

Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική

Υπόθεση de Broglie, μοντέλο του Bohr

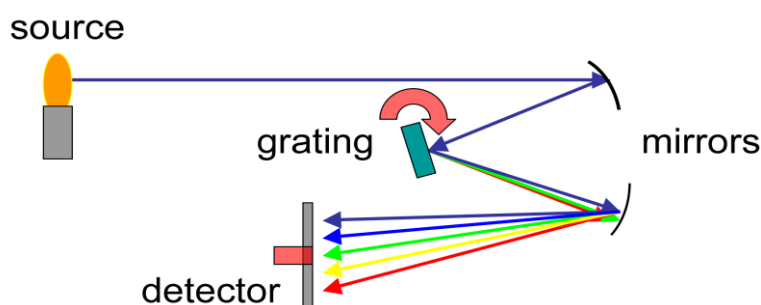


Π. Φωτόπουλος
2019

Στην ενότητα αυτή, θα πάρουμε αφορμή από την μελέτη της δομής του ατόμου του Υδρογόνου για να δούμε ότι στα μικρά συστήματα π.χ. μόρια, νανοσωματίδια η ενέργεια των ηλεκτρονίων παίρνει διακριτές τιμές. Η παρατήρηση αυτή θα αξιοποιηθεί αργότερα στην μελέτη της αγωγιμότητας μέσα από πολύ μικρούς αγωγούς. Επιπλέον, θα συζητηθεί η υπόθεση του de Broglie: Τα ηλεκτρόνια ενός καθοδικού σωλήνα συμπεριφέρονται σαν σωματίδια με φορτίο $1,6 \times 10^{-19} \text{Cb}$ και μάζα $9,1 \times 10^{-31} \text{kg}$. Αντίθετα, ένα ηλεκτρόνιο που αλληλεπιδρά με άλλα σωματίδια όπως ηλεκτρόνια, πυρήνες ατόμων, ή άτομα ενός κρυστάλλου, συμπεριφέρεται σαν κύμα του οποίου μάλιστα, μπορούμε να υπολογίσουμε το μήκος κύματος λ.

Δεδομένα από την φασματοσκοπία αερίων.

Το φως από σωλήνες αερίων μελετήθηκε εξαντλητικά στα τέλη του 19^{ου} και τις αρχές του 20^{ου} αιώνα. Η ανάλυση του φωτός μπορεί να γίνει με ένα πρίσμα. Όταν κανείς θέλει να γνωρίζει ποια μήκη κύματος περιέχονται στο φως μιας φωτεινής πηγής καθώς και την σχετική συνεισφορά (ένταση) κάθε μήκους κύματος στο συνολικό φως, τότε μπορεί να χρησιμοποιήσει ένα φασματόμετρο.



Σχήμα 1: Αρχή λειτουργίας του φασματόμετρου

Τα φασματόμετρα λειτουργούν ως εξής: το φως από μια φωτεινή πηγή συλλέγεται από ένα φακό και εισέρχεται σε ένα σκοτεινό κουτί που είναι το φασματόμετρο. Στη συνέχεια κατευθύνεται μέσω ενός καθρέπτη σε ένα στρεφόμενο αναλυτή. Καθώς ο αναλυτής στρέφεται, το κάθε μήκος κύματος περνάει διαδοχικά μπροστά από μια μικρή σχισμή και συλλέγεται από ένα φωτοπολλαπλασιαστή. Ο φωτοπολλαπλασιαστής καταγράφει μετατρέπει τον αριθμό φωτονίων σε ηλεκτρικό ρεύμα και έτσι καταγράφει πόσο ισχυρό είναι το φως για κάθε μήκος κύματος.

Το φως από σωλήνες αερίων μελετήθηκε εξαντλητικά στα τέλη του 19^{ου} και τις αρχές του 20^{ου} αιώνα. Στους σωλήνες αερίων, ένα αέριο εισάγεται σε γυάλινο σωλήνα στα άκρα του οποίου εφαρμόζεται υψηλή τάση. Τα άτομα του αερίου ιονίζονται λόγω της υψηλής τάσης και ο σωλήνας εκπέμπει φως. Το χρώμα του φωτός εξαρτάται από το αέριο που περιέχει ο σωλήνας.

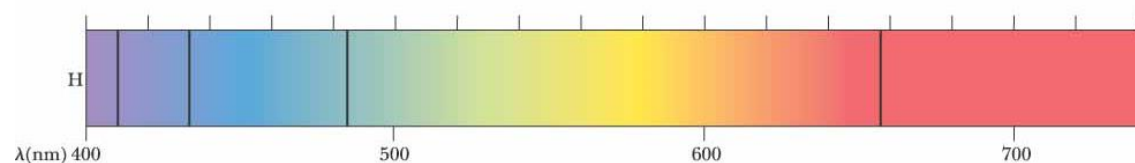
Στις αρχές του εικοστού αιώνα τα πειράματα του Rutherford οδήγησαν στο συμπέρασμα ότι σχεδόν όλη μάζα του ατόμου θα πρέπει να βρίσκεται συγκεντρωμένη σε ένα μικρό θετικά φορτισμένο πυρήνα. Σαν συνέπεια αυτής της εικόνας η φυσικοί άρχισαν να σκέφτονται το άτομο σαν μία μικρογραφία του ηλιακού συστήματος. Όμως η εικόνα αυτή είχε ένα εγγενές πρόβλημα: Εάν το ηλεκτρόνιο κάνει κυκλική κίνηση τότε θα έχει κεντρομόλο επιτάχυνση και η φυσικοί

ήξεραν ότι ένα φορτίο που επιταχύνεται εκπέμπει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία. Με βάση αυτό το απλό επιχείρημα το ηλεκτρόνιο θα έχανε διαρκώς ενέργεια και τελικά τα έπεφτε πάνω στον πυρήνα. Όμως ήταν γνωστό ότι τα άτομα ήταν σταθερά και τα πειράματα είχαν δείξει ότι δεν ακτινοβολούν σε οποιοδήποτε αλλά μόνο σε συγκεκριμένα μήκη κύματος τα οποία ήταν χαρακτηριστικά για το κάθε είδος ατόμου.



Σχήμα 2: Το φάσμα εκπομπής του ατόμου του Υδρογόνου στο ορατό.

Για παράδειγμα το φάσμα εκπομπής του Υδρογόνου στο ορατό περιλαμβάνει 4 γραμμές στα 410, 434, 486 και 657nm περίπου. Το φάσμα εκπομπής του Υδρογόνου περιέχει και άλλες γραμμές στο υπεριώδες και το εγγύς υπέρυθρο αλλά εδώ αναφερόμαστε μόνο στο μέρος εκείνο του φάσματος που είναι ορατό. Το φάσμα εκπομπής που φαίνεται στο σχήμα 2 προκύπτει όταν το υδρογόνο βρίσκεται μέσα σε ένα σωλήνα αερίου σε μικρή πίεση. (οπότε τα άτομα υδρογόνου δεν συγκρούονται μεταξύ τους) και τα παρατηρούμενα μήκη κύματος αντιστοιχούν σε φωτόνια που εκπέμπονται όταν το ηλεκτρόνιο πηδάει από μια διεγερμένη σε μια χαμηλότερη στάθμη.



Σχήμα 3: Το φάσμα απορρόφησης του ατόμου του Υδρογόνου στο ορατό.

Το φάσμα απορρόφησης παρουσιάζει σκοτεινές γραμμές στα ίδια μήκη κύματος με το φάσμα εκπομπής. Το φάσμα εκπομπής προκύπτει όταν περνάει λευκό φως μέσα από μια ποσότητα υδρογόνου που βρίσκεται σε χαμηλή πίεση. Τα άτομα του Υδρογόνου απορροφούν το φως στα συγκεκριμένα μήκη κύματος και το ηλεκτρόνιο πηδάει από μια χαμηλή σε μια υψηλότερη στάθμη. Κανείς μπορεί να ρωτήσει: αφού το ηλεκτρόνιο τελικά θα επιστρέψει στην χαμηλή στάθμη εκπέμποντας ένα φωτόνιο ίδιου μήκους κύματος, γιατί εμφανίζονται σκοτεινές γραμμές; Η απάντηση είναι ότι είναι εξαιρετικά απίθανο το φωτόνιο που εκπέμπεται κατά την αποδιέγερση, να έχει την ίδια κατεύθυνση με αυτό που προκάλεσε την διέγερση και για τον λόγο αυτό σχηματίζονται σκοτεινές γραμμές δηλαδή απουσία φωτός.

Το φάσμα εκπομπής ενός αερίου είναι κάτι σαν το δακτυλικό του αποτύπωμα. Η φασματοσκοπία, πριν ο Bohr διατυπώσει την θεωρία του, είχε καταγράψει τα φάσματα από διάφορα άλλα αέρια όπως ατμοί υδραργύρου νέον κλπ. Η φασματοσκοπία αερίων είχε σημειώσει μεγάλη πρόοδο από τα μέσα του 19^{ου} αιώνα, φυσικά η δουλειά εδώ ήταν πολύ πιο δύσκολη σε σύγκριση με το φάσμα εκπομπής του μέλανος σώματος, γιατί τα φάσματα εκπομπής των αερίων δεν ήταν

συνεχή και τα αποτελέσματα δημιουργούσαν μια εικόνα χάους. Ευτυχώς παρά την χαοτική τους ποικιλία βρέθηκε ότι διέπονται από έναν εμπειρικό νόμο ο οποίος διατυπώθηκε από τον Balmer στην προσπάθεια του να εξηγήσει τις φασματικές γραμμές του ατόμου του υδρογόνου το οποίο ήταν το απλούστερο άτομο και είχε μελετηθεί εξαντλητικά. Έλειπε όμως μια εξήγηση. Οι μέχρι τότε φυσικές θεωρίες έδειχναν ότι η κλασική προσέγγιση παρουσίαζε σοβαρά προβλήματα όταν χρησιμοποιείται για την ερμηνεία της συμπεριφοράς του μικρόκοσμου και ειδικότερα των ατόμων.

Το ατομικό μοντέλο του Bohr.

Το ατομικό μοντέλο του Bohr απεικονίζει το άτομο σαν ένα μικρό θετικά φορτισμένο πυρήνα γύρω από τον οποίο κινούνται τα ηλεκτρόνια σε κυκλικές τροχιές με μια μορφή που μοιάζει με το ηλιακό σύστημα με την διαφορά ότι η δύναμη της παγκόσμιας έλξης έχει αντικατασταθεί από την δύναμη ηλεκτροστατικής έλξης. Το μοντέλο αυτό εισήχθη για να εξηγήσει το φάσμα του ατόμου του υδρογόνου. Το μοντέλο του Bohr βασίζεται στις εξής παραδοχές:

1. Τα ηλεκτρόνια κινούνται σε κυκλικές τροχιές που έχουν συγκεκριμένες ακτίνες. Όταν ένα ηλεκτρόνιο βρίσκεται επάνω σε μία ατομική τροχιά τότε έχει μία συγκεκριμένη ενέργεια. Η ενέργεια μιας τροχιάς ονομάζεται ενεργειακό επίπεδο. Εφόσον ένα ηλεκτρόνιο που βρίσκεται σε μια τροχιά έχει μια συγκεκριμένη ενέργεια σημαίνει πως κατά την κίνηση του πάνω σ' αυτήν την τροχιά δεν χάνει ενέργεια.
2. Τα ηλεκτρόνια μεταβαίνουν από την μία τροχιά στην άλλη εκπέμποντας η απορροφώντας ενέργεια που είναι ίση με την διαφορά των ενεργειών των δύο σταθμών.
3. Η Τρίτη παραδοχή του μοντέλου του Bohr δεν γίνεται εύκολα αποδεκτή και θα πρέπει να σημειωθεί ότι ο ίδιος ο Bohr την επινόησε σκεπτόμενος αντίστροφα με βάση τα πειραματικά δεδομένα της φασματοσκοπίας. Μια πιο φυσιολογική ερμηνεία αυτής της παραδοχής δίνεται από την εξίσωση του De Broglie. Η Τρίτη παραδοχή του μοντέλου του Bohr λέει ότι η στροφορμή του ηλεκτρονίου στο άτομο του Υδρογόνου, παίρνει τιμές που είναι ακέραια πολλαπλάσια μιας συγκεκριμένης ποσότητας. $L = n \cdot \hbar$

Με βάση τις παραδοχές του Bohr θα μπορέσουμε να ερμηνεύσουμε το φάσμα του ατόμου του υδρογόνου αλλά και να φτιάξουμε μία προσέγγιση που δίνει μια πειστική εικόνα για την δομή του ατόμου του υδρογόνου. Αυτό που μας ενδιαφέρει είναι να βρούμε την ενέργεια του ηλεκτρονίου που βρίσκεται επάνω σε μία τροχιά.

Αφού το ηλεκτρόνιο κινείται γύρω από τον πυρήνα θα υπάρχει ένας όρος που εκφράζει την κινητική ενέργεια. $K = \frac{1}{2} m v^2$

Με δεδομένο ότι ο πυρήνας και το ηλεκτρόνιο είναι φορτισμένα σωμάτια θα υπάρχει ένας δεύτερος όρος που περιγράφει την δυναμική ενέργεια. $U = -k \frac{e^2}{r}$

$$\text{Οπότε } E_{ολ} = K + U = \frac{1}{2}mv^2 - k\frac{e^2}{r} \quad (1)$$

Μια δεύτερη εξίσωση που χρησιμοποιείται στην μελέτη της κίνησης του ηλεκτρονίου γύρω από την πυρήνα, αλλά και στην μελέτη της κίνησης των πλανητών, λέει ότι η ελκτική δύναμη πυρήνα ηλεκτρονίου παίζει τον ρόλο της κεντρομόλου δύναμης.

$$F_k = F_{Cb} \Rightarrow \frac{mv^2}{r} = k\frac{e^2}{r^2} \quad (2)$$

Από την εξίσωση αυτή απλοποιώντας την ακτίνα από τον παρονομαστή και διαιρώντας τα δύο μέλη με το 2 προκύπτει ότι:

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{1}{2}k\frac{e^2}{r}$$

Από την έκφραση αυτή φαίνεται ότι η κινητική ενέργεια είναι ίση με το μισό της δυναμικής ενέργειας.

$$K = \frac{mv^2}{2} = -\frac{1}{2}U$$

Εισάγοντας το αποτέλεσμα αυτό στην αρχική εξίσωση (1) της ενέργειας βρίσκουμε ότι αυτή είναι ίση με:

$$E_{ολ} = K + U = -\frac{1}{2}U + U = \frac{1}{2}U, \text{ αντικαθιστώντας την δυναμική ενέργεια προκύπτει}$$

$$\text{ότι } E_{ολ} = \frac{1}{2}U = -\frac{1}{2}k\frac{e^2}{r} \quad (3)$$

Η έκφραση αυτή αποτελεί μια πρόοδο σε σχέση με την αρχική εξίσωση (1) γιατί η αρχική εξίσωση περιείχε δύο άγνωστες ποσότητες την ταχύτητα και την ακτίνα ενώ η έκφραση στην οποία φτάσαμε δίνει την ενέργεια του ηλεκτρονίου συναρτήσει της ακτίνας μόνο! Οι θεωρίες του κλασσικού ηλεκτρομαγνητισμού δεν μπορούν να προχωρήσουν τα πράγματα παραπέρα.

Ο Bohr κατόρθωσε να προσδιορίσει ακριβώς την ενέργεια των ηλεκτρονίων που περιστρέφονται γύρω από τον πυρήνα εισάγοντας την 3^η παραδοχή του μοντέλου του σύμφωνα με την οποία, η στροφορμή του ηλεκτρονίου $L = n \cdot \hbar$ παίρνει τιμές που είναι ακέραια πολλαπλάσια μιας συγκεκριμένης ποσότητας όπου η σταθερά του Planck διαιρεμένη δια 2π . $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,055 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{sec}$

δηλαδή η στροφορμή μπορεί να πάρει τις τιμές: $1,055 \times 10^{-34}$ ή $2,11 \times 10^{-34}$ ή $3,165 \times 10^{-34} \text{ Joule} \cdot \text{sec κ.ο.κ}$

Το αδύνατο σημείο του μοντέλου του Bohr ήταν η 3^η συνθήκη του. Και αυτό γιατί η απαίτηση που πρόβαλε, δεν ήταν κατανοητή, δεν πήγαζε σαν συνέπεια κάποιων συλλογισμών. Σαν μοντέλο τα πήγαινε καλά στην ποσοτική πρόβλεψη αλλά έπασχε στον τομέα της ερμηνείας. 'Γιατί η στροφορμή να είναι κβαντισμένη;'. Η απάντηση ήρθε περίπου 10 χρόνια μετά με την διατύπωση της υπόθεσης του Louis de Broglie.

Η ερμηνεία του Bohr για την εμπειρική σχέση του Balmer που συνέδεε τις συχνότητες των γραμμών του φάσματος του υδρογόνου, ήταν σίγουρα εντυπωσιακή αλλά το μοντέλο που πρότεινε δεν ήταν τόσο πειστικό όπως παραδεχόταν και ο ίδιος. Για παράδειγμα ένα ηλεκτρόνιο που μεταβαίνει από την 3^η στην 1^η στοιβάδα εκπέμπει ακτινοβολία που έχει ενέργεια ίση με $E_3 - E_1$. Όπως χαρακτηριστικά ανέφερε ο Rutherford σε ένα γράμμα του στον Bohr 'Πως αποφασίζει ένα ηλεκτρόνιο την συχνότητα στην οποία πρόκειται να ταλαντωθεί όταν περνάει από μία ενεργειακή κατάσταση σε μία άλλη; είναι σαν αν γνωρίζει εκ των προτέρων που πρόκειται να σταματήσει'

Σε ένα πείραμα φασματοσκοπίας που έκανε ο Alfred Fowler χρησιμοποιώντας ένα σωλήνα που περιείχε υδρογόνο και ήλιο βρήκε ότι κάποιες από τις φασματικές γραμμές δεν μπορούσαν να περιγραφούν από την εμπειρική σχέση του Balmer. Σε απάντηση αυτού του επιχειρήματος ο Bohr είπε ότι το ιονισμένο άτομο του ηλίου περιέχει ένα ηλεκτρόνιο που περιστρέφεται γύρω από έναν πυρήνα που περιέχει δύο πρωτόνια και για τον λόγο αυτόν το e^2 παράγοντας e^2 στην δυναμική ενέργεια θα πρέπει να αντικατασταθεί με το $2e^2$. Πράγματι η ερμηνεία αυτή έδειξε να απαντάει στο επιχείρημα του Fowler. Επιπλέον, ο Bohr προσέθεσε ότι στο μοντέλο του θα έπρεπε να χρησιμοποιείται όχι μόνο η μάζα του πυρήνα αλλά να συμπεριλαμβάνεται στη ανάλυση και η μάζα του υδρογόνου χρησιμοποιώντας την προσέγγιση της ανηγμένης μάζας. Αυτές οι απαντήσεις του Bohr, αύξησαν την εμπιστοσύνη των επιστημόνων προς την θεωρία του. Ο ίδιος ο Einstein θεώρησε την απάντηση στο επιχείρημα του Fowler σαν απόδειξη ότι το μοντέλο του Bohr είναι σε σωστό δρόμο.

Όπως τόνιζε ο ίδιος ο Bohr το μοντέλο του δεν εξηγούσε τα πράγματα όπως έκανε η κλασική μηχανική ή ο ηλεκτρομαγνητισμός. Αυτό που έκανε ήταν ότι συνέδεε μεταξύ τους φαινόμενα τα οποία μέχρι πρότινος εθεωρούντο ασύνδετα και με τον τρόπο αυτόν έκανε ευκολότερη την μελλοντική έρευνα. Έδειξε ότι ο εμπειρικός τύπος του Balmer, η σταθερά του Planck και το φορτίο του πυρήνα του ατόμου συνδέονται μεταξύ τους μέσα από την αρχή της κβάντωσης της στροφορμής. Επιπλέον το μοντέλο έκανε προβλέψεις για το φάσμα του ιονισμένου ατόμου του ηλίου οι οποίες συμφωνούσαν με το πείραμα και έτσι επιβεβαίωναν ότι το μοντέλο είχε δίκιο. Παρ' όλα αυτά θα πρέπει να σημειωθεί ότι το μοντέλο δεν μπόρεσε να εξηγήσει τις φασματικές γραμμές του ουδέτερου ατόμου του ηλίου. Και αυτό γιατί το μοντέλο του δεν μπορούσε να πάρει υπόψη την αλληλεπίδραση μεταξύ των δύο ηλεκτρονίων. Ήταν ένα μοντέλο που δούλευε καλά μόνο για υδρογονοειδή άτομα. δηλ. άτομα που ο πυρήνας μπορούσε να περιέχει πολλά πρωτόνια όμως το ηλεκτρόνιο έπρεπε να είναι μόνο ένα.

Η υπόθεση de Broglie.

Παρά τις προσπάθειες των γερμανών και της σχολής της Κοπεγχάγης η πρόοδος στην κατανόηση του ατόμου ήρθε από έναν διδακτορικό φοιτητή στο Παρίσι. Ο Louis de Broglie εστίασε την προσοχή του στα δύο μεγάλα επιτεύγματα του Einstein: Την θεωρία της σχετικότητας και την κβάντωση του φωτός. Αναρωτιόταν αν μπορεί να υπάρχει μία σύνδεση ανάμεσα σε αυτές τις δύο. Ο de Broglie είχε την άποψη πως η μάζα ηρεμίας του φωτονίου δεν είναι μηδενική αλλά έχει κάποια πολύ μικρή πεπερασμένη τιμή. Η ιδέα αυτή του φωτονίου σαν ένα σωματίδιο με μάζα ήταν λανθασμένη αλλά αποδείχτηκε ιδιαίτερα χρήσιμη γιατί οδήγησε τον de Broglie στη σκέψη ότι και το ηλεκτρόνιο που επίσης έχει μικρή μάζα θα μπορούσε να συμπεριφέρεται σαν κύμα. Η προφανής αντίδραση στην εικόνα του ηλεκτρονίου σαν κύμα ήταν η εξής: Εάν τα ηλεκτρόνια είναι κύματα γιατί τότε δεν παρατηρούμε τα συνηθισμένα φαινόμενα των κυμάτων όπως η περίθλαση. Στην αντίδραση αυτή υπήρχε η εξής απάντηση: το μήκος κύματος των ηλεκτρονίων είναι τόσο μικρό ώστε τα φαινόμενα περίθλασης δεν είναι δυνατόν να παρατηρηθούν. Όπως έλεγε ο ίδιος ο de Broglie η κυματική φύση του φωτός δεν γίνεται αντιληπτή στην καθημερινή ζωή όπου κυριαρχεί η γεωμετρική οπτική. Υποπετεύθηκε πως η τροχιά των ηλεκτρονίων σε ένα καθοδικό σωλήνα ήταν κάτι ανάλογο με την ευθύγραμμη διάδοση του φωτός όταν αυτή γίνεται σε αποστάσεις πολύ μεγαλύτερες από το μήκος κύματος. Παρ' όλα αυτά οι κυματικές ιδιότητες του ηλεκτρονίου μπορούν να φανούν στο ατομικό επίπεδο.

Το φαινόμενο της κβάντωσης μιας φυσικής ποσότητας δεν ήταν καινούριο όταν γινόταν η μελέτη του ατόμου του υδρογόνου. Συγκεκριμένα, σε ένα στάσιμο κύμα η συχνότητα και η ενέργεια μπορούν να πάρουν μόνο κάποιες διακριτές τιμές. Αν λοιπόν κάνουμε την παράτολμη υπόθεση ότι το ηλεκτρόνιο που βρίσκεται γύρω από τον πυρήνα έχει κυματικό χαρακτήρα βλέπουμε να ανοίγει ένας δρόμος για την εξήγηση της κβάντωσης της συχνότητας και της ενέργειας.

Εάν τα ηλεκτρόνια είναι κύματα και η ενέργεια που έχουν επάνω σε κάθε τροχιά είναι σταθερή, τότε ο μοναδικός διαθέσιμος τρόπος να είναι το ηλεκτρόνιο κύμα και να έχει κβαντισμένη ενέργεια είναι το ηλεκτρόνιο να είναι ένα στάσιμο κύμα που σχηματίζεται επάνω στην τροχιά. Διαφορετικά το κύμα του ηλεκτρονίου θα δημιουργούσε με τον εαυτό του φαινόμενα συμβολής. Ας υποθέσουμε ότι ένα ηλεκτρόνιο έχει μήκος κύματος λ και κινείται σε κυκλική τροχιά ακτίνας r τότε εάν σχηματίζεται στάσιμο κύμα θα πρέπει η τροχιά να χωράει ένα ακέραιο πλήθος από μήκη κύματος δηλαδή $2\pi r = n\lambda$. Η απαίτηση για δημιουργία στάσιμου κύματος που πρότεινε ο de Broglie οδηγεί όπως θα δούμε στην 3^η συνθήκη του Bohr για τον κβαντισμό της στροφορμής.

Η ερμηνεία που έδωσε ο Einstein στο φ-ηλ. φαινόμενο, καθιέρωσε την άποψη πως η ενέργεια μιας φωτεινής δέσμης προκύπτει από το άθροισμα της ενέργειας στοιχειωδών ποσοτήτων που την συνιστούν και ονομάζονται φωτόνια. Επιπλέον αφού το φωτόνιο έχει μηδενική μάζα ηρεμίας, η θεωρία της σχετικότητας λέει ότι

θα έχει ορμή ίση με $p = \frac{h}{\lambda}$. Ο de Broglie έθεσε το εξής ερώτημα: Εάν το φως που

είναι ένα κύμα παρουσιάζει εντοπισμένη συμπεριφορά, δηλαδή συμπεριφέρεται σαν σωματίδιο, γιατί να μην παρουσιάζουν και τα ηλεκτρόνια που είναι σωματίδια χαρακτηριστικά κύματος; Έτσι λοιπόν διαμορφώθηκε η άποψη ότι η ύλη έχει κυματικές και αδρανειακές (αυτές που συνήθως λέγονται σωματιδιακές) ιδιότητες. Στα μεγάλα σώματα οι κυματικές ιδιότητες δεν γίνονται αντιληπτές οπότε κυριαρχεί ο αδρανειακός χαρακτήρας. Τα μεγάλα σώματα περιγράφονται από τους νόμους του Νεύτωνα και του κλασσικού ηλεκτρομαγνητισμού. Αντίθετα στο μοριακό ή ατομικό επίπεδο οι κυματικές ιδιότητες αναδεικνύονται εντονότερα. Με βάση αυτό τον συλλογισμό τα ηλεκτρόνια των ατόμων παρουσιάζουν το εξής μήκος κύματος $p = \frac{h}{\lambda}$. Η εξίσωση του de Broglie ισχύει όχι μόνο για τα ηλεκτρόνια αλλά και για

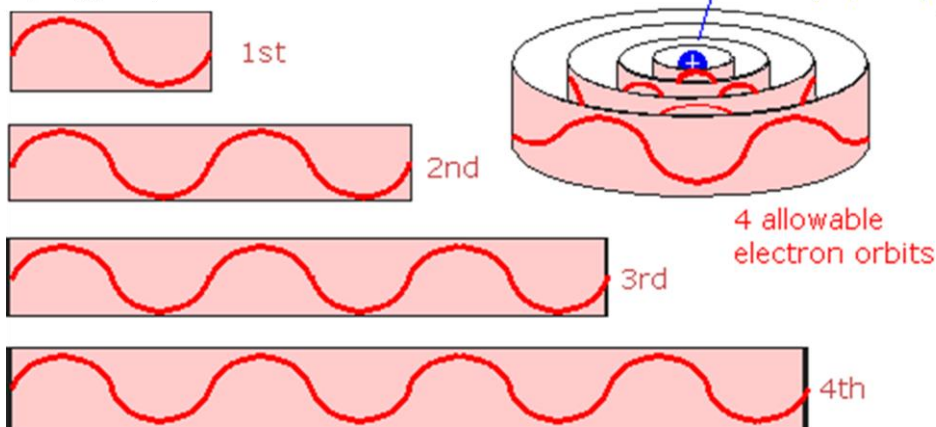
σώματα μεγαλύτερης μάζας μόνο που σε αυτή την περίπτωση οι κυματικές ιδιότητες δεν είναι παρατηρήσιμες μιας και η μεγάλη μάζα κάνει το μήκος κύματος να είναι πάρα πολύ μικρό. Ας δούμε λοιπόν το άπλωμα του ηλεκτρονίου-κύματος επάνω στις 4 πρώτες τροχιές. Στην πρώτη χωράει ένα ακριβώς μήκος κύματος. Στην δεύτερη 2 μήκη κύματος κ.ο.κ. οπότε προκύπτει ότι η περιφέρεια $2\pi r$ καλύπτεται από ένα ακέραιο πλήθος μηκών κύματος $2\pi r = n \cdot \lambda$. Το μήκος κύματος του ηλεκτρονίου είναι $\lambda = \frac{h}{p}$. Εισάγοντας την έκφραση αυτή στην πρώτη εξίσωση και αντικαθιστώντας την ορμή με το γινόμενο μάζας επί την ταχύτητα προκύπτει ότι:

$$\left. \begin{array}{l} 2\pi r = n \cdot \lambda \\ \lambda = \frac{h}{p} \end{array} \right\} \Rightarrow 2\pi r = n \cdot \frac{h}{mv} \Rightarrow m \cdot v \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi} \Rightarrow L = n \cdot \hbar$$

Ας επιστρέψουμε τώρα στο μοντέλο του Bohr. Για να μπορέσει κανείς να υπολογίσει την ενέργεια του ηλεκτρονίου είναι να χρησιμοποιήσει την 3^η συνθήκη του Bohr σύμφωνα με την οποία:

$$L = n \cdot \hbar \text{ ή } mvr = n \cdot \hbar \quad (4)$$

περιφέρεια της
τροχιάς των e



(This picture is adapted from p. 579 of "Conceptual Physics" by Paul G. Hewitt)

Σχήμα 4: Το κύμα του ηλεκτρονίου απλωμένο επάνω στις διάφορες τροχιές

Από την εξίσωση (2) μπορεί κανείς να λύσει ως προς την ταχύτητα οπότε προκύπτει ότι:

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

Αντικαθιστώντας στην ισότητα (4) την ταχύτητα προκύπτει μία σχέση που περιέχει μόνο την ακτίνα και μερικές σταθερές

$$m \sqrt{\frac{k e^2}{m r}} r = n \cdot \hbar \text{ λύνοντας ως προς } r \text{ προκύπτει ότι:}$$

$$r = n^2 \frac{\hbar^2}{k m e^2}$$

Οι ποσότητες που περιέχονται στο κλάσμα είναι φυσικές σταθερές

$$k = 9 \times 10^9 \frac{Nt \cdot m^2}{Cb^2}$$

$$e = 1,6 \times 10^{-19} Cb$$

$$\hbar = 1,05 \times 10^{-34} \text{ Joule} - \text{sec}$$

$$m = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kgr}$$

$$\frac{\hbar^2}{k m e^2} = 5,3 \times 10^{-11} m = 0,53 \overset{o}{\text{Å}}$$

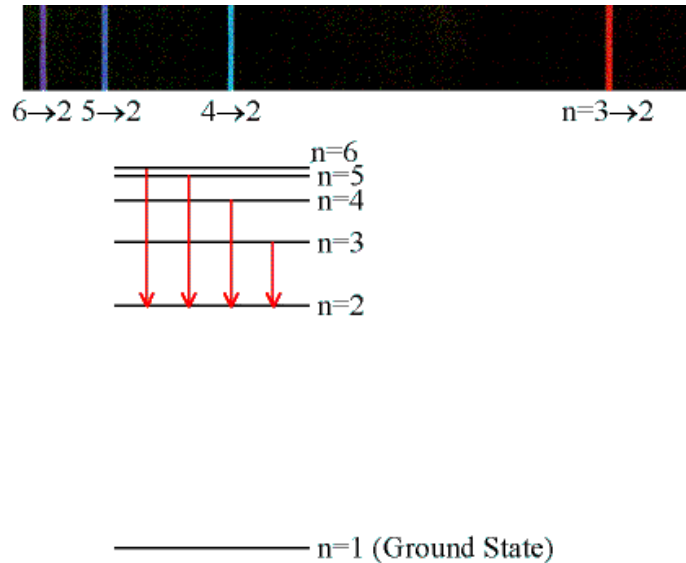
$$\text{Την ακτίνα την γράφουμε με τη μορφή } r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{k m e^2} = n^2 \times 0,53 \overset{o}{\text{Å}}.$$

Από την σχέση αυτή συνάγεται ότι η ακτίνα της δεύτερης τροχιάς είναι τετραπλάσια από αυτήν της πρώτης και της τρίτης τροχιάς είναι εννέα φορές μεγαλύτερη κ.ο.κ. Εισάγοντας την τιμή της ακτίνας στην εξίσωση της ενέργειας προκύπτει ότι

$$E = \frac{-(k e^2)^2 m}{2 \hbar^2 \cdot n^2}.$$

Η ποσότητα $\frac{-(k e^2)^2 m}{2 \hbar^2}$ είναι ίση με $-13,6 \text{ eV}$ οπότε η ενέργεια των διαφόρων

στοιβάδων γράφεται με τη μορφή $E_n = \frac{-1}{n^2} \times 13,6 \text{ eV}$. Οι τιμές της ενέργειας των ηλεκτρονίων ονομάζονται ηλεκτρονικές καταστάσεις.



Σχήμα 5: Οι γραμμές του φάσματος του ατόμου Υδρογόνου οφείλονται σε μεταβάσεις του ηλεκτρονίου από υψηλότερες καταστάσεις σε χαμηλότερες, δηλαδή από καταστάσεις μεγαλύτερης ενέργειας σε καταστάσεις μικρότερης ενέργειας.

Ερμηνεία των αποτελεσμάτων φασματοσκοπίας με βάση το μοντέλο του Bohr.

Με βάση τις εξισώσεις του μοντέλου του Bohr μπορεί κανείς να κοιτάξει και πάλι τα αποτελέσματα των πειραμάτων φασματοσκοπίας. Εάν έχουμε n ενεργειακές στάθμες τότε το πλήθος των μεταβάσεων θα είναι $\frac{n(n-1)}{2}$. Η μετάβαση από την

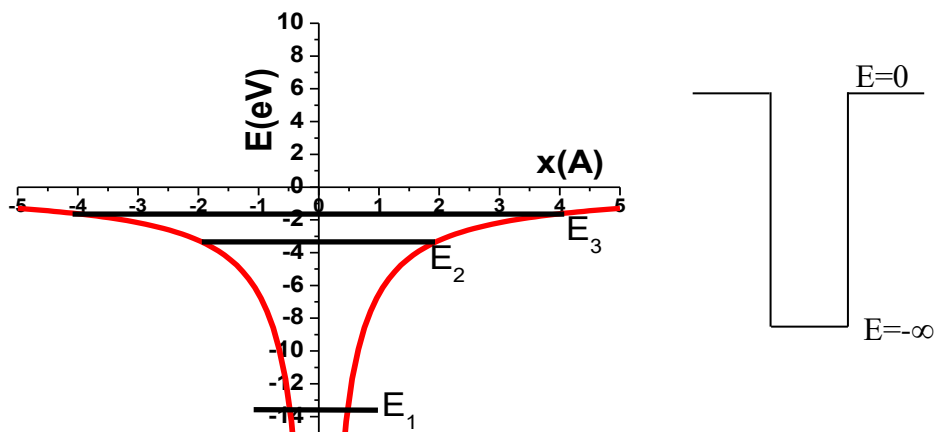
θεμελιώδη στάθμη στην πρώτη διεγερμένη είναι δυνατή με την απορρόφηση ενέργειας ίσης με την διαφορά των δύο σταθμών. Δηλαδή $\Delta E = E_2 - E_1 = -13,6 + 3,4 = -10,2 \text{ eV}$. Αυτό σημαίνει ότι για να διεγερθεί ένα άτομο υδρογόνου χρειάζεται ενέργεια τουλάχιστον 10,2 eV. Η τάξη μεγέθους των ενεργειών που ανταλλάσσονται κατά τις θερμικές κρούσεις των ατόμων σε θερμοκρασία δωματίου είναι 26 meV, ο αριθμός αυτός είναι πολύ μικρότερος από τα 10,2eV για τον λόγο αυτό είναι εξαιρετικά απίθανο να συναντήσει κανείς ένα άτομο υδρογόνου που βρίσκεται σε ένα σκοτεινό κουτί να βρίσκεται σε κάποια άλλη ενεργειακή κατάσταση εκτός από την θεμελιώδη. Η παραδοχή της κβάντωσης λύνει το πρόβλημα της ατομικής σταθερότητας, όταν το άτομο βρίσκεται στην θεμελιώδη στάθμη είναι ευσταθές γιατί η ενέργειά του δεν μπορεί να γίνει μικρότερη ούτε όμως και μεγαλύτερη λόγω του τεράστιου φράγματος που χωρίζει την θεμελιώδη από την πρώτη διεγερμένη στάθμη. Έτσι τα άτομα σε μια μεγάλη περιοχή θερμοκρασιών συμπεριφέρονται σαν να είναι εντελώς απαραμόρφωτα.

Το παραβολικό και το τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού.

Η δυναμική ενέργεια πυρήνα - ηλεκτρονίου δίνεται από τη σχέση που απέχουν απόσταση r δίνεται από την εξίσωση $V(r) = -k \frac{Ze^2}{r}$, όπου Z ο αριθμός των πρωτονίων του πυρήνα. Ας υποθέσουμε ότι τοποθετούμε τον πυρήνα στην αρχή των αξόνων ενός συστήματος αναφοράς και το ηλεκτρόνιο παίρνει διάφορες θέσεις

επάνω στον αριστερό και δεξιό ημιάξονα. Η ισότητα που δίνει την δυναμική ενέργεια του συστήματος είναι $V(x) = -k \frac{Ze^2}{|x|}$. Η απόλυτη τιμή στον παρονομαστή

δείχνει ότι η δυναμική ενέργεια πυρήνα - ηλεκτρονίου εξαρτάται μόνο από την μεταξύ τους απόσταση και όχι από το εάν το ηλεκτρόνιο βρίσκεται στον θετικό ή τον αρνητικό ημιάξονα.



Σχήμα 6: Γραφική παράσταση της δυναμικής ενέργειας πρωτονίου-ηλεκτρονίου. Το πρωτόνιο είναι τοποθετημένο στην αρχή των αξόνων και το ηλεκτρόνιο κινείται στον οριζόντιο άξονα – παραβολικό πηγάδι δυναμικού. Το τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού είναι μια απλοποιημένη προσέγγιση.

Η γραφική παράσταση της δυναμικής ενέργειας φαίνεται στο σχήμα 6. Πράγματι όταν το ηλεκτρόνιο πλησιάζει από το δεξιό ή τον αριστερό άξονα προς τον πυρήνα αισθάνεται μια αυξανόμενη ελκτική δύναμη ή αν μιλήσουμε με όρους ενέργειας βλέπει μπροστά του μια απότομη κατηφοριά σαν ένα πηγάδι που το ρίχνει απάνω στο πυρήνα. Ο κατακόρυφος άξονας του γραφήματος αντιστοιχεί στη δυναμική ενέργεια πυρήνα-ηλεκτρονίου σε eV και ο οριζόντιος στην απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα σε Angstrom. Όσο το ηλεκτρόνιο πλησιάζει τον πυρήνα τόσο μειώνεται η δυναμική ενέργεια. Στο διάγραμμα αυτό έχουμε σημειώσει τις ενέργειες των τριών πρώτων σταθμών. Το πηγάδι που σχηματίζεται από την γραφική παράσταση της δυναμικής ενέργειας το ονομάζουμε παραβολικό πηγάδι δυναμικού. Όπως θα δούμε σε επόμενες διαλέξεις η απεικόνιση αυτή χρησιμοποιείται για να μπορέσει κανείς να βρει τις ιδιότητες των ηλεκτρονίων στους ημιαγωγούς. Επειδή το παραβολικό πηγάδι εισάγει μεγάλη μαθηματική πολυπλοκότητα χρησιμοποιείται μία προσέγγιση, που είναι το τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού. Στο πηγάδι αυτό τα χείλη αντιστοιχούν σε ενέργεια μηδέν και ο πάτος σε ενέργεια που είναι πλην άπειρο. Τις ενέργειες των σταθμών του ηλεκτρονίου στο άτομο του υδρογόνου τις σημειώνουμε με γραμμές μέσα στο πηγάδι. Η πρώτη στάθμη έχει την μεγαλύτερη απόλυτη τιμή -13,6eV και βρίσκεται πιο βαθιά. Ακολουθεί η 2^η στα -3,4eV και η 3^η στα -1,5eV.