Σύγχρονη Φυσική

Διδακτικοί Στόχοι

- Να γνωρίσετε ορισμένα φαινόμενα που εξηγούνται με την κβαντική μηχανική.
- Να κατανοήσετε ότι η κβαντική μηχανική εισάγει ένα νέο είδος αβεβαιότητας στις μετρήσεις.
- Να γνωρίζετε την ερμηνεία και τις ιδιότητες των κυματοσυναρτήσεων.
- Να μελετήσετε ορισμένα απλά κβαντομηχανικά συστήματα.
- Να κατανοήσετε την αρχή λειτουργίας του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου.

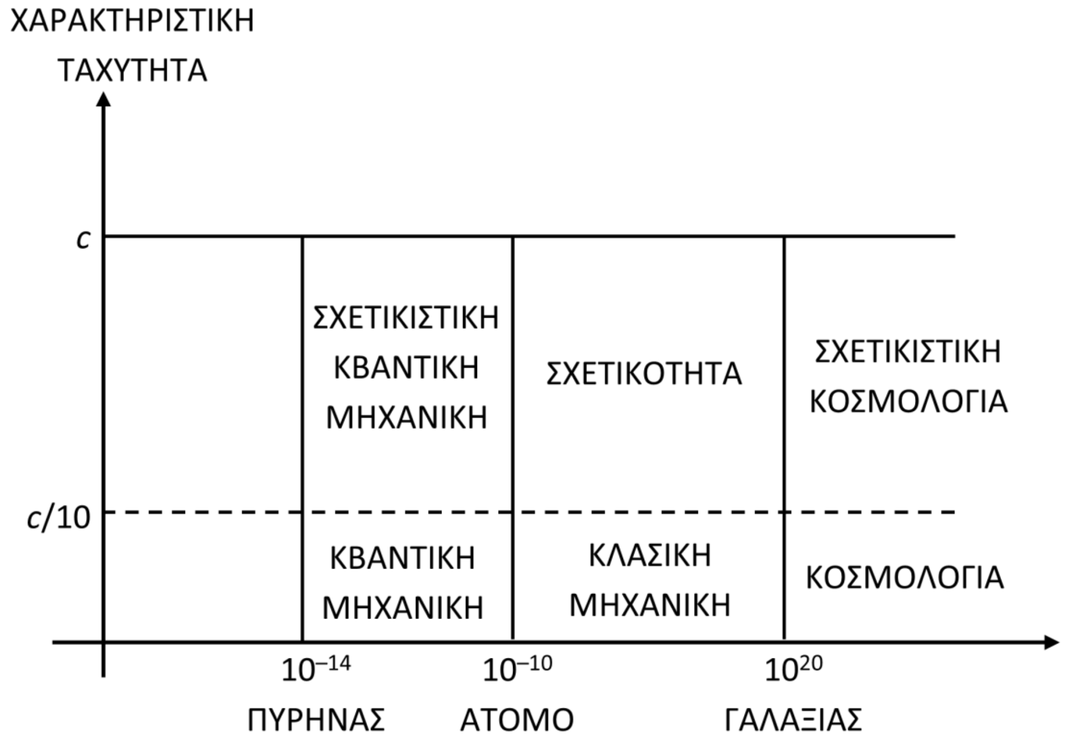
Αντιστοιχιση Στις Ενοτητες των Προτεινομενων Βιβλιων

- Από το βιβλίο του J. Newman «Φυσική της Ζωής» την §24.2, §24.3, §24.4, §23.3.
- Από το βιβλίο των Freeman/Ruskell/Kesten/Tauck §26.2.

Οι Διαφορες Περιοχες της Φυσικης

Οι Περιοχές της Φυσικής

- Ανάλογα με τις διαστάσεις του συστήματος και τις ταχύτητες που εμπλέκονται σε ένα πρόβλημα μπορούμε να διακρίνουμε τις ακόλουθες περιοχές.

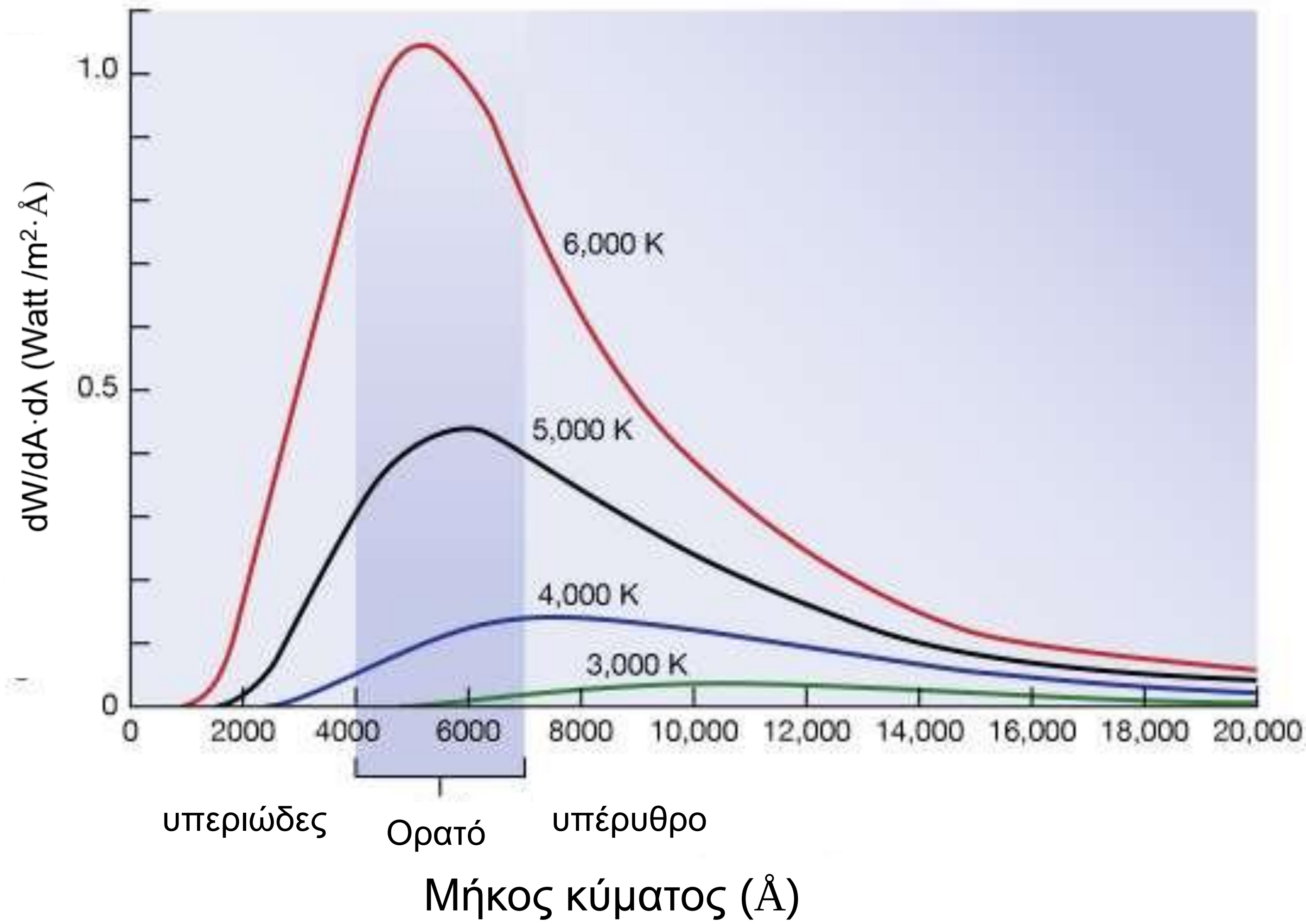


Ακτινοβολια Μελανος Σωματος

Planck 1900

- Προκειμένου να εξηγήσει την ακτινοβολία του μέλανος σώματος αναγκάστηκε να υποθέσει ότι η ακτινοβολία εκπέμπεται σε κβάντα ενέργειας που είναι ανάλογα με τη συχνότητα (f).

PLANCK 1900



dW/dA·dλ (Watt /m²·Å)
1.0
0.5
0
6,000 K
5,000 K
4,000 K
3,000 K
0
2000
4000
6000
8000
10,000
12,000
14,000
16,000
18,000
20,000
υπεριώδες
Ορατό
υπέρυθρο
Μήκος κύματος (Å)

Planck 1900

- Δηλαδή είναι

$$E = h \cdot f$$

όπου $h = 6{,}6256 \cdot 10^{-34}$ J·s είναι γνωστή ως σταθερά του Planck.

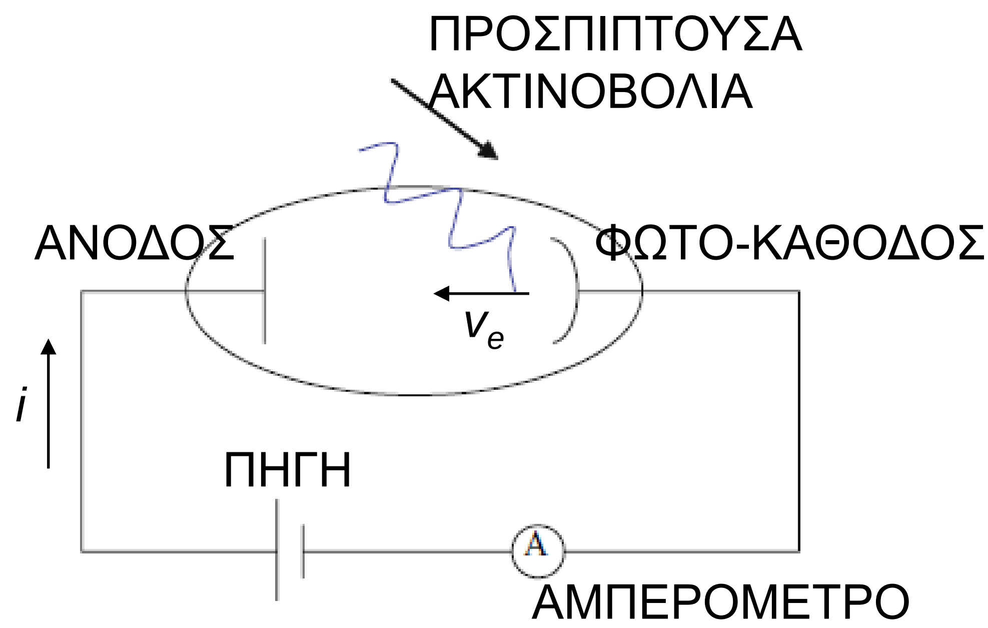
Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

- Πρόκειται για το φαινόμενο της εξαγωγής ηλεκτρονίων από την επιφάνεια ενός μετάλλου με τη βοήθεια του φωτός.

Πειραματική Μελέτη Του Φωτοηλεκτρικού Φαινομένου

- Μια διάταξη για την πειραματική μελέτη του φαινομένου φαίνεται στο ακόλουθο σχήμα.



Πειραματικες Παρατηρησεις

- Πειραματικά είχε διαπιστωθεί ότι:

  α) Δεν παράγονται e^- (και συνεπώς δεν υπάρχει ρεύμα) όταν η συχνότητα είναι κάτω από μια ορισμένη τιμή άσχετα από τη διαφορά δυναμικού. Η συχνότητα αυτή είναι γνωστή ως συχνότητα κατωφλίου (f_0).

Πειραματικές Παρατηρήσεις

β) Αν αντιστραφεί η πολικότητα της πηγής υπάρχει κάποια τιμή, που ονομάζεται δυναμικό αποκοπής, για το οποίο το ρεύμα σταματά.

γ) Αυξάνοντας την ένταση της ακτινοβολίας αυξάνεται η ένταση του ρεύματος, αλλά το δυναμικό αποκοπής δεν μεταβάλλεται.

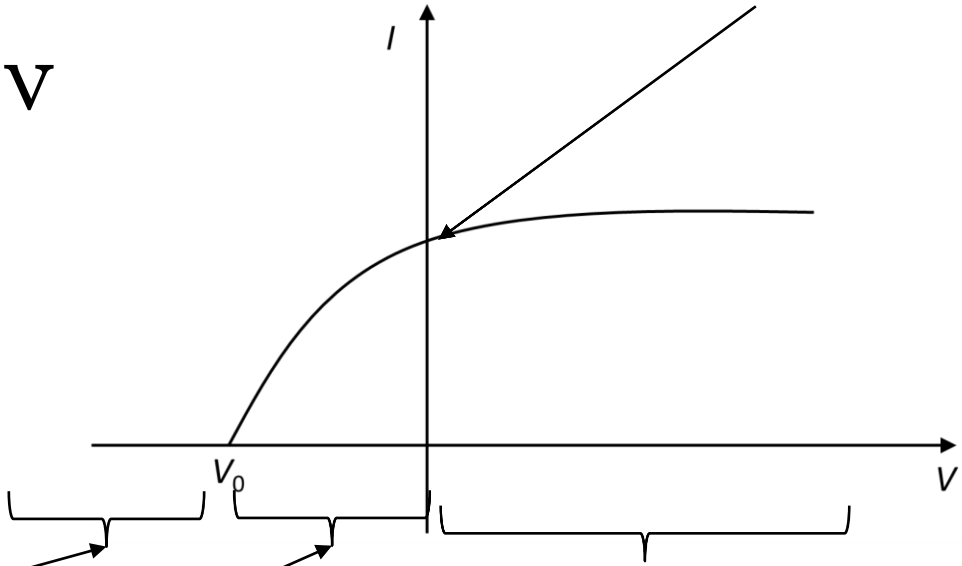
Πειραματικες Παρατηρησεις

δ) Ανεξάρτητα από την ένταση της ακτινοβολίας, το ρεύμα εμφανίζεται άμεσα στο κύκλωμα.

Πειραματικές Παρατηρήσεις

- Σχηματικά, μέρος αυτών των παρατηρήσεων συνοψίζονται στο διπλανό διάγραμμα.

Ακόμα και για μηδενική τάση υπάρχει ρεύμα



Το ρεύμα δεν γίνεται ποτέ αρνητικό

Το ρεύμα, όταν αντιστραφεί η πολικότητα, μειώνεται και τελικά μηδενίζεται για την τιμή του δυναμικού αποκοπής

Το ρεύμα φθάνει γρήγορα μια σταθερή τιμή που δεν αλλάζει με την τάση

Προβλεψεις Κλασικης Φυσικης

- Σύμφωνα με την κλασική φυσική, αυτό που περιμένουμε είναι η απορρόφηση της ακτινοβολίας από το μέταλλο, η σταδιακή θέρμανσή του και η εκπομπή ηλεκτρονίων.

Προβλέψεις Κλασικής Φυσικής

- Με βάση αυτή την εικόνα

α) Δεν εξηγείται η ύπαρξη συχνότητας κατωφλίου.

β) Καθώς αυξάνει η ένταση της ακτινοβολίας θα έπρεπε να μεταβάλλεται και το δυναμικό αποκοπής.

Προβλεψεις Κλασικης Φυσικης

γ) Θα έπρεπε να μεσολαβεί κάποιος χρόνος από την ακτινοβόληση του μετάλλου μέχρι την εμφάνιση του ρεύματος, κυρίως στις χαμηλές εντάσεις προσπίπτουσας ακτινοβολίας.

Η Εξισωση Του Φωτοηλεκτρικου Φαινιομενου

- Ο Einstein το 1905 κατάφερε χρησιμοποιώντας το μοντέλο των φωτονίων να εξηγήσει το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο.
- Για το λόγο αυτό του απονεμήθηκε το Nobel φυσικής του 1921.

Μοντελο Φωτονιων

- Οι υποθέσεις που έκανε ο Einstein ήταν οι εξής:

α) Ακτινοβολία συχνότητας f αποτελείται από διακριτά κβάντα που το καθένα φέρει ενέργεια $E = hf$.

Μοντελο Φωτονιων

β) Τα φωτόνια εκπέμπονται η απορροφούνται ως όλον.

γ) Ένα φωτόνιο που απορροφάται από το μέταλλο μεταφέρει όλη του την ενέργεια σε ένα ηλεκτρόνιο.

Η Εξισωση Του Φωτοηλεκτρικου Φαινιομενου

- Η εξίσωση που περιγράφει το Φ.Φ. είναι η **διατήρηση της ενέργειας**:

$$\boxed{h \cdot f = W + \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v_{max}^2}$$

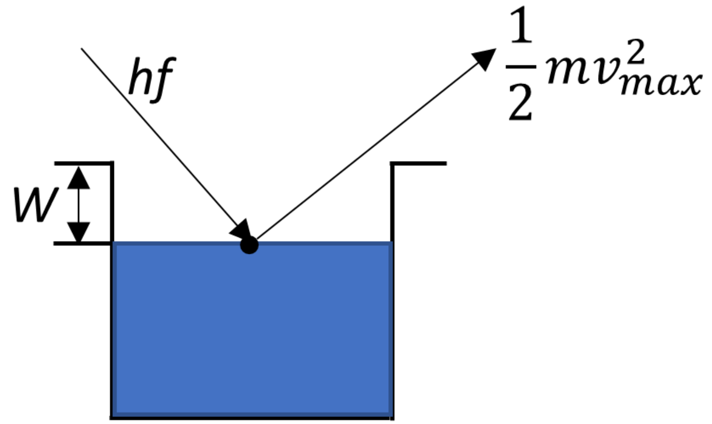
όπου W το έργο εξαγωγής για το συγκεκριμένο μέταλλο και v_{max} η μέγιστη ταχύτητα που παρατηρείται στα φωτοηλεκτρόνια.

Το Εργο Εξαγωγησ

- Το έργο εξαγωγής *W* δείχνει την ελάχιστη απαραίτητη ενέργεια που πρέπει να προσφέρουμε ώστε να εξάγουμε το ηλεκτρόνιο από το μέταλλο.
- Εξαρτάται από το είδος του μετάλλου αλλά και από την κατάσταση της επιφάνειας.

Το Εργο Εξαγωγης – Μια Αναλογια

- Φανταστείτε ότι έχουμε ένα δοχείο με κάποιο υγρό όπως φαίνεται στο σχήμα.
- Για να εξάγουμε ένα μόριο του υγρού θα πρέπει να προσφέρουμε ενέργεια τουλάχιστον ίση με $W = mgh$.



Συχνοτητα κατωφλιου

- Η προηγούμενη εξίσωση υπολογίζει και τη συχνότητα κατωφλίου ως εξής:

$$h \cdot f_0 = W \Rightarrow f_0 = \frac{W}{h}$$

Δυναμικο Αποκοπησ

- Η βασική εξίσωση του φωτοηλεκτρικού φαινομένου υπολογίζει και το δυναμικό αποκοπής ως εξής:

$$q_e \cdot V_0 = K_{max} \Rightarrow V_0 = \frac{mv_{max}^2}{2q_e}$$

ή

$$q_e \cdot V_0 = hf - W$$

Δυναμικό Αποκοπής

- Εναλλακτικά:

$$q_e \cdot V_0 = K_{max} = hf - W \Rightarrow$$

$$\Rightarrow q_e \cdot V_0 = hf - hf_0 \Rightarrow$$

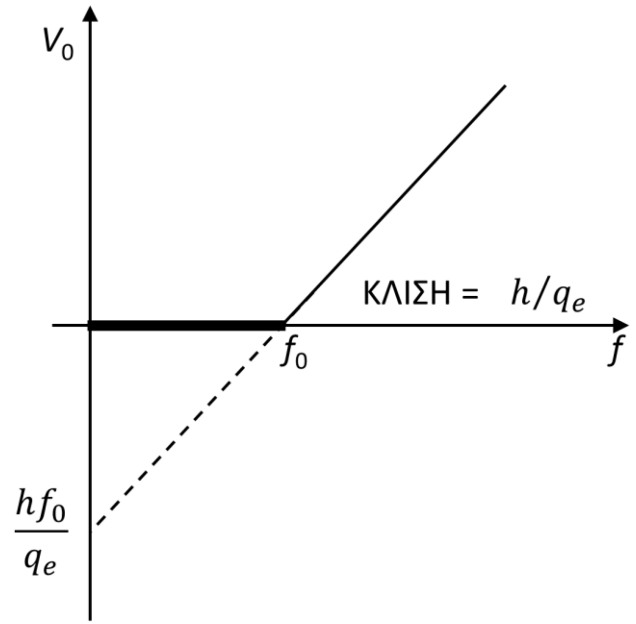
$$\Rightarrow V_0 = \frac{h}{q_e} f - \frac{hf_0}{q_e}$$

ΔΥΝΑΜΙΚΟ ΑΠΟΚΟΠΗΣ

- Αυτή η τελευταία σχέση μας δείχνει ότι η γραφική παράσταση του δυναμικού αποκοπής σε συνάρτηση με τη συχνότητα είναι ευθεία με κλίση h/q_e.

$$V_0 = \frac{h}{q_e} f - \frac{hf_0}{q_e}$$

$$y = Ax + B$$



Einstein Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο 1905

- Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο δείχνει ότι η ενεργειακή αποτελεσματικότητα του φωτός εξαρτάται από την συχνότητα και όχι από την ένταση (όπως ήταν αναμενόμενο με βάση την κλασική θεωρία).

Φαινομενα που αφορουν τη δραση φωτός πανω στην υλη

- Όλοι ξέρουμε π.χ. ότι μαυρίζουμε όταν εκτεθούμε σε υπεριώδες φως, το οποίο σημαίνει ότι οι χημικές αντιδράσεις που προκαλούν το μαύρισμα ενεργοποιούνται μόνο όταν η συχνότητα της προσπίπτουσας ακτινοβολίας υπερβεί μια τιμή.

ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΠΟΥ ΑΦΟΡΟΥΝ ΤΗ ΔΡΑΣΗ ΦΩΤΌΣ ΠΑΝΩ ΣΤΗΝ ΥΛΗ

- Για να γίνει μια τέτοια χημική αντίδραση πρέπει να δοθεί στα αντιδρώντα μόρια μια ελάχιστη ενέργεια.

Φαινομενα που αφορουν τη δραση φωτος πανω στην υλη

- Αν η Η/Μ ακτινοβολία είχε συνεχή χαρακτήρα, τότε η απαιτούμενη ενέργεια θα μπορούσε να απορροφηθεί σιγά-σιγά και η αντίδραση θα συνέβαινε ανεξάρτητα από τη συχνότητα του προσπίπτοντος φωτός.

Φαινομενα που αφορουν τη δραση φωτος πανω στην υλη

- Δηλ. θα μαυρίζαμε ακόμα και δίπλα σε μια ραδιοφωνική κεραία!

Φαινομενα που αφορουν τη δραση φωτός πανω στην υλη

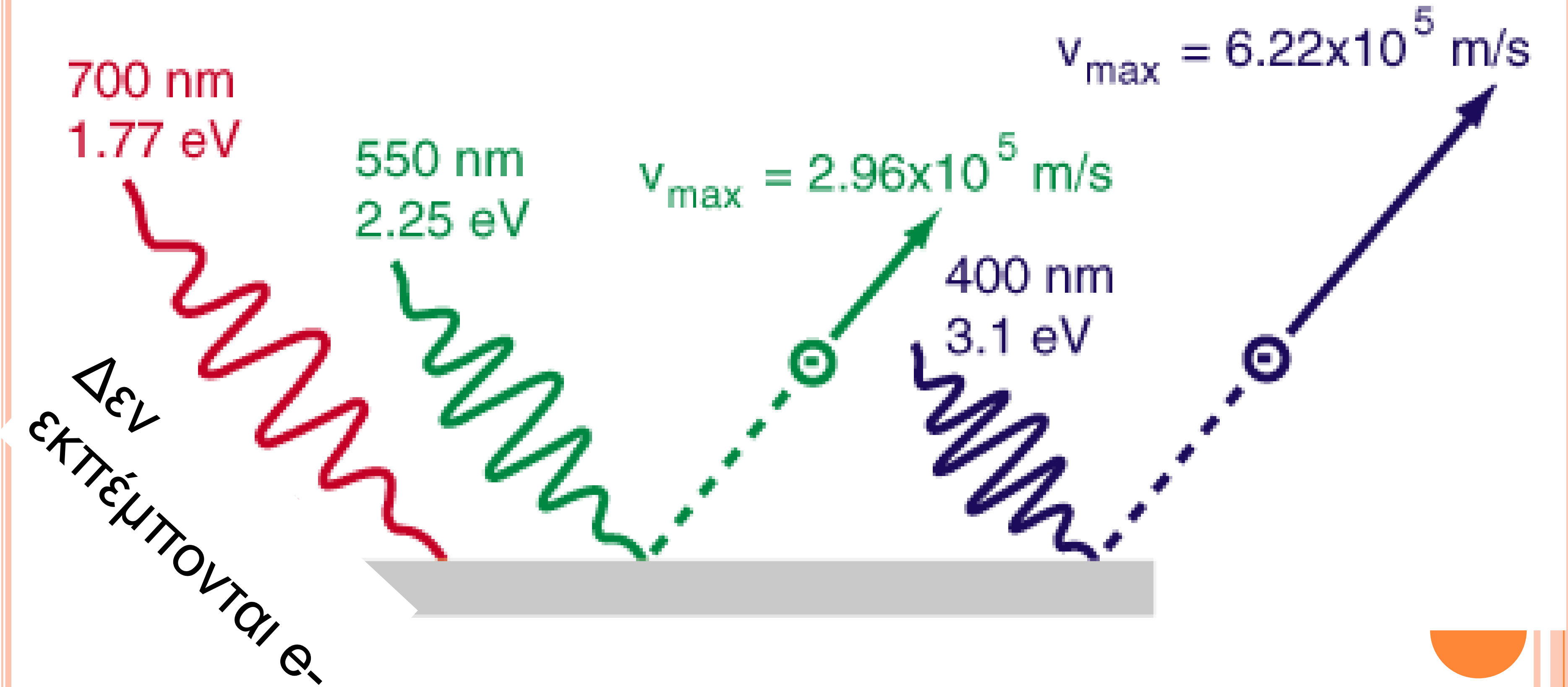
- Χωρίς την κβάντωση της Η/Μ ακτινοβολίας, τα ηλεκτρόνια των ατόμων και των μορίων θα απορροφούσαν συνεχώς ενέργεια από το φως οποιασδήποτε συχνότητας και η ύπαρξη σταθερών μοριακών δομών θα ήταν απολύτως αδύνατη.

Φαινομενα που αφορουν τη δραση φωτος πανω στην υλη

- Η κβάντωση του φωτός είναι αναγκαιότητα συνυφασμένη με την ίδια την ύπαρξη μας.

Einstein Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο 1905

- Σχηματικά



Η Αρχη Της Αβεβαιοτητας

Η ΕΝΝΟΙΑ ΣΦΑΛΜΑ Ή ΑΒΕΒΑΙΟΤΗΤΑ

- Στην κλασική φυσική το σφάλμα σε μια μέτρηση οφείλεται στα ατελή όργανα ή στον παρατηρητή.
- Θεωρητικά, αν έχουμε πολύ καλά όργανα και έναν έμπειρο πειραματιστή μπορούμε να μειώνουμε, χωρίς κανένα όριο το σφάλμα.

Η ΕΝΝΟΙΑ ΣΦΑΛΜΑ Ή ΑΒΕΒΑΙΟΤΗΤΑ

- Όμως ακόμα και στην κλασική φυσική υπάρχει το εξής πρόβλημα: Φανταστείτε ότι θέλουμε να μετρήσουμε την θερμοκρασία ενός φλυτζανιού με καφέ με τη βοήθεια ενός πολύ μεγάλου θερμομέτρου.

Η ΕΝΝΟΙΑ ΣΦΑΛΜΑ Ή ΑΒΕΒΑΙΟΤΗΤΑ

- Είναι εύκολο να καταλάβουμε ότι το θερμόμετρο επηρεάζει τη θερμοκρασία του καφέ, καθώς θερμότητα θα πρέπει να μεταφερθεί από τον καφέ στο θερμόμετρο με συνέπεια τη μείωση της θερμοκρασία του καφέ.

Η ΕΝΝΟΙΑ ΣΦΑΛΜΑ Ή ΑΒΕΒΑΙΟΤΗΤΑ

- Συνήθως, στην κλασική φυσική θεωρούμε ότι η επίδραση αυτή είναι αμελητέα.

Η ΕΝΝΟΙΑ ΣΦΑΛΜΑ Ή ΑΒΕΒΑΙΟΤΗΤΑ

- Στην φυσική των στοιχειωδών σωματιδίων (κβαντομηχανική) εισάγεται αβεβαιότητα που σχετίζεται με το γεγονός ότι για να γίνει μέτρηση θα πρέπει να συμβεί αλληλεπίδραση.

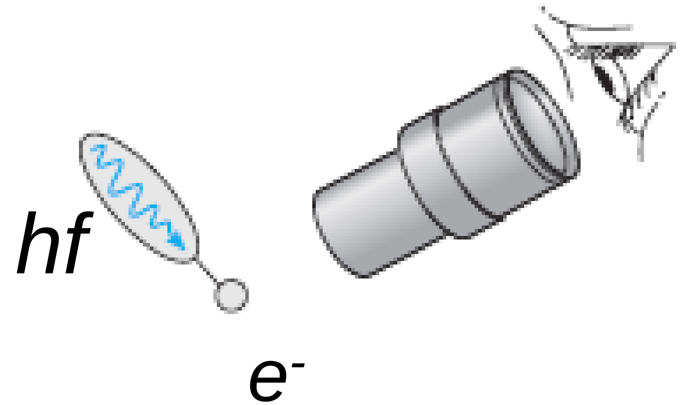
ΕΝΑ ΙΔΕΑΤΟ ΠΕΙΡΑΜΑ

- Έστω ότι θέλουμε να παρατηρήσουμε ένα ηλεκτρόνιο με τη βοήθεια ενός μικροσκοπίου (ιδεατό πείραμα).
- Θα πρέπει στο ηλεκτρόνιο να προσπέσει τουλάχιστον ένα φωτόνιο.
- Το φωτόνιο όμως θα προσδώσει ενέργεια στο ηλεκτρόνιο αλλάζοντας την ταχύτητά του.

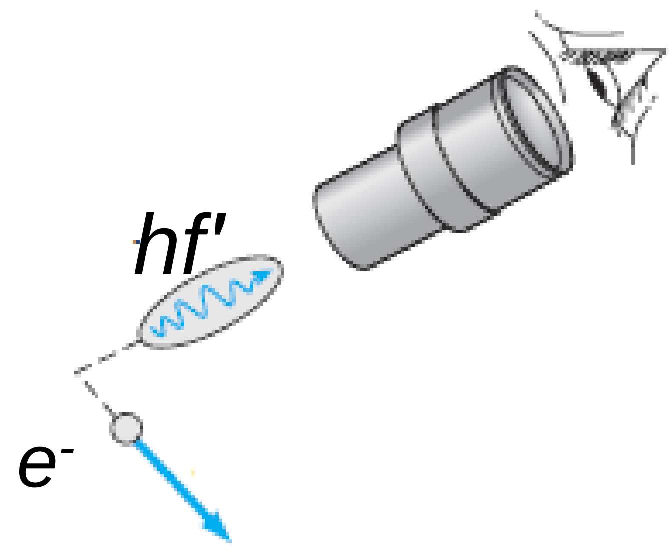
ΕΝΑ ΙΔΕΑΤΟ ΠΕΙΡΑΜΑ

- Σχηματικά

Πριν τη σύγκρουση



Μετά τη σύγκρουση



ΕΝΑ ΙΔΕΑΤΟ ΠΕΙΡΑΜΑ

- Ο Heisenberg έδειξε ότι όσο μειώνουμε το μήκος κύματος (για να αυξήσουμε τη διακριτική ικανότητα) οπότε εντοπίζουμε καλύτερα τη θέση του ηλεκτρονίου, τόσο αυξάνουμε τη συχνότητα οπότε το φωτόνιο έχει μεγαλύτερη ενέργεια με συνέπεια να μεταβάλλει πολύ περισσότερο την ταχύτητα του ηλεκτρονίου.

Heisenberg Αρχη Αβεβαιοτητας 1927

- Οι μετρήσεις στη θέση και την ορμή ενός σωματιδίου δεν μπορούν να γίνουν με μηδενική αβεβαιότητα ταυτόχρονα.
- Ισχύει ότι

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4 \cdot \pi}$$

όπου Δx η αβεβαιότητα στη θέση και Δp η αβεβαιότητα στην ορμή.

Κυματοσωματιδιακος Δυισμος

De Broglie Κυματοσωματιδιακος δυισμος 1924

- Όπως είδαμε το φως, που θεωρούνταν κύμα, έχει σωματιδιακά χαρακτηριστικά.
- Μήπως συμβαίνει και το αντίστροφο, δηλ. τα σωματίδια έχουν κυματικά χαρακτηριστικά;

De Broglie Κυματοσωματιδιακος Δυισμος 1924

- Ο L. de Broglie πρότεινε ότι πράγματι τα σωματίδια έχουν κυματικά χαρακτηριστικά βασιζόμενος σε μια διαισθητικά αναμενόμενη συμμετρία.
- Η σύνδεση μεταξύ κυματικών και σωματιδιακών χαρακτηριστικών γίνεται με τις εξισώσεις:

$$\boxed{\begin{gathered} E = h \cdot f \\ p = \frac{h}{\lambda} \end{gathered}}$$

Φαινομενα που αφορουν τη δραση φωτος πανω στην υλη

- Ο δυισμός που πρότεινε ο de Broglie είναι ΓΕΝΙΚΟ χαρακτηριστικό της ύλης.

Κβαντική Μηχανική

ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ

- Αφού τα σωματίδια έχουν κυματικά χαρακτηριστικά, πρέπει να υπάρχει μια θεωρία που να περιγράφει αυτά τα ΚΥΜΑΤΙΚΑ χαρακτηριστικά τους.
- Η διατύπωση της θεωρίας αυτής ολοκληρώθηκε περίπου το 1927 και είναι η **κβαντομηχανική**.

ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑΣ ΠΕΔΙΟΥ

- Πρέπει επίσης να υπάρχει μια θεωρία που να περιγράφει τα σωματιδιακά χαρακτηριστικά των κυμάτων.
- Ολοκληρώθηκε το 1953 και είναι γνωστή ως **κβαντική θεωρία πεδίου**.

Χρονοανεξαρτητη Εξισωση Schrödinger

- Η εξίσωση που περιγράφει τις κυματικές ιδιότητες των σωματιδίων που κινούνται στη μια διάσταση είναι η εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\cdot\psi(x)$$

όπου m η μάζα του σωματιδίου, V η δυναμική ενέργεια (ή το δυναμικό) του πεδίου εντός του οποίου κινείται το σωματίδιο, E η ολική του ενέργεια και $\psi=\psi(\mathrm{x})$ η ονομαζόμενη κυματοσυνάρτηση.

Εξισωση Schrödinger

- Πρόκειται για μια εξίσωση που <u>δεν</u> αποδεικνύεται από κάποιες άλλες αρχές.
- Τη δεχόμαστε, όπως ακριβώς δεχόμαστε το 2ο Νόμο του Νεύτωνα χωρίς απόδειξη, επειδή κάθε φορά που την εφαρμόζουμε με τον κατάλληλο τρόπο μας δίνει αποτελέσματα που συμπίπτουν με τις πειραματικές παρατηρήσεις.
- Οι λύσεις που προκύπτουν από την εξίσωση αυτή ονομάζονται **στάσιμες καταστάσεις** και αντιστοιχούν σε συγκεκριμένη ενέργεια.

Εξισωση Schrödinger

- Η προηγούμενη εξίσωση είναι η χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger, ενώ φυσικά υπάρχει και η χρονοεξαρτημένη εξίσωση Schrödinger με την οποία δεν θα ασχοληθούμε.
- Η εξίσωση Schrödinger μπορεί να γενικευτεί για την περίπτωση ενός σωματιδίου που κινείται στις τρείς διαστάσεις.

Εξισωση Schrödinger & Δευτερος Νομος Νευτωνα

- Για να σχηματίσουμε μια εικόνα που θα μας βοηθήσει να εξοικειωθούμε, μπορούμε να σκεφτόμαστε την εξίσωση Schrödinger, ως την εξίσωση που αντικαθιστά τον 2ο νόμο του Νεύτωνα στον μικρόκοσμο, που ισχύει δηλαδή όχι για μακροσκοπικά, αλλά για μικροσκοπικά σώματα.
- Μάλιστα μπορούμε να βρούμε και κάποιες «αναλογίες»

$$\boxed{-\frac{h^2}{8\cdot\pi^2\cdot m}\cdot\frac{d^2\psi}{dx^2}}+\boxed{V\cdot\psi}=E\cdot\psi$$

$$m\cdot a=F\Rightarrow \boxed{m\cdot\frac{d^2x}{dt^2}}-\boxed{F}=0$$

Μια σταθερά πολλαπλασιασμένη με μια δεύτερη παράγωγο

Ασκούμενη δύναμη

Ποια Είναι τα Απαιτούμενα Δεδομένα για την Επίλυση της Εξίσωσης Schrödinger;

- Για να λυθεί η εξίσωση Schrödinger θα πρέπει καταρχήν να γνωρίζουμε τη μάζα του σωματιδίου που μελετάμε το οποίο υπενθυμίζεται ότι είναι μικροσκοπικών διαστάσεων (π.χ. ένα ηλεκτρόνιο).
- Θα πρέπει επίσης να γνωρίζουμε τη δύναμη που ασκείται πάνω στο σωματίδιο στην περιοχή που αυτό κινείται (ή καλύτερα τη δυναμική ενέργεια που έχει το σωματίδιο).
- Πολλά λοιπόν από τα συστήματα που έχετε μελετήσει μέχρι τώρα στη φυσική με τη βοήθεια του 2ου νόμου του Νεύτωνα, μπορεί αν γίνει μικροσκοπικό, να μελετηθεί με την εξίσωση του Schrödinger.

Τι Προκυπτει απο τη Λυση της Εξισωσης Schrödinger;

- Προκύπτει μια συνάρτηση $\psi(x)$ (ή $\psi(x,t)$ αν λύσουμε τη χρονοεξαρτημένη εξίσωση Schrödinger) που δείχνει πως μεταβάλλεται με τη θέση (και το χρόνο) η κυματοσυνάρτηση.
- Φυσικά στις 3 διαστάσεις θα έχουμε αντιστοίχως μια συνάρτηση $\psi(x,y,z)$ ή $\psi(x,y,z,t)$.
- Προκύπτει ένα σύνολο από τις επιτρεπόμενες ενέργειες για το σύστημά μας. Μάλιστα, τα μαθηματικά μας οδηγούν στο συμπέρασμα ότι η ενέργεια είναι κβαντισμένη και όχι συνεχής ποσότητα, αφού υπάρχει η απαίτηση αυτή για να έχει λύσεις η εξίσωση Schrödinger.

Κυματοσυναρτησεισ

Η ΚΥΜΑΤΟΣΥΝΑΡΤΗΣΗ $\psi(x)$

- Η κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ είναι λύση της εξ. Schrödinger.
- Είναι μια συνάρτηση που δεν μπορεί να απειρίζεται.
- Πρέπει να είναι συνεχής συνάρτηση.
- Στη συνάρτηση αυτή περιέχονται <u>όλες</u> οι πληροφορίες που μπορούμε να έχουμε για ένα σωματίδιο από την κβαντική θεωρία.

Η ΕΡΜΗΝΕΙΑ ΤΗΣ $\psi(x)$

- Το νόημά της είναι ότι το $|\psi(x)|^2 \cdot dx$ δείχνει την πιθανότητα για το σωματίδιο που κινείται στη μια διάσταση, άρα κατά μήκος ενός άξονα x, να ανιχνευθεί μεταξύ των θέσεων x και $x + dx$.
- Από την παραπάνω ερμηνεία προκύπτει ότι επειδή είναι:

$$|\psi(x)|^2 \cdot (\text{Μήκος}) = \text{Καθαρός αριθμός}$$

άρα οι μονάδες μιας κυματοσυνάρτησης, στη μια διάσταση, είναι $1/m^{1/2}$.

Η ΕΡΜΗΝΕΙΑ ΤΗΣ $\psi(x)$

- Η ίδια η συνάρτηση $\psi(x)$ δεν έχει κάποιο νόημα και μπορεί να παίρνει θετικές και αρνητικές τιμές.
- Η $|\psi(x)|^2$ προφανώς, ως τετράγωνο (και αφού δείχνει την πιθανότητα), έχει πάντα θετικές ή μηδενικές τιμές.

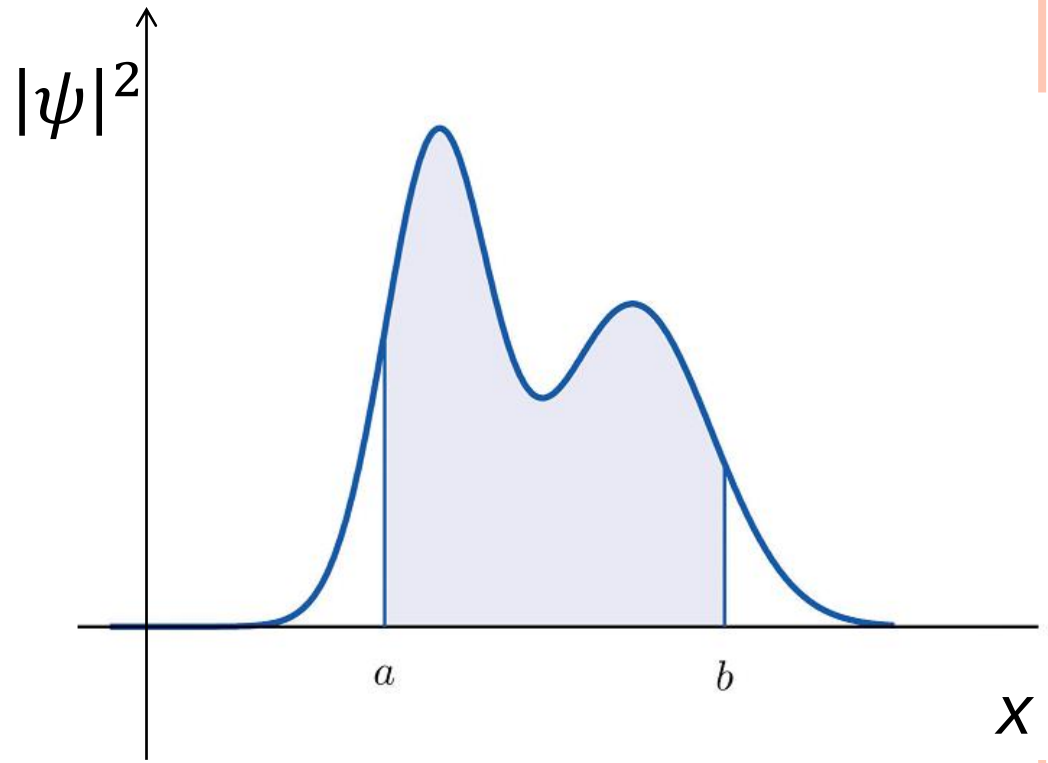
Η ΕΡΜΗΝΕΙΑ ΤΗΣ $\psi(x)$

- Αν θέλουμε να υπολογίσουμε την πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο μεταξύ των σημείων a και b, καθώς κινείται στον άξονα x, θα πρέπει να υπολογίσουμε το

$$\int_a^b |\psi|^2 \cdot dx$$

Η ΕΡΜΗΝΕΙΑ ΤΗΣ $\psi(x)$

- Ουσιαστικά πρόκειται για το εμβαδό στη γραφική παράσταση $|\psi|^2 - x$.
- Σχηματικά



ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΗΣ $\psi(x)$

- Αφού η συνάρτηση $\psi(x)$ συνδέεται με την πιθανότητα, και δεδομένου ότι το σωματίδιο βρίσκεται κάπου θα πρέπει να ισχύει

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 \cdot dx = 1$$

ή

$$\sum |\psi|^2 \cdot dx = 1.$$

- Η ιδιότητα αυτή εκφράζει την κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης.

Πληθυσμοί στις Διαφορές Ενεργειακές Καταστάσεις

Λύση της Εξίσωσης Schrödinger

- Γνωρίζουμε ότι από τη λύση της εξίσωσης Schrödinger προκύπτει η κυματοσυνάρτηση, που περιγράφει το κβαντικό μας σύστημα (που θα την χρησιμοποιήσουμε σπάνια), και οι διαφορετικές ενεργειακές στάθμες στις οποίες μπορεί να βρεθεί το σύστημα μας (θα τις χρησιμοποιήσουμε πολύ συχνά).
- Για να μπορέσουμε όμως να εξηγήσουμε τα φάσματα, με τα οποία θα ασχοληθούμε στη συνέχεια, θα ασχοληθούμε με ένα σύνολο από παρόμοια συστήματα, δηλαδή για παράδειγμα, όχι με ένα άτομο αλλά με ένα πολύ μεγάλο αριθμό N πανομοιότυπων ατόμων, της τάξης του αριθμού Avogadro.

Πληθυσμοι στις Διαφορες Ενεργειακες Καταστασεις

- Το πρόβλημα λοιπόν τώρα είναι να γνωρίζουμε από το σύνολο των όμοιων κβαντικών συστημάτων που διαθέτουμε, το πλήθος που βρίσκεται σε κάθε ενεργειακή κατάσταση.
- Απάντηση σε αυτό το ερώτημα δίνει η κατανομή Boltzamann.

Κατανομη Boltzamann

- Σύμφωνα με την κατανομή Boltzamann, αν N_i κβαντικά συστήματα βρίσκονται στην κατάσταση με ενέργεια E_i και N_j κβαντικά συστήματα βρίσκονται στην κατάσταση με ενέργεια E_j και όλα αυτά τα συστήματα βρίσκονται σε περιβάλλον με απόλυτη θερμοκρασία T, τότε ισχύει ότι

$$\boxed{\frac{N_i}{N_j} = \frac{e^{-E_i/k_B T}}{e^{-E_j/k_B T}} = e^{-(E_i - E_j)/k_B T}}$$

όπου $k_B = 1{,}38 \cdot 10^{-23}$ J/K η σταθερά Boltzmann.

Κατανομη Boltzamann

- Επειδή πολύ συχνά ενδιαφερόμαστε για το πλήθος των κβαντικών συστημάτων N_i που βρίσκονται στην κατάσταση με ενέργεια E_i σε σχέση με το πλήθος N_0 των κβαντικών συστημάτων που βρίσκονται στην κατάσταση με την χαμηλότερη ενέργεια E_0 ο προηγούμενος τύπος παίρνει τη μορφή

$$\frac{N_i}{N_0} = \frac{e^{-E_i/k_B T}}{e^{-E_0/k_B T}} = e^{-(E_i-E_0)/k_B T} \Rightarrow N_i = N_0 e^{-(E_i-E_0)/k_B T}$$

Χρονοεξαρτομενη Εξισωση Schrödinger

Εξισωση Schrödinger

- Η εξίσωση που περιγράφει τις κυματικές ιδιότητες των σωματιδίων που κινούνται στη μια διάσταση είναι η εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t) = -\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

όπου m η μάζα του σωματιδίου, $V(x)$ η συνάρτηση της δυναμικής ενέργειας (δυναμικό του πεδίου) εντός του οποίου κινείται το σωματίδιο και $\Psi(x,t)$ η ονομαζόμενη κυματοσυνάρτηση που εξαρτάται από τη θέση x και τη χρονική στιγμή t.

Χωρισμος Μεταβλητων

- Στα συστήματα που θα εξετάσουμε εδώ, είναι V $= V(x)$, δηλαδή, δεν υπάρχει εξάρτηση από το χρόνο, οπότε στις περιπτώσεις αυτές μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την ιδέα του διαχωρισμού των μεταβλητών σύμφωνα με την οποία μπορούμε να εκφράσουμε την κυματοσυνάρτηση στη μορφή $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$.

Εξισωση Schrödinger

- Αντικαθιστώντας τη συνάρτηση αυτή στην αρχική εξίσωση έχουμε

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\varphi(t)\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x)\varphi(t)=-\frac{h}{2\pi i}\psi(x)\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t}\Rightarrow$$

$$\Rightarrow-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+V(x)=-\frac{h}{2\pi i}\frac{1}{\varphi(t)}\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t}=E$$

Παρατηρώ ότι οι μεταβλητές έχουν χωριστεί, επομένως για να ισχύει αυτή η ισότητα θα πρέπει ο κάθε όρος να είναι ίσος με μια σταθερά E που θα αποδειχθεί ότι είναι η ενέργεια του σωματιδίου.

Εξαρτηση απο το Χρονο

- Από το δεύτερο μέλος της προηγούμενης εξίσωση έχουμε ότι

$$-\frac{h}{2\pi i}\frac{1}{\varphi(t)}\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t} = E$$

εξίσωση που μπορεί εύκολα να λυθεί και δίνει ως λύσεις συναρτήσεις της μορφής:

$$\boxed{\varphi(t) = e^{-\frac{2\pi i}{h}Et}}$$

Χρονοανεξαρτητη Εξισωση Schrödinger

- Παρομοίως, από το πρώτο μέλος της προηγούμενης εξίσωσης, έχουμε

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+V(x)=E\Rightarrow$$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\cdot\psi(x)$$

που είναι η χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger.

Τελική Λύση της Εξίσωσης Schrödinger

- Για να μπορέσουμε να προσδιορίσουμε τη συνολική λύση θα πρέπει να λύσουμε την χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger.
- Η τελική λύση θα είναι λοιπόν μια λύση της μορφής

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t) \Rightarrow \boxed{\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-\frac{2\pi i}{h}Et}}$$

όπου $\psi(x)$ η λύση της χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger.