετάει τα φάσματα στερεών υγρών και αερίων και διατυπώνει τους πρώτους νόμους των φασμάτων, νόμοι όμως που δεν μπορούσαν να ερμηνευτούν με την κυματική θεωρία.
- Ο Μπόλτσμαν (Boltzmann) και ο Βιέν (Wien) διατυπώνουν τους νόμους ακτινοβολίας του μέλανος σώματος. Η κατανομή ακτινοβολίας του μέλανος σώματος δεν μπορεί να ερμηνευτεί από την κλασσική ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία.
- Στις αρχές του 20 αιώνα δύο ακόμη φαινόμενα, το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο και το φαινόμενο Κόμπτον (Compton), δεν μπορούν να ερμηνεύουν με την κυματική θεωρία. Αυτά τα φαινόμενα μπορούν να ερμηνευτούν αν επιστρέψουμε στην παλιά ξεχασμένη σωματιδιακή θεωρία.
- Έτσι δημιουργείται η εξής τραγελαφική κατάσταση. Κάποια φαινόμενα του φωτός ερμηνεύονται με την κυματική θεωρία και κάποια άλλα με τη σωματιδιακή.

Κίρκωφ - Φασματική ανάλυση

Ο Κίρχωφ μελετώντας τα φάσματα διαφόρων φωτεινών πηγών διαπίστωσε τους εξής νόμους.

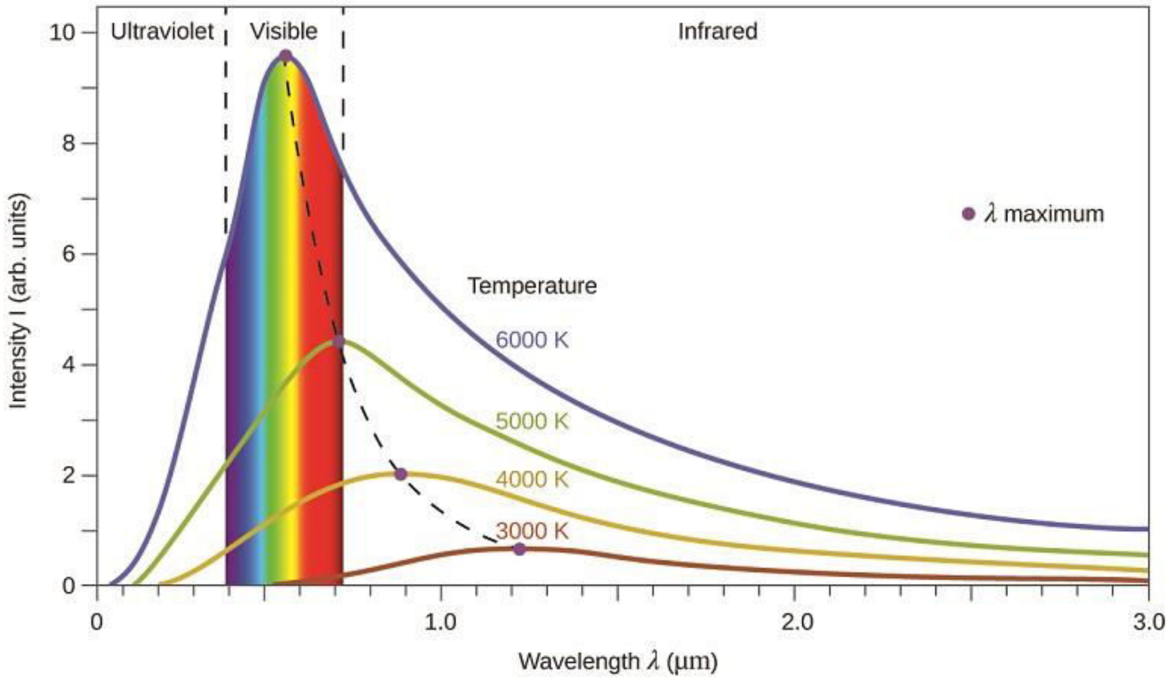
1. Τα φάσματα εκπομπής των στερεών και των υγρών είναι συνεχή, ενώ των αερίων που βρίσκονται σε χαμηλή πυκνότητα και διεγείρονται σε ακτινοβολία από κάποια υψηλή τάση είναι γραμμικά
2. Ότι συχνότητες εκπέμπει ένα αέριο, τις ίδιες ακριβώς και απορροφάει όταν μέσα από αυτό περάσει λευκό φως.
3. Οι φασματικές γραμμές των αερίων είναι χαρακτηριστικές και μοναδικές για το κάθε αέριο
4. Το φάσμα εκπομπής ενός μαύρου σώματος (ενός σώματος που απορροφάει όλες τις συχνότητες) είναι ανεξάρτητο του όγκου και της φύσης του σώματος. Εξαρτάται αποκλειστικά από τη θερμοκρασία του σώματος. Αυτή η παρατήρηση είχε γίνει αρκετά χρόνια πριν από τον Κίρχωφ στα διάφορα καμίνια που λιώνανε μέταλλα ή γυαλί. Ένα καμίνι που αποτελείται ουσιαστικά από μία κοιλότητα με μία τρύπα είναι μία πολύ καλή προσέγγιση ενός μαύρου – μέλανος σώματος.

Πείραμα 3^o

http://blogs.sch.gr/mourouzis/files/2022/05/f_e_fasmatiki_analisi.pdf

Πλανκ (Planck) - Η ακτινοβολία του μέλανος σώματος

Η βασική περιγραφή της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος γίνεται από τη γραφική παράσταση της ισχύος που εκπέμπει το σώμα ανά μονάδα επιφάνειας και ανά μονάδα μήκους κύματος σε συνάρτηση με το μήκος κύματος. Η γραφική παράσταση αυτής της συνάρτησης είναι η παρακάτω.



Από τις παραπάνω γραφικές παραστάσεις παρατηρούμε ότι όταν η θερμοκρασία του μέλανος σώματος αυξάνεται, αυξάνεται και η συχνότητα για την οποία έχουμε τη μέγιστη ακτινοβολία. Αυτός είναι ο νόμος του Βιέν (Wien)

$$\lambda_{max}T=σταθ \qquad (3)$$

Το εμβαδόν που περικλείεται από την κάθε γραφική παράσταση παριστάνει την ολική ισχύ που εκπέμπεται από το σώμα ανά μονάδα επιφάνειας. Φαίνεται ξεκάθαρα από τις γραφικές παραστάσεις ότι όσο αυξάνεται η θερμοκρασία αυξάνεται και η ισχύς. Πιο συγκεκριμένα ισχύει ο νόμος των Στέφαν –Μπόλτζμαν (Stefan-Boltzman)

$$I=σταθ\cdot T^4 \qquad (4)$$

Οι παραπάνω καμπύλες δεν ήταν δυνατό να ερμηνευτούν στα πλαίσια της κλασσικής θεωρίας. Η κλασσική θεωρία προέβλεπε ότι για μικρά μήκη κύματος η καμπύλη απειρίζεται! σε αντίθεση με τα πειραματικά αποτελέσματα που έδειχναν μηδενισμό. Η ερμηνεία της κλασσικής φυσικής για το φαινόμενο βασιζόταν στη δημιουργία στάσιμων ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων μέσα στην κοιλότητα. Όταν έχουμε πολύ μικρά μήκη κύματος, τότε σε δεδομένο μήκος μπορούν να δημιουργηθούν πολλές στάσιμες καταστάσεις. Επειδή η κάθε στάσιμη κατάσταση περιέχει το ίδιο ποσό ενέργειας σύμφωνα με το θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας, η ισχύς της πηγής θα πρέπει ν' αυξάνεται όσο μικραίνουν τα μήκη κύματος. Όταν τα μήκη κύματος τείνουν στο μηδέν, τότε η ισχύς της πηγής θα πρέπει ν' απειρίζεται!

Το πρόβλημα το έλυσε ο Πλανκ ο οποίος παρατήρησε ότι η κάθε καμπύλη από τις παραπάνω μοιάζει με την καμπύλη κατανομής ταχυτήτων των μορίων ενός αερίου που θεωρητικά είχε προτείνει ο Μπόλτζμαν. Βέβαια μέσα στην κοιλότητα δεν υπάρχουν μόρια αλλά ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία. Αν θεωρήσουμε ότι η ενέργεια της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας μεταφέρεται υπό μορφή πακέτων και κάθε πακέτο μεταφέρει ενέργεια E=hf (ανάλογη της συχνότητας) σε αντιστοιχία με την κινητική ενέργεια των μορίων, τότε με την κατάλληλη μαθηματική επεξεργασία μπορούμε να καταλήξουμε στην παρακάτω εξίσωση του Πλανκ.

$$u(f,T)=\frac{8\pi h}{c^3}\frac{f^3}{e^{\frac{hf}{kT}}-1} \tag{5}$$

Η εξίσωση αυτή ταιριάζει απόλυτα με τα πειραματικά δεδομένα της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος. Μετά από αυτή την επιτυχία του Πλανκ κάτι νέο γεννήθηκε στον κόσμο της Φυσικής.
Αυτό ήταν η Κβαντική Θεωρία και πατέρας αυτής ο Πλανκ.

4. Η ημικλασσική περίοδος. Η προσπάθεια διάσωσης του κλασσικού οικοδομήματος (1900-1926)

Το πλανητικό μοντέλο για το άτομο του Ράδερφορδ (Ernest Rutherford) επαληθεύεται επακριβώς από το αντίστοιχο πείραμα και είναι αδύνατο να αμφισβητηθεί. Ωστόσο:

- Δεν υπάκουει στις εξισώσεις του Μάξγουελ.
- Δεν μπορεί να ερμηνεύσει τη γραμμικότητα των ατομικών φασμάτων.
- Δεν μπορεί να εξηγήσει το μέγεθος των ατόμων και πολλά άλλα.

Το πλανητικό μοντέλο για το άτομο του υδρογόνου οδηγεί στη σχέση

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\frac{e^2}{r^2}=\frac{m_e u^2}{r} \tag{6}$$

Παρατηρούμε ότι η σχέση αυτή δεν οδηγεί σε μία και μοναδική λύση για την ακτίνα r του ατόμου. Άρα το άτομο του υδρογόνου μπορεί να έχει οποιοδήποτε μέγεθος. Μας λείπει μία ακόμη εξίσωση ώστε από τη λύση του συστήματος να υπάρχει μία και μοναδική λύση για το r η οποία να ανταποκρίνεται στο μέγεθος του ατόμου του υδρογόνου.

Ο Μπορ προσθέτει αξιωματικά την παρακάτω σχέση:

$$mur=\hbar\cdot n \quad \text{με } n=1,2,3\ldots \tag{7}$$

Η λύση του συστήματος δίνει το σωστό μέγεθος του ατόμου του υδρογόνου για n=1 η οποία αντιπροσωπεύει την θεμελιώδη κατάσταση ελάχιστης ενεργείας.

Ο Μπορ προσθέτει αξιωματικά και κάποιες άλλες προτάσεις, με τη βοήθειά των οποίων μπορούν πλέον να υπολογιστούν θεωρητικά οι φασματικές γραμμές εκπομπής και απορρόφησης του ατόμου του υδρογόνου καθώς και των υδρογονοειδών ατόμων με απόλυτη συμφωνία με το πείραμα.

Τελικά τα αξιώματα ήταν τα παρακάτω:

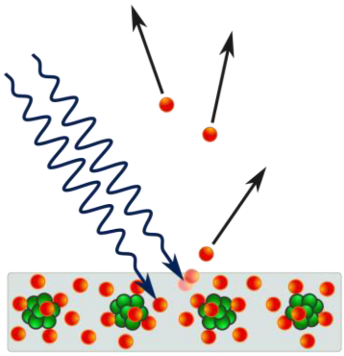
1. τα ηλεκτρόνια κινούνται σε κυκλικές τροχιές γύρω από τον πυρήνα λόγω της δύναμης Coulomb
2. όταν το ηλεκτρόνιο κινείται σε κάποιες συγκεκριμένες τροχιές δεν εκπέμπει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία όπως προβλέπεται από την κλασσική θεωρία.
3. οι τροχιές αυτές είναι πολλές και το ηλεκτρόνιο μπορεί να μεταπηδήσει από τη μία τροχιά στην άλλη εκπέμποντας ή απορροφώντας ένα και μόνο ένα φωτόνιο
4. η στροφορμή του ηλεκτρονίου παίρνει τιμές ακέραιες πολλαπλάσιες μίας θεμελιώδους

Αϊστάιν (Einstein) - Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Ο Αϊνστάιν συνεχίζοντας το έργο του Πλανκ, ερμηνεύει το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο και παίρνει το βραβείο Νόμπελ. Υιοθετεί την άποψη ότι το φως όχι μόνο μεταφέρεται σε ενεργειακά πακέτα, αλλά η αλληλεπίδρασή του με την ύλη γίνεται και αυτή με ενεργειακά πακέτα. Το βραβείο Νόμπελ δεν το πήρε για την ειδική ή τη γενική θεωρία σχετικότητας αφού οι δύο αυτές θεωρίες δεν είχαν ακόμη επιβεβαιωθεί πειραματικά και δεν ήταν γνωστό αν θα είχαν κάποια τεχνολογική εφαρμογή στο μέλλον. Αντίθετα το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο είχε άμεση εφαρμογή στην δημιουργία του ομιλούντος κινηματογράφου. Με τη χρήση του φωτοηλεκτρικού φαινομένου έγινε δυνατή η εγγραφή του ήχου με οπτικό τρόπο παράπλευρα στο κάθε καρέ της ταινίας. Με τη βοήθεια του φωτοηλεκτρικού φαινομένου μπορεί να φτιαχτεί μία φωτοαντίσταση χωρίς τη χρήση κρυσταλλοδιόδου. Έτσι μπορούμε να έχουμε τη μετατροπή της έντασης του φωτός σε μεταβολές του ηλεκτρικού ρεύματος.

Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο είναι το αντίστροφο της δημιουργίας των ακτίνων Χ. Οι ακτίνες Χ δημιουργούνται όταν ταχέως κινούμενα ηλεκτρόνια πέσουν πάνω σε μία μεταλλική επιφάνεια. Στο φωτοηλεκτρικό φαινόμενο συμβαίνει το αντίστροφο. Πέφτει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία σε μία μεταλλική επιφάνεια και από αυτήν απελευθερώνονται ηλεκτρόνια. Το πείραμα έδειξε ότι για την απελευθέρωση των ηλεκτρονίων θα πρέπει η συχνότητα της προσπίπτουσας ακτινοβολίας να είναι μεγαλύτερη από κάποια οριακή τιμή. Το πειραματικό αυτό δεδομένο δεν είναι δυνατό να εξηγηθεί με την κλασσική θεωρία. Ο Αϊστάιν το ερμήνευσε υποθέτοντας ότι το κάθε ηλεκτρόνιο του μετάλλου μπορεί να απορροφήσει κάθε φορά ένα και μόνο ένα φωτόνιο. Για την εξαγωγή ενός ηλεκτρονίου από το μέταλλο έστω ότι απαιτείται μία ελάχιστη ενέργεια εξαγωγής W. Έτσι σύμφωνα με την αρχή διατήρησης της ενέργειας θα έχουμε:

$$\mathrm{hf} = \frac{1}{2}\mathrm{mu}^2 + \mathrm{W} \tag{8}$$



Από την παραπάνω σχέση είναι φανερό ότι το φαινόμενο θα συμβαίνει για συχνότητες μεγαλύτερες της

$$f_{min} = W/h \tag{9}$$

-Το φαινόμενο Κόμπτον (Comton)

Ο Compton χρησιμοποιώντας σχέσεις από τη θεωρία της σχετικότητας και την κβαντική θεωρία ερμηνεύει το ομώνυμο φαινόμενο και όλα αυτά πριν την πλήρη διατύπωση της κβαντικής θεωρίας.

Ανάλυση του φαινόμενου Κόμπτον

Ο Κόμπτον παρατήρησε το 1924 ότι όταν ακτίνες x πέσουν σε μία μεταλλική επιφάνεια, τότε διασκορπίζονται (σκεδάζονται) προς όλες τις κατευθύνσεις. Σε κάθε όμως γωνία σχέδασης τόσο το μήκος κύματος όσο και η ένταση είναι διαφορετική. Το μήκος κύματος της σχεδαζόμενης ακτινοβολίας ο Comton το μέτρησε με τη βοήθεια ενός φασματόμετρου ακτίνων Χ τύπου Bragg's. Το φασματόμετρο αυτό βασίζει τη λειτουργία του στην ίδια περίπου αρχή στη οποία βασίζεται και η μέθοδος μέτρησης του μήκους κύματος της φωτεινής ακτινοβολίας στο πείραμα Γιάνκ.

Η σχέση στην οποία κατέληξε ο Compton ήταν η παρακάτω:

$$\lambda' = \lambda + \frac{h}{m_e c}(1 - \sigma\upsilon\nu\varphi) \tag{10}$$

Όπου:

λ' το μήκος κύματος της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας

λ το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας

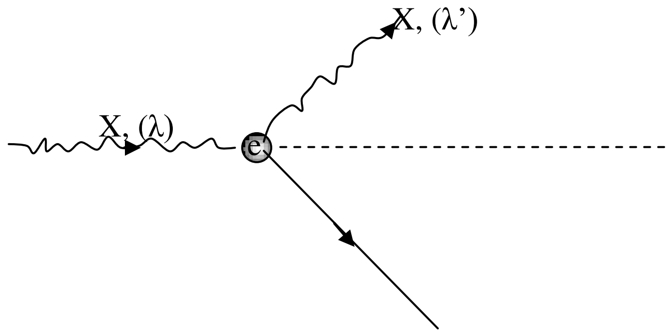
h η σταθερά του Πλάνκ

m_e η μάζα του ηλεκτρονίου

c η ταχύτητα του φωτός

φ η γωνία απόκλισης από την αρχική κατεύθυνση των ακτίνων Χ

ΑΠΟΔΕΙΞΗ:



Εφαρμογή της Αρχής διατήρησης της Ενέργειας: $\frac{hc}{\lambda}+m_ec^2=\frac{hc}{\lambda'}+\sqrt{p_e{}^2c^2+m_e^2c^4}$ (11)

Αρχή διατήρησης της ορμής στον άξονα x: $\frac{h}{\lambda}=\frac{h}{\lambda'}\sigma\upsilon\nu\varphi+p_e\sigma\upsilon\nu\theta$ (12)

Αρχή διατήρησης της ορμής στον άξονα y: $0=p_e\eta\mu\theta+\frac{h}{\lambda'}\eta\mu\varphi$ (13)

Από τις 3 αυτές εξισώσεις καταλήγουμε στην εξίσωση Κόμπτον (10)

5. Η εδραίωση της κβαντικής φυσικής. (1926…)-Η αλλαγή του παραδείγματος κατά Κουν

Στο χρονικό διάστημα 1900-1926 έγιναν πολλές προσπάθειες για να διασωθεί το κλασσικό οικοδόμημα. Τα πειραματικά όμως δεδομένα που συνεχώς προστίθεντο όπως πχ το πείραμα Stern-Gerlach που αναδείκνυε την μυστήρια ιδιότητα του spin, δεν μπορούσαν με κανένα τρόπο να ερμηνευτούν με την κλασσική θεωρία. Οι αυθαίρετες προτάσεις ώστε να **μπαλωθούν** τα πράγματα συνεχώς αυξάνονταν, μέχρι που τελικά ήρθε η πλήρης κατάρρευση του κλασσικού οικοδομήματος.

Μπορεί να λέμε ότι ο πατέρας της κβαντομηχανικής είναι ο Πλανκ αλλά μάλλον αυτή η θεώρηση είναι υπερβολική. Ίσως να είναι ο παππούς της κβαντικής θεωρίας αφού ο πραγματικός πατέρας δικαίως θα πρέπει να θεωρηθεί ο Σρέντινγκερ (Schrodinger) (για κάποιους άλλους ο Χάιζεμπεργκ-Heigenberg), αφού αυτός παρουσίασε για πρώτη φορά την ομώνυμη εξίσωση η οποία είναι η αντίστοιχη της θεμελιώδους εξίσωσης της μηχανικής του Νεύτωνα F=ma.

Όπως και η εξίσωση του Νεύτωνα, έτσι και η εξίσωση του Σρόντινγκερ είναι αξιωματική. Το πώς σκέφτηκε για να την προτείνει δεν το ξέρουμε. Εμείς θ' ακολουθήσουμε μία πορεία συλλογισμών για να καταλήξουμε σ' αυτήν που μπορεί να διαφέρει από λίγο έως πολύ από τις σκέψεις του δημιουργού της.

Ως γνωστό η εξίσωση ενός μηχανικού ή ηλεκτρομαγνητικού αρμονικού κύματος είναι η παρακάτω:

$$Y=Y_o\eta\mu 2\pi(\frac{t}{T}-\frac{x}{\lambda}) \quad (14)$$

όπου Υ η απομάκρυνση αν πρόκειται για μηχανικό κύμα ή η ένταση του ηλεκτρικού ή του μαγνητικού πεδίου αν πρόκειται για ηλεκτρομαγνητικό κύμα.

Για να είμαστε όμως πιο ακριβείς η (14) δεν αποτελεί εξίσωση, αλλά λύση μίας διαφορικής εξίσωσης, και μάλιστα μία από τις πολλές λύσεις της παρακάτω διαφορικής εξίσωσης:

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} - \left(\frac{T}{\lambda}\right)^2 \frac{\partial^2 Y}{\partial t^2} = 0$$

επειδή $u = \lambda f = \frac{\lambda}{T}$, η διαφορική εξίσωση των κυμάτων μπορεί να πάρει τη μορφή:

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} - \frac{1}{u^2}\frac{\partial^2 Y}{\partial t^2} = 0 \qquad (15)$$

Την εποχή εκείνη ήταν γνωστό ότι τα σωματίδια όπως πχ τα ηλεκτρόνια έχουν και κυματική συμπεριφορά. Ο Ντε Μπρολί υποστήριξε ότι κάθε σωματίδιο που έχει κάποια ορμή p έχει κυματικές ιδιότητες οι οποίες περιγράφονται με ένα μήκος κύματος ίσο με:

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

Την σχέση αυτή την πρότεινε αφού σκέφτηκε ότι σύμφωνα με την εξίσωση της ενέργειας της ειδικής σχετικότητας:

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4 \qquad (16)$$

Για τα φωτόνια που έχουν μάζα ηρεμίας μηδέν θα ισχύει :

$$E=pc \qquad (17)$$

Από την άλλη σύμφωνα με την εξίσωση του Πλανκ το κάθε φωτόνιο μεταφέρει ενέργεια:

$$E=hf \qquad (18)$$

Έτσι θα ισχύει :

$$pc=hf \dashrightarrow p\lambda f=hf \dashrightarrow p\lambda=h \qquad (19)$$

Τη σχέση αυτή που ισχύει για το φωτόνιο, ο Ντε Μπρολί υποστήριξε ότι ισχύει και για οποιοδήποτε σωματίδιο αφού κάθε σωματίδιο μπορεί να έχει κάποια ορμή. Η πρώτη επιτυχία της σχέσης (19) είναι ότι μπορεί να ερμηνεύσει τη κβάντωση της στροφορμής που αξιωματικά εισήγαγε ο Μπορ ως την ανάγκη δημιουργίας στάσιμων κυμάτων γύρω από τον πυρήνα.

Αφού στο κάθε σωματίδιο αντιστοιχεί ένα μήκος κύματος, ας ψάξουμε να βρούμε μία κυματική εξίσωση στην οποία υπακούουν όλα τα σωματίδια, αντίστοιχη με την εξίσωση των κυμάτων.
Η εξίσωση αυτή πρέπει να έχει ως φάση, όχι την φάση των συνήθων κυμάτων που είναι η $\varphi = 2\pi(\frac{t}{T} - \frac{x}{\lambda})$, αλλά μία αντίστοιχη που η περίοδος του κύματος θα πρέπει να αντικατασταθεί με το μέγεθος της ενέργειας E=hf=h/T-->T=E/h.

Ενώ το μήκος κύματος με αυτό που αντιστοιχεί στα σωματίδια.

Έτσι η φάση του «σωματιδιακού» κύματος θα πρέπει να είναι η φ=2π(Et-px)/h δηλαδή

$$\varphi = \frac{1}{\hbar}(Et - px) \tag{20}$$

Η φάση αυτή θα πρέπει να βρίσκεται στη λύση μίας διαφορικής η οποία να μην καταλήγει προφανώς στην κυματική εξίσωση u=λf των κυμάτων, αλλά σε μία εξίσωση που να συνδέει την ενέργεια με την ορμή.

Η σχέση που συνδέει την ενέργεια με την ορμή σε κλασσικό επίπεδο (σε μικρές ταχύτητες) είναι η $E = \frac{p^2}{2m}$ για ένα ελεύθερο σωματίδιο.

Η πρώτη παρατήρηση που μπορούμε να κάνουμε είναι ότι η ζητούμενη διαφορική θα έχει δεύτερη παράγωγο ως προς το x ώστε να προκύψει η σταθερά p^2 και πρώτη παράγωγο ως προς t ώστε να προκύψει η σταθερά E.
Κατά συνέπεια δεν μπορεί να έχει ως λύση μία αρμονική συνάρτηση και γενικότερα μία πραγματική συνάρτηση. Η λύση θα είναι υποχρεωτικά μιγαδική.

Αν δοκιμάσουμε ως λύση την $Y = Ae^{-i\varphi} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$ τότε θα έχουμε:

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} Y \rightarrow p^2 \cdot Y = -\hbar^2 \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} \tag{21}$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = \frac{-i}{\hbar} EY \rightarrow E \cdot Y = i\hbar \frac{\partial Y}{\partial t} \tag{22}$$

Οπότε λόγω της σχέσης $E = \frac{p^2}{2m}$ προκύπτει η διαφορική εξίσωση

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial Y}{\partial t}$$ Εξίσωση Σρόντινγκερ για ελεύθερο σωματίδιο (23)

Ένας τρόπος για εύκολη απομνημόνευση της εξίσωσης είναι η υπενθύμιση ότι η ορμή και η ενέργεια είναι δύο παρακάτω τελεστές που δρουν πάνω σε κυματοσυναρτήσεις, παράγοντας έτσι την παραπάνω εξίσωση:

$p \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ και γενικότερα στις 3 διαστάσεις $p \to -i\hbar\vec{\nabla}$, $E \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Με τη χρήση αυτών των τελεστών μπορούμε εύκολα να γράψουμε την εξίσωση του Schrodinger ενός σωματιδίου (πχ ηλεκτρονίου) που η δυναμική του ενέργεια είναι συνάρτηση αποκλειστικά της θέσης. Για να συμβεί αυτό θα πρέπει η κίνηση του ηλεκτρονίου να μην επηρεάζει τον περιβάλλοντα χώρο. Αυτό συμβαίνει όταν κινείται γύρω από έναν πυρήνα (πεδίο Coulomb) ή μέσα σ' έναν πυκνωτή ο οποίος τροφοδοτείται με σταθερή τάση (φρέαρ δυναμικού) ή εναλλασσόμενη τάση (αρμονικός ταλαντωτής). Τότε η εξίσωση Schrodinger μπορεί να λυθεί επακριβώς. Από την εξίσωσης ενέργειας του ηλεκτρονίου

$E=p^2/2m + U$

Χρησιμοποιώντας όπως προαναφέραμε τους τελεστές ορμής – ενέργειας θα έχουμε:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 Y(\vec{r},t) + U(\vec{r})\cdot Y(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial Y(\vec{r},t)}{\partial t}$$ Εξίσωση Schrodinger σε δυναμικό πεδίο (24)

Η κυματοσυνάρτηση Y δεν εκφράζει κάποιο φυσικό μέγεθος. Σύμφωνα με την επικρατούσα άποψη το μέτρο της κυματοσυνάρτησης στο τετράγωνο $Y \cdot Y^*$ εκφράζει την πυκνότητα πιθανότητας εύρεσης του σωματιδίου σε κάποιο στοιχειώδη χώρο. Γι αυτό το ολοκλήρωμα της $Y \cdot Y^*$ σε όλο το χώρο θα πρέπει να ισούται με τη μονάδα. Αν θέλουμε να βρούμε την πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο σε κάποια περιοχή, αρκεί να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα του τετραγώνου του μέτρου της κυματοσυνάρτησης σε αυτή την περιοχή.

Προσπάθεια λύσης της εξίσωσης:

Επειδή η δυναμική ενέργεια U δεν εξαρτάται από το χρόνο, τα μαθηματικά μας πληροφορούν ότι η λύση μπορεί να βρεθεί ως μία συνάρτηση η οποία αποτελείται από το γινόμενο δύο κυματοσυναρτήσεων, μίας χωρικά εξαρτώμενης και μίας χρονικά εξαρτώμενης. Δηλαδή

$$Y(\vec{r},t) = Y_1(\vec{r})Y_2(t) \quad \text{οπότε} \quad -\frac{\hbar^2}{2m}Y_2(t)\vec{\nabla}^2 Y_1(\vec{r}) + Y_2(t)U(\vec{r})Y_1(\vec{r}) = i\hbar Y_1(\vec{r})\frac{\partial Y_2(t)}{\partial t} \qquad (25)$$

Άρα
$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 Y_1(\vec{r}) + U(\vec{r})Y_1(\vec{r})]\frac{1}{Y_1(\vec{r})} = i\hbar\frac{1}{Y_2(t)}\frac{\partial Y_2(t)}{\partial t} = \text{σταθερά} \qquad (26)$$

Έτσι καταλήγουμε σε δύο εξισώσεις. Μία καθαρά χωροεξαρτώμενη η οποία έχει και πραγματικές λύσεις και μία καθαρά χρονοεξαρτώμενη με μιγαδικές λύσεις.
Θέτοντας τη δυναμική ενέργεια του ηλεκτρονίου στο άτομο του Υδρογόνου

$$U = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \qquad (27)$$

μπορούμε να βρούμε τις λύσεις για το άτομο του υδρογόνου. Από τη λύση προκύπτουν οι συνθήκες του Μπορ. Άρα οι συνθήκες αυτές δεν έχουν πλέον τη μορφή αξιωμάτων αλλά αποτελούν πόρισμα της εξίσωσης Schrodinger. Στα παραπάνω βέβαια δεν έχει μπει το spin.

Την κάθε χρονοανεξάρτηση λύση οι χημικοί την ονομάζουν τροχιακό. Το τροχιακό από φυσική άποψη δεν εκφράζει τίποτα, όπως εξάλλου και η κυματοσυνάρτηση. Το τετράγωνο όμως του τροχιακού εκφράζει την πυκνότητα πιθανότητας.

Το τροχιακό 1S είναι η συνάρτηση

$$\Upsilon = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{\alpha_0}} \tag{28}$$

Επομένως σύμφωνα με αυτά που αναφέραμε το:

$$P = \frac{4\pi r^2}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{\alpha_0}} dr \tag{29}$$

θα εκφράζει την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε απόσταση από r έως r+dr από τον πυρήνα αφού ισούται με το μέτρο της κυματοσυνάρτησης επί το στοιχειώδη όγκο ενός σφαιρικού φλοιού. Αν θέλουμε να βρούμε ποια είναι η ακτίνα που έχει τη μεγαλύτερη πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο αρκεί να βρούμε σε ποια ακτίνα μεγιστοποιείται (δηλαδή μηδενίζεται η παράγωγος) της συνάρτησης

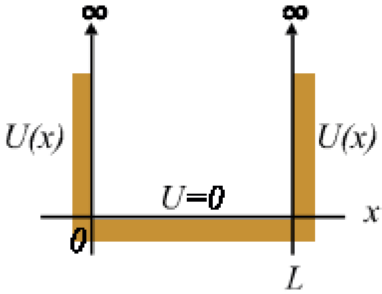
$$P = \frac{4\pi r^2}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{\alpha_0}} \tag{30}$$

Εύκολα διαπιστώνουμε ότι η παράγωγος μηδενίζεται στη θέση $r=a_o$

Άρα η λύση της εξίσωσης Schrodinger για το άτομο του υδρογόνου δίνει το ίδιο αποτέλεσμα για το μέγεθος του υδρογόνου που δίνουν και οι συνθήκες του Bohr.

Σημείωση 1:
Όπως φαίνεται από τη σχέση (30) η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στον πυρήνα (r=0) είναι μηδενική. Σε ορισμένα βιβλία χημείας αναφέρεται ότι η πιθανότητα αυτή είναι μέγιστη. Και αυτό γιατί δεν ερμηνεύεται σωστά η κυματοσυνάρτηση.
Σημείωση 2:
Οι συνθήκες του Bohr προβλέπουν μία επίπεδη τροχιά του ηλεκτρονίου άρα και ένα επίπεδο άτομο υδρογόνου με στροφορμή $\hbar$ κατ' εικόνα και ομοίωση του πλανητικού μοντέλου. Οι λύσεις της εξίσωσης Σρόντινγκερ οδηγούν σε μία κυματοσυνάρτηση με σφαιρική συμμετρία στη θεμελιώδη κατάσταση (1S) με στροφορμή μηδέν! δηλαδή σε ένα σφαιρικό άτομο.
Σημείωση 3:
Οι συνθήκες του Bohr αποτυγχάνουν πλήρως στην ερμηνεία των φασμάτων των μη υδρογονοειδών ατόμων. Αποτυγχάνουν στην ερμηνεία του χημικού δεσμού κλπ. Η εξίσωση Schrodinger ερμηνεύει πλήρως όλα τα παραπάνω. Ερμηνεύει επίσης το ομαλό και ανώμαλο φαινόμενο Zeeman σχετικό με την αλλαγή των ατομικών φασμάτων παρουσία μαγνητικού πεδίου. Το κόστος της ερμηνείας είναι ότι εγκαταλείπονται πλήρως οι έννοιες της τροχιάς, της ταχύτητας, της επιτάχυνσης κλπ. Με τη νέα φυσική αναφερόμαστε πλέον μόνο στα μεγέθη που μπορούμε να μετρήσουμε μέσω των φασμάτων όπως η ενέργεια το μήκος κύματος και η συχνότητα, η στροφορμή το spin κλπ

Λύση της εξίσωσης Schrödinger σε ορθογώνιο πηγάδι δυναμικού με άπειρα τοιχώματα



Η χρονοανεξάρτητη εξίσωση σε μία διάσταση είναι η:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Y}{dx^2} = EY \rightarrow -\frac{d^2Y}{dx^2} = \frac{2Em}{\hbar^2}Y \rightarrow \frac{d^2Y}{dx^2} + k^2Y = 0 \quad \text{όπου}\ k^2 = \frac{2Em}{\hbar^2} \tag{31}$$

Η παραπάνω εξίσωση είναι ακριβώς η ίδια με την εξίσωση του αρμονικού ταλαντωτή. Επομένως θα έχει λύση την:

Y=Asinkx

Ο απειρισμός της δυναμικής ενέργειας έξω από την περιοχή - πηγάδι 0- L σημαίνει ότι σ' αυτή την περιοχή δεν μπορεί να υπάρχει το σωματίδιο, άρα Y=0. Οι συνθήκες συνέχειας στο 0 και στο L επιβάλουν:

sink0=sinkL=0

από την sinkL=0 → $kL = n\pi$ όπου $n = 1,2,3...$αφού $k \neq 0$

(Αν n=0-->k=0 οπότε Y=ax+c και από τις συνθήκες συνέχειας Y(0)=Y(L)=0 --> Y=0 άτοπο, αφού αυτό σημαίνει ανυπαρξία σωματιδίου)

Από την αντικατάσταση του k προκύπτει:

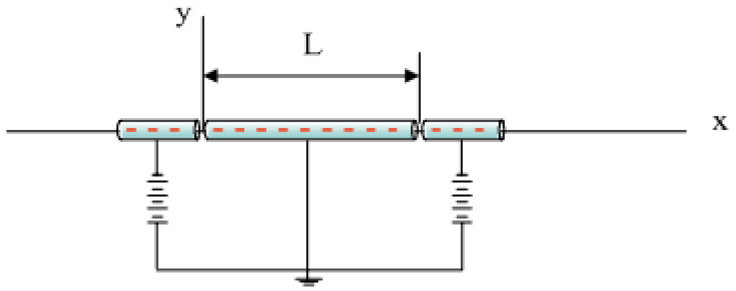
$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2 \tag{32}$$

Από την παραπάνω εξίσωση συμπεραίνουμε τα εξής:

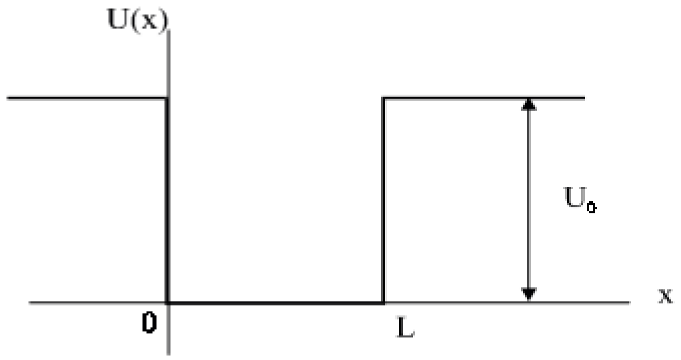
1. Η κβάντωση της ενέργειας οφείλεται στον περιορισμό της ελευθερίας του σωματιδίου σε έναν συγκεκριμένο χώρο. Όσο αυξάνεται η «ελευθερία» του σωματιδίου τόσο εκφυλίζεται το φαινόμενο της κβάντωσης. Για ένα εντελώς ελεύθερο σωματίδιο δεν έχουμε φαινόμενα κβάντωσης. Η κβάντωση της ενέργειας έχει σχέση και με τη μάζα του σωματιδίου. Όσο μεγαλώνει η μάζα τόσο εκφυλίζεται και το φαινόμενο της κβάντωσης της ενέργειας.
2. Η ελάχιστη ενέργεια του σωματιδίου σε έναν περιορισμένο χώρο δεν μπορεί να είναι μηδενική. Όσο μάλιστα περιορίζεται ο χώρος κίνησης του σωματιδίου τόσο αυξάνεται και η ελάχιστη κινητική ενέργεια που μπορεί να έχει το σωματίδιο.

Λύση της εξίσωσης Schrödinger σε ορθογώνιο πηγάδι δυναμικού με πεπερασμένα τοιχώματα

(α)



(β)



Στο εσωτερικό του πηγαδιού θα ισχύει ότι και προηγούμενα, δηλαδή στο πηγάδι με άπειρα τοιχώματα. Έτσι η λύση θα είναι της μορφής:

Y=Asinkx για $0 \le x \le L$

Για τα διαστήματα δεξιά και αριστερά του πηγαδιού θα έχουμε :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Y}{dx^2}+U_0Y=EY \rightarrow -\frac{d^2Y}{dx^2}+\frac{2(U_0-E)m}{\hbar^2}.Y=0 \rightarrow \frac{d^2Y}{dx^2}=c^2Y \quad \text{με} \quad c^2=\frac{2(U_0-E)m}{\hbar^2}$$

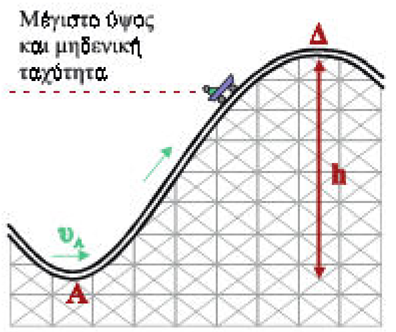
Επίσης θα πρέπει να ισχύουν οι εξισώσεις συνέχειας
$Y_1(0)=Y_2(0)$ καθώς και $Y_1(L)=Y_2(L)$ και για τις παραγώγους

Η έκπληξη από το παραπάνω παράδειγμα είναι ότι υπάρχει λύση διάφορη του μηδενός έξω από το πηγάδι αριστερότερα του μηδενός και δεξιότερα του L. Αυτό σημαίνει ότι η κβαντική θεωρία προβλέπει ότι εάν βάλουμε ένα σωματίδιο σε ένα πηγάδι, τότε αυτό μπορεί να βρεθεί έξω από το πηγάδι μολονότι η ενέργειά του δεν το επιτρέπει.

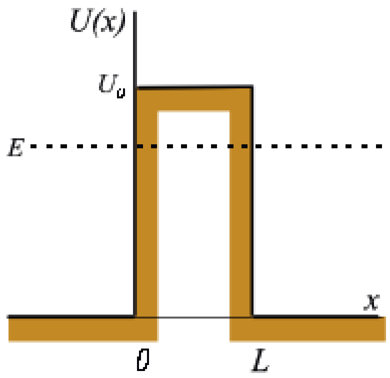
ΤΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ ΣΗΡΑΓΓΑΣ

Ένα ακριβώς αντίστοιχο φαινόμενο με την ίδια ακριβώς ανάλυση είναι το **φαινόμενο της σήραγγας.**

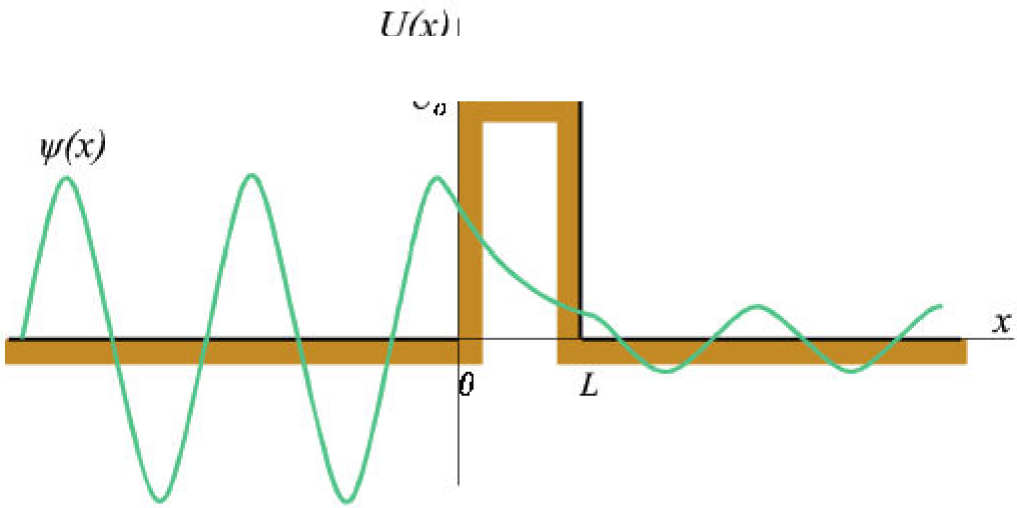
Ένα σωματίδιο βρίσκεται αριστερά ενός φράγματος δυναμικού. Η ενέργεια που έχει είναι μικρότερη από την δυναμική ενέργεια του φράγματος. Κλασσικά το σωματίδιο αυτό είναι καταδικασμένο να ζήσει στο αριστερό μέρος του φράγματος. Στην κβαντομηχανική το σωματίδιο έχει μία μικρή πιθανότητα να διαπεράσει το φράγμα και να βρεθεί στη δεξιά μεριά του φράγματος σαν να πέρασε από ένα «αόρατο» τούνελ.



Όταν $E < U_Δ$ το τραινάκι δεν μπορεί να υπερπηδήσει το φράγμα δυναμικού.



Φράγμα δυναμικού ύψους U_0. Ένα ηλεκτρόνιο ενέργειας $E<U_0$ σύμφωνα με την κλασική θεωρία δεν μπορεί να περάσει από τη μία πλευρά του φράγματος στην άλλη .



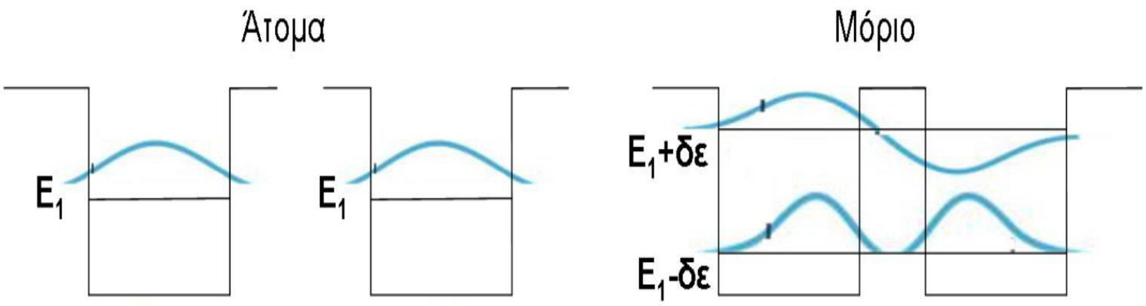
Η λύση της εξίσωσης Schrodinger στο δεξιό μέρος του φράγματος δεν είναι μηδενική

Το φαινόμενο αυτό είναι πάρα πολύ σπουδαίο αφού ερμηνεύει πλήθος φαινομένων ανεξήγητων στο επίπεδο της κλασσικής φυσικής. Και πάνω απ’ όλα ερμηνεύει τους χημικούς δεσμούς.

Πως δημιουργείται ένα μόριο ή ένα ιόν υδρογόνου αφού τα δύο πρωτόνια απωθούνται μεταξύ τους; Στο κάθε άτομο υδρογόνου το ηλεκτρόνιο είναι σαν να βρίσκεται σε ένα πηγάδι δυναμικού. Αν πλησιάσουν δύο άτομα υδρογόνου αρκετά κοντά τότε λόγω του φαινομένου σήραγγας τα ηλεκτρόνια μπορούν να δραπετεύσουν από το δικό τους πηγάδι και να βρεθούν στο γειτονικό. Έτσι τα ηλεκτρόνια δεν ανήκουν πλέον σε ένα άτομο αλλά και στα δύο. Αυτή η δυνατότητα έχει ως αποτέλεσμα την ελάττωση της ενέργεια των δύο ατόμων με αποτέλεσμα να δημιουργείται το μόριο. Το πλησίασμα βέβαια αυξάνει τη δυναμική ενέργεια λόγω της άπωσης των πρωτονίων και γι αυτό το μέγεθος του μορίου καθορίζεται από την απαίτηση η ενέργεια του συστήματος να γίνει ελάχιστη. Έτσι στο μόριο του υδρογόνου τα πρωτόνια δεν είναι τόσο κοντά ώστε η δυναμική ενέργεια να είναι πολύ μεγάλη λόγω της άπωσης, αλλά ούτε και τόσο μακριά ώστε τα ηλεκτρόνια λόγω του φαινομένου σήραγγας να ανήκουν και στα δύο πρωτόνια.

Άρα ο συνδετικός κρίκος των δύο πρωτονίων είναι τα δύο κοινά ηλεκτρόνια. Και αυτό ερμηνεύεται πλήρως στα πλαίσια της κβαντικής θεωρίας.

Στα μέταλλα ο συνδετικός κρίκος των θετικών ιόντων είναι τα ελεύθερα ηλεκτρόνια τα οποία ανήκουν σε **όλα** τα θετικά ιόντα του πλέγματος.



Σχ. 4: Η ένωση δύο ατόμων Η για το σχηματισμό του H_2. Φαίνονται οι ενεργειακές στάθμες που προκύπτουν καθώς και οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις.

6. Μία διαφορετική διατύπωση της κβαντικής θεωρίας από τον Heisenberg,

Σχεδόν παράλληλα με τον Σρέντινγκερ ο Χάιζεμπεργκ διατύπωσε την κβαντική θεωρία όχι με τη βοήθεια διαφορικών εξισώσεων αλλά με τη βοήθεια πινάκων. Με τη διατύπωση του Χάιζεμπεργκ το κάθε φυσικό μέγεθος αντιπροσωπεύεται από έναν ερμητιανό πίνακα. Οι ιδιοτιμές αυτού του πίνακα εκφράζουν και τις μετρήσιμες τιμές για το συγκεκριμένο φυσικό μέγεθος. Πολύ γρήγορα διαπιστώθηκε ότι οι δύο αυτές διατυπώσεις ήταν μαθηματικά ισοδύναμες. Αρκετά αργότερα ο Feynman θα κάνει και μία άλλη διατύπωση της κβαντικής θεωρίας μέσω των δυνατών διαδρομών ή των διαγραμμάτων Φάινμαν-Feynman . Και η διατύπωση αυτή είναι ισοδύναμη με τις άλλες δύο.
Το φαινόμενο της διατύπωσης της ίδιας θεωρίας με πολλαπλούς τρόπους εμφανίζεται και στην κλασσική φυσική η οποία μπορεί να διατυπωθεί με:

1. τη κλασσική διατύπωση του θεμελιώδους νόμου του Νεύτωνα
2. την αρχή της ελάχιστης δράσης
3. με την εξίσωση Lagrange
4. με την εξίσωση Hamilton και τις αγκύλες Poisson κλπ

Μολονότι οι διαφορετικές διατυπώσεις όπως προαναφέραμε είναι μαθηματικά ισοδύναμες, κάποιες είναι πιο πλούσιες από φυσική άποψη από κάποιες άλλες. Για παράδειγμα η Lagrangian είναι ένα πολύτιμο εργαλείο πιο χρηστικό για την αντιμετώπιση προχωρημένων προβλημάτων κλασσικής μηχανικής. Επίσης είναι και ένας συνδετικός κρίκος για την διατύπωση του ηλεκτρομαγνητισμού. Οι αγκύλες Poisson αποτελούν μία γέφυρα για την διατύπωση των μεταθετών κατά Χάιζεμπεργκ και την διατύπωση της αρχής της αβεβαιότητας. Η αρχή της αβεβαιότητας μας λέει ότι υπάρχουν κάποια ζευγάρια φυσικών μεγεθών που ο μεταθέτης τους είναι διάφορος του μηδενός. Τα μεγέθη αυτά δεν μπορούν να μετρηθούν με οποιαδήποτε ακρίβεια. Δύο πολύ ενδιαφέροντα τέτοια ζευγάρια αποτελούν η θέση με την ορμή καθώς και η ενέργεια με το χρόνο.
Γι αυτά τα μεγέθη ισχύει η ανισότητα:

$$\Delta\alpha \cdot \Delta\beta \geq \frac{\hbar}{2}$$

Όπου Δα η αβεβαιότητα της μέτρησης του μεγέθους α και Δβ η αβεβαιότητα της μέτρησης του μεγέθους β.
Πάνω από 20 χρόνια υπήρχε διαμάχη ανάμεσα στον Einstein και στον Bohr σχετικά με το αν αυτή η ανισότητα ισχύει γιατί δεν διαθέτουμε τις απαιτούμενες πληροφορίες ώστε να κάνουμε τις σωστές προγνώσεις όπως πχ στη ρίψη ενός ζαριού, ή αν η αβεβαιότητα αυτή είναι μία ενδογενής χαρακτηριστική ιδιότητα της φύσης την οποία δεν πρόκειται να την ξεπεράσουμε ποτέ όσο και αν αυξηθεί η ακρίβεια των πειραμάτων.
Με το θεώρημα ανισοτήτων του Bell (δεκαετία του 60 μετά το θάνατο του Einstein) και με το πείραμα του Alain Aspect (1982) αποδείχτηκε ότι ο Einstein μάλλον είχε άδικο. Τελικά ο Θεός παίζει ζάρια.

Πολλοί είναι οι τρόποι με τους οποίους μπορεί κάποιος να μεταβεί από την κλασσική στην κβαντική θεωρία. Ένας αγαπητός τρόπος στην εισαγωγή στην κβαντομηχανική για τον αείμνηστο καθηγητή κο Νίκο Αντωνίου ήταν μέσω της οπτικής και πιο συγκεκριμένα μέσω της αρχής του Fermat. Για τη δευτεροβάθμια εκπαίδευση θεωρώ ότι ο πιο ενδεδειγμένος τρόπος εισαγωγής στις νέες ιδέες και μεθόδους της κβαντικής θεωρίας είναι η εισαγωγή της μέσω της αρχής αβεβαιότητας.

Το πρώτο ατομικό μοντέλο, που ερμήνευε τη σκέδαση των σωματιδίων α από φύλλο χρυσού ήταν το μοντέλο του Rutherford. Μολονότι το μοντέλο ερμήνευε τα πειραματικά αποτελέσματα της σκέδασης, δημιούργησε πολλά ερωτηματικά όπως γιατί τα άτομα έχουν ένα σταθερό μέγεθος ή γιατί δεν είναι επίπεδα όπως οι τροχιές των πλανητών γύρω από τον ήλιο κλπ;

Η σχέση αβεβαιότητας για το ζεύγος θέση-ορμή είναι η $\Delta p \cdot \Delta r \geq \frac{\hbar}{2}$

Αφού οι αβεβαιότητες θέσης και ορμής πρέπει να υπακούουν στην παραπάνω ανισότητα μπορούμε για τις μέσες τιμές των αντίστοιχων μεγεθών να γράψουμε:

$p.r = \hbar$

Υπολογίζοντας την ενέργεια του ηλεκτρονίου έχουμε:

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{4\pi e_0}\frac{e^2}{r} = \frac{\hbar^2}{2r^2 m} - \frac{1}{4\pi e_0}\frac{e^2}{r}$$

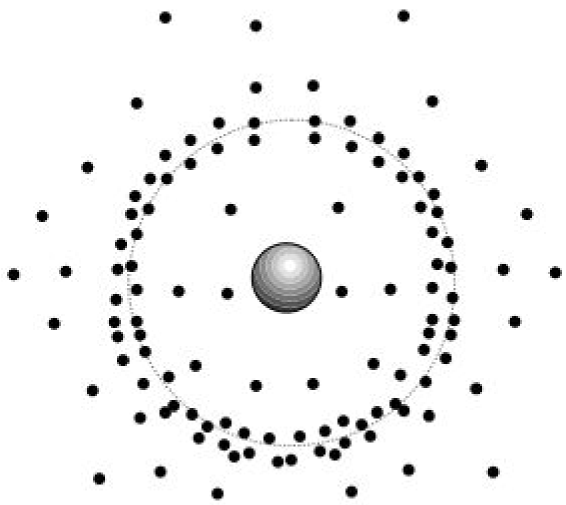
Μηδενίζοντας την παράγωγο της παραπάνω σχέσης ώστε να εξασφαλίσουμε την ελαχιστοποίηση της ενέργειας, καταλήγουμε στη σχέση που δίνει την ακτίνα του Bohr

Συνεπώς είμαστε υποχρεωμένοι να πούμε ότι το «e» θα βρίσκεται γενικά γύρω από το πυρήνα, με μεγαλύτερη πιθανότητα να βρίσκεται σε απόσταση r_o από αυτόν, χωρίς όμως να αποκλείσουμε το ενδεχόμενο, να βρεθεί και σε κάποια άλλη διαφορετική απόσταση. Η τροχιά δεν μπορεί να είναι επίπεδη, αφού μια επίπεδη κίνηση του «e» θα σήμαινε $u_z=0$ και z=0 πράγμα άτοπο σύμφωνα με την αρχή της αβεβαιότητας.(αφού τότε θα γνωρίζαμε με απόλυτη ακρίβεια τη θέση και τη ταχύτητα του «e» στον άξονα z.)

ΆΡΑ Η ΕΝΝΟΙΑ ΤΗΣ ΤΡΟΧΙΑΣ ΕΓΚΑΤΑΛΕΙΠΕΤΑΙ ΚΑΙ ΑΝΤΙΚΑΘΙΣΤΑΤΑΙ ΜΕ ΤΗΝ ΕΝΝΟΙΑ ΤΗΣ ΠΙΘΑΝΟΤΗΤΑΣ Ή ΤΟΥ ΤΡΟΧΙΑΚΟΥ

Το μοντέλο μας λοιπόν, σε σχέση με αυτό των δορυφόρων, έχει εντελώς αλλάξει, από το γεγονός και μόνο της ισχύος της αρχής της αβεβαιότητας. Το ηλεκτρόνιο τελικά, βρίσκεται με μεγαλύτερη πιθανότητα σε απόσταση r_o από το πυρήνα, γιατί τότε γίνεται το ιδανικό πάντρεμα των δύο αρχών. Της αρχής της αβεβαιότητας και της αρχής της ελάχιστης ενέργειας.

Το ηλεκτρόνιο στο άτομο του Υδρογόνου όταν βρίσκεται στη θεμελιώδη κατάσταση μπορεί να βρεθεί με την ίδια πιθανότητα στην ίδια απόσταση από τον πυρήνα. Δηλαδή στη θεμελιώδη κατάσταση έχουμε μία σφαιρική συμμετρία. Αυτό σημαίνει ότι δεν υπάρχει μία προτιμητέα κατεύθυνση, οπότε η στροφορμή στη θεμελιώδη κατάσταση είναι ίση με μηδέν. Ένα αποτέλεσμα που έρχεται σε πλήρη αντίθεση με την κλασσική φυσική.



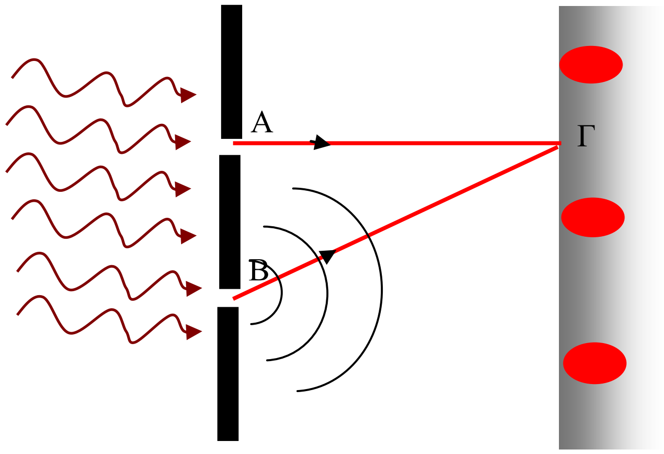
η πιθανότητα να βρούμε το ηλεκτρόνιο σε απόσταση r μεγιστοποιείται στην ακτίνα r_o που ταυτίζεται με την ακτίνα του Bohr

Εκτός από το μέγεθος του ατόμου και τη σταθερότητά του, με τη βοήθεια της Αρχής της Αβεβαιότητας μπορούμε να ερμηνεύσουμε ποιοτικά και τα προαναφερθέντα φαινόμενα της κίνησης σωματιδίου σε πηγάδι δυναμικού με άπειρα, σε πηγάδι δυναμικού με πεπερασμένα τοιχώματα, το φαινόμενο σήραγγας και άλλα.

Για παράδειγμα, το φαινόμενο σήραγγας μπορούμε να το ερμηνεύσουμε ως εξής: Αφού σύμφωνα με την Αρχή της Αβεβαιότητας μπορεί να παραβιαστεί η ΑΔΕ για ένα μικρό χρονικό διάστημα, τότε ένα σωματίδιο (αν προλάβει) μπορεί να μεταβεί σε έναν άλλο χώρο, μολονότι οι δύο χώροι διαχωρίζονται με ένα ενεργειακό φράγμα που κλασσικά δεν θα μπορούσε να προσπεραστεί από το σωματίδιο. Αν δηλαδή ένα σωματίδιο όπως πχ ένα ηλεκτρόνιο κινείται με ταχύτητα u τότε σε χρονικό διάστημα Δt=L/u μπορεί να διαβεί το φράγμα δυναμικού μήκους L παραβιάζοντας την αρχή διατήρησης της ενέργειας κατά το ποσό ΔΕ αρκεί να ισχύει $\Delta E < \frac{\hbar L}{u}$ ΔΕ. Όταν ξεπεράσει το φράγμα τότε αποκαθίσταται ξανά η αρχή διατήρησης της ενέργειας και το ηλεκτρόνιο βρίσκεται πλέον στην απαγορευμένη περιοχή.

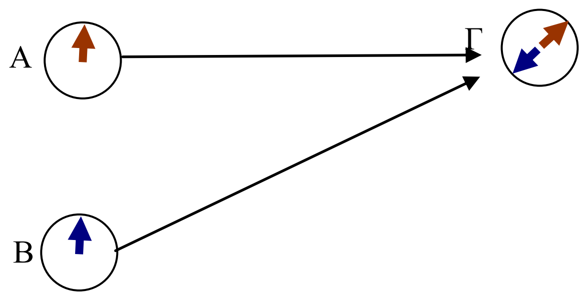
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ:

Το πείραμα της διπλής σχισμής, το πρόβλημα της μέτρησης και δυσκολίες κατανόησης του μηχανισμού της κβαντικής θεωρίας



Το πείραμα της διπλής σχισμής ερμηνεύεται με πολύ απλό στη κλασσική φυσική. Αν έχουμε ανοικτή μόνο τη σχισμή Α το φως θα φθάσει στο απέναντι σημείο Γ. Αν έχουμε ανοικτή μόνο τη σχισμή Β το φως λόγω του φαινομένου της περίθλασης (Αρχή Χόιχενς) θα φωτίσει το σημείο Γ. Αν όμως είναι ανοικτές και οι δύο σχισμές τότε το σημείο Γ δεν θα φωτιστεί εφόσον ΒΓ-ΑΓ=λ/2 λόγω της αποσβεστικής συμβολής.
Ποια είναι όμως η ερμηνεία του ίδιου του φαινομένου στο πλαίσιο της κβαντικής θεωρίας; Στο πλαίσιο αυτής της θεωρίας μπορούμε να ελαττώσουμε την ένταση του φωτός και να εκπέμπουμε κάθε φορά ένα και μοναδικό φωτόνιο. Τότε το φωτόνιο μπορεί να βρεθεί σε διάφορες θέσεις του διαφράγματος με διαφορετική πιθανότητα. Μετά από αρκετές ρίψεις θα αρχίσουν να εμφανίζονται οι κροσσοί ενίσχυσης και απόσβεσης, δηλαδή οι φωτεινές και σκοτεινές λωρίδες. Το περίεργο είναι ότι εάν είναι ανοικτή μόνο μία από τις δύο σχισμές είτε η Α είτε η Β, η πιθανότητα να βρεθεί το φωτόνιο στη θέση Γ είναι διάφορη του μηδενός. Ανοίγοντας τώρα και τις δύο σχισμές, η πιθανότητα αυτή μηδενίζεται. Και το ερώτημα που μπαίνει είναι πως γνωρίζει το φωτόνιο ότι είναι ανοικτές και οι δύο σχισμές ώστε να μηδενίζει την πιθανότητα να βρεθεί στη θέση Γ; Είναι δυνατό να περνάει ταυτόχρονα και από τις δύο σχισμές, δηλαδή να διαχωρίζεται και μετά να επανενώνεται ώστε να βρεθεί σε κάποια συγκεκριμένη θέση στο διάφραγμα;
Το ακόμη πιο περίεργο είναι ότι αν με κάποια πειραματική διάταξη επιχειρήσουμε να προσδιορίσουμε από ποια σχισμή πέρασε το φωτόνιο, τότε το φαινόμενο της συμβολής καταστρέφεται και η πιθανότητα να βρούμε το ηλεκτρόνιο στο Γ γίνεται πλέον διάφορη του μηδενός.

Η ερμηνεία που δίνει ο Φάινμαν στο φαινόμενο είναι εξωφρενική, αλλά τα πειραματικά δεδομένα την επαληθεύουν με μεγάλη ακρίβεια. Ο Φάινμαν λοιπόν ισχυρίζεται ότι το φωτόνιο **μπορεί ν' ακολουθήσει οποιαδήποτε δυνατή διαδρομή**. Μπορεί δηλαδή εν προκειμένω ν' ακολουθήσει και τη διαδρομή ΑΓ και τη διαδρομή ΒΓ. Για να βρούμε την πιθανότητα να βρεθεί το φωτόνιο (ή και οποιαδήποτε άλλο σωματίδιο) στη θέση Γ εργαζόμαστε ως εξής. Φανταζόμαστε για την κάθε διαδρομή ένα περιστρεφόμενο διάνυσμα. Το διάνυσμα αυτό περιστρέφεται με σταθερή γωνιακή ταχύτητα. Έτσι το πόσο περιστράφηκε φθάνοντας από τη θέση Α στη θέση Γ εξαρτάται από το χρόνο που χρειάστηκε για να καλύψει αυτή τη διαδρομή. Για το φωτόνιο αυτός ο χρόνος είναι ΑΓ/c. Αφού σχεδιάσουμε τα διανύσματα στη θέση Γ για όλες τις δυνατές διαδρομές, τα προσθέτουμε διανυσματικά. Το μέτρο της συνισταμένης, δίνει την πιθανότητα να βρούμε το φωτόνιο στη θέση Γ. Στη προκειμένη περίπτωση η πιθανότητα για το σημείο Γ μηδενίζεται γιατί τα δύο διανύσματα που αντιστοιχούν στις δύο δυνατές διαδρομές ΑΓ και ΒΓ είναι αντίθετα.



Ο ίδιος ο Φάινμαν είπε ότι δεν γνωρίζει για ποιο λόγο η φύση λειτουργεί με έναν τόσο παράξενο τρόπο. Στη συνέχεια ανέφερε ότι αυτό δεν θα πρέπει να μας απασχολεί ιδιαίτερα, αφού αυτό που θα πρέπει να μα ενδιαφέρει και που μπορούμε να διερευνήσουμε είναι το **πώς** λειτουργεί η φύση και όχι το **γιατί**.

Η κατάσταση προσομοιάζεται με έναν παρατηρητή που παρακολουθεί διάφορες παρτίδες σκακιού. Μετά από πολλές παρατηρήσεις θα μπορέσει να ανακαλύψει τους κανόνες κίνησης ενός ίππου πάνω στη σκακιέρα. Ποτέ όμως δεν θα καταλάβει γιατί κινείται ο ίππος με αυτόν τον περίεργο τρόπο.

ΑΝΑΦΟΡΕΣ:

1. (1162) What is the Schrödinger Equation? A basic introduction to Quantum Mechanics – YouTube
2. (1162) Schrödinger equation for hydrogen – YouTube
3. (1162) Linearity and nonlinear theories. Schrödinger's equation – YouTube
4. (1162) Schrodinger Equation. Get the Deepest Understanding. – YouTube
5. Προχωρημένα εργαστήρια Φυσικής. Πανεπιστήμιο Κρήτης Ελευθέριος Ηλιόπουλος
6. Ανοικτά μαθήματα κβαντομηχανικής. Πανεπιστήμιο Πατρών. Δημήτρης Κονταρίδης
7. Frans R., Sum R. (Μαθησιακοί Σταθμοί του Quantum SpinOff (2015). Φαινόμενο Σήραγγας και Σαρωτικό Μικροσκόπιο Σήραγγας (ΣΜΣ). Centre for Subject Matter Teaching KHLim, Diepenbeek Belgium – Nanosurf AG, Liestal
8. Ηλεκτρονική δομή των ατόμων. Νίκος Μπεκιάρης
9. Κβαντομηχανική 1 και 2. Στέφανος Τραχανάς
10. Κβαντική Φυσική. Αμαλία Α Κώνστα.
11. Κβαντική Φυσική. Ανδρέας Τερζής. Πανεπιστήμιο Πατρών.
12. Κατανομή Μάξγουελ – Μπολτσμαν. Φιορεντίνος Γιάννης
13. Εισαγωγή στη σύγχρονη φυσική. Α Ζδέτσης
14. Κβαντική Θεωρία. Αναστόπουλος
15. Το φάντασμα της όπερας. Στέφανος Τραχανάς.
16. Βασικές έννοιες κβαντομηχανικής. Σφάελος Ιωάννης. Πανεπιστήμιο Πατρών
17. Διπλωματική. Διδασκαλίας βασικών εννοιών κβαντικής φυσικής. Δημήτρης Νικολουδάκης. Ανοικτό Πανεπιστήμιο.
18. Θέματα κβαντομηχανικής. Φροντηστηριακά μαθήματα Μοίρα.
19. Κβαντική μηχανική. Λαχανάς. Πανεπιστήμιο Αθηνών.
20. Σημειώσεις κβαντομηχανικής. Σ.Η Μάσεν. Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης