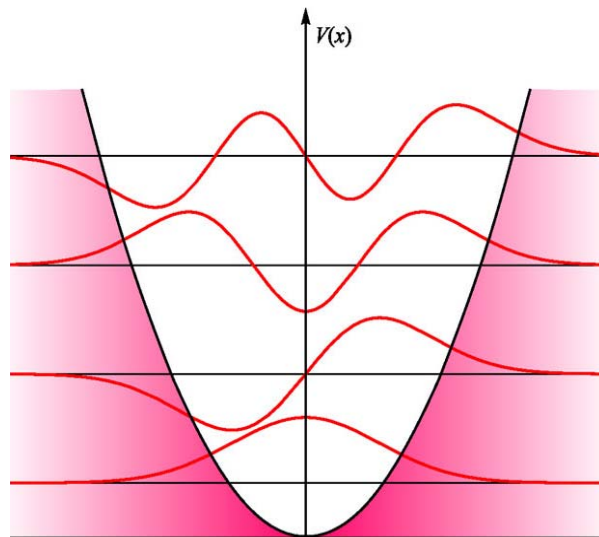


# *Η Κβαντομηχανική*

## *υπό ...ισχυρή συμπίεση*



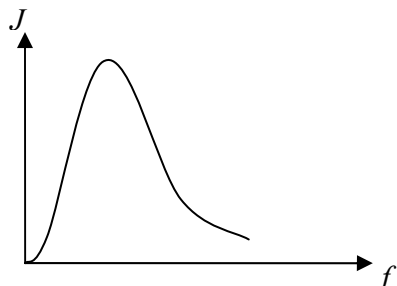
Σημειώσεις του Καθ. Στέφανου Τραχανά  
Τμ. Φυσικής, Παν/μιο Κρήτης

## Το μέλαν σώμα

### I. Τι είναι η ακτινοβολία του μέλανος σώματος

**Ακτινοβολία μέλανος σώματος** (black body radiation) είναι η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία την οποία εκπέμπουν όλα τα σώματα όταν θερμανθούν ( $T > 0$ ), για αυτό και ο χαρακτηρισμός της ως **θερμικής ακτινοβολίας** (thermal radiation). Στην ιδανική της μορφή (δες παρακάτω) η ακτινοβολία μέλανος σώματος εκπέμπεται από σώματα ικανά να απορροφήσουν ηλεκτρομαγνητική (ΗΜ) ακτινοβολία σ' όλα τα μήκη κύματος, οπότε και θα έχουν **μαύρο χρώμα**. Στην πράξη όλα τα στερεά σώματα όταν θερμανθούν σε σχετικά υψηλές θερμοκρασίες εκπέμπουν ΗΜ ακτινοβολία της οποίας η κατανομή στις διάφορες συχνότητες έχει τη χαρακτηριστική μορφή του Σχήματος 1, όπου  $J(f)$  είναι η εκπεμπόμενη ΗΜ ενέργεια ανά μονάδα χρόνου, ανά μονάδα επιφάνειας του ακτινοβολούντος σώματος και ανά μονάδα διαστήματος συχνότητας. Δηλαδή

$$J(f) = \frac{\Delta E}{\Delta t \cdot \Delta S \cdot \Delta f} = \frac{W}{m^2 Hz}$$



Σχ.1: Η καμπύλη της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος (ιδανική μορφή)

Η ποσότητα  $J(f)$  - που εξαρτάται και από τη θερμοκρασία του σώματος (είναι δηλαδή  $J=J(f,T)$ ) - ονομάζεται συχνά **φασματική ένταση** (spectral intensity), ενώ το ολοκλήρωμα της σ' όλες τις συχνότητες

$$I = \int_0^{\infty} J(f,T) df$$

δίνει την ολική εκπεμπόμενη ισχύ ανά μονάδα επιφάνειας του σώματος, δηλαδή την αποκαλούμενη **ένταση** της ακτινοβολίας.

### II. Οι επιμέρους εμπειρικοί νόμοι του μέλανος σώματος

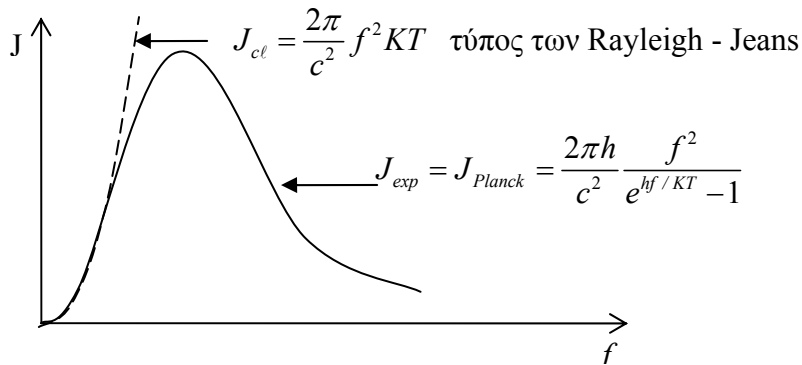
Ο νόμος των STEFAN- BOLTZMAN	Ο νόμος της μετατόπισης του WIEN
$I = \sigma T^4$ <p>.....</p> <p>Η ολική ένταση της εκπεμπόμενης από ένα μέλαν σώμα ακτινοβολίας εξαρτάται από την 4<sup>η</sup> δύναμη της απόλυτης θερμοκρασίας.</p> $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Wm}^{-2} \text{ K}^{-4}$	$\lambda_{max} = \frac{\alpha}{T}$ <p>.....</p> <p>Το μήκος κύματος μέγιστης εκπομπής μεταβάλλεται αντιστρόφως ανάλογα με την απόλυτη θερμοκρασία του σώματος</p> $\alpha \approx 0,3 \text{ cm K} \Rightarrow \lambda_{max} (\text{cm}) \approx 0,3 / T (\text{K})$

### III. Ο γενικός εμπειρικός νόμος του Plank

$J = \frac{2\pi h}{c^2} \frac{f^3}{e^{hf/KT} - 1}$	$h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J sec}$ (σταθερά του Planck)
	$c = 3 \cdot 10^8 \text{ m / sec}$ (ταχύτητα του φωτός)
	$K = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ (σταθερά του Boltzman)

## Η κρίση

### Σύγκριση κλασικής θεωρίας και πειράματος



Ο κλασικός τύπος των Rayleigh–Jeans  $J_{ce} \sim f^2 KT / c^2$  προκύπτει από τον εμπειρικό νόμο της καθολικότητας της θερμικής ακτινοβολίας, με καθαρά διαστατικές απαιτήσεις

## Και η... Θεραπεία

### Η υπόθεση του φωτεινού κβάντου

Η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία είναι κβαντωμένη με ελάχιστο επιτρεπόμενο ποσόν

$$\varepsilon = hf = \frac{hc}{\lambda}$$

όπου  $f$  η συχνότητα της ακτινοβολίας και  $h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J sec}$  η σταθερά του Planck

Σε πρακτικές μονάδες:

$$E (eV) = \frac{12400}{\lambda (\text{\AA})}$$

1 eV αντιστοιχεί σε  $\lambda = 12400 \text{\AA}$

$$1 eV = 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ erg} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

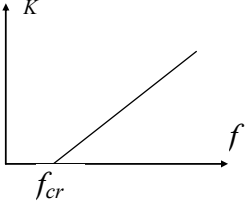
Η κβαντική φύση της ακτινοβολίας είναι έκδηλη στις υψηλές συχνότητες (μικρά μήκη κύματος) ενώ στο όριο των χαμηλών συχνοτήτων ( $f \rightarrow 0$ ,  $\lambda \rightarrow \infty$ ) αποκαθίσταται πλήρως ή ισχύς της κλασικής Φυσικής.

## Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο (Κβαντική περιγραφή)

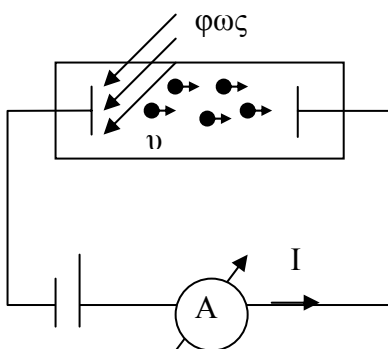
### Η φωτοηλεκτρική εξίσωση Einstein

$$hf = W + \frac{1}{2}mv^2$$

#### και οι συνέπειες της

1	$f \geq f_{cr} = W / h$	Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο είναι δυνατό μόνο όταν η συχνότητα της ακτινοβολίας υπερβαίνει μια κρίσιμη τιμή.
2	Δεν υπάρχει χρόνος καθυστέρησης διότι η αναγκαία για την εξαγωγή του ηλεκτρονίου ενέργεια προσλαμβάνεται σχεδόν ακαριαία, με την απορρόφηση ολόκληρης της ενέργειας ενός φωτονίου.	
3	<p>Η κινητική ενέργεια</p> $K \left( = \frac{1}{2}mv^2 \right) = hf - W$ <p>των φωτοηλεκτρονίων αυξάνει γραμμικά με τη συχνότητα της ακτινοβολίας.</p>	
4	Το φωτοηλεκτρικό ρεύμα αυξάνει ανάλογα με την ένταση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας	

#### Η πειραματική διάταξη



#### Υπολογισμός της ταχύτητας $v$

$$\frac{1}{2}mv^2 = K = hf - W \Rightarrow \frac{1}{2}mc^2 \left( \frac{v}{c} \right)^2 = K$$

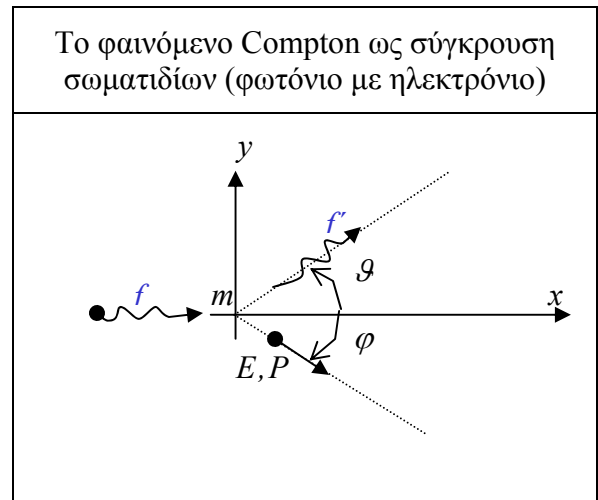
$$\Rightarrow \frac{v}{c} = \sqrt{\frac{2K(eV)}{mc^2(eV)}}$$

Βολικός τρόπος υπολογισμού διότι τόσο το  $K=hf-W$  όσο και η ενέργεια ηρεμίας  $mc^2 = 0,5MeV$  δίδονται ή είναι γνωστά, σε  $eV$ .

## Το φαινόμενο Compton

[Η αλλαγή μήκους κύματος της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας κατά τη σκέδασή της από φορτισμένα σωματίδια]

Το φως ως σωματίο	
Ενέργεια, μάζα και ορμή του φωτονίου	
Ενέργεια	$\epsilon = hf = \frac{hc}{\lambda}$
Μάζα	$\mu = \frac{\epsilon}{c^2} = \frac{hf}{c^2}$
Ορμή	$p = \mu c = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda}$



### Εξισώσεις διατήρησης ορμής και ενέργειας

Ορμή-x	πριν	μετά
	$\frac{hf}{c} + 0$	$= \frac{hf'}{c} \cos \vartheta + P \cos \varphi$
Ορμή-y	$0 + 0$	$= \frac{hf'}{c} \cos \vartheta - P \cos \varphi$
Ενέργεια	$hf + mc^2 = hf' + E$ ( $E = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}$ )	

### Ο τύπος του Compton

$$\Delta\lambda \equiv \lambda' - \lambda = \lambda_c (1 - \cos \vartheta)$$

$$\lambda_c = \frac{h}{mc} = 2,4 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}$$

[ $\lambda_c$ : Μήκος κύματος Compton του ηλεκτρονίου]

**Βασικό συμπέρασμα:** Το φαινόμενο Compton γίνεται αισθητό μόνο όταν το μήκος κύματος της ακτινοβολίας πλησιάζει το μήκος κύματος Compton του ηλεκτρονίου.

## Το πλανητικό μοντέλο του ατόμου και η αδυναμία της Κλασικής Φυσικής να εξηγήσει τη σταθερότητά του

### I. Το πείραμα του Rutherford

Το πείραμα	...το αποτέλεσμα
	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ένα αξιοσημείωτο ποσοστό των σωματιδίων της δέσμης σκεδάζονται σε <b>μεγάλες γωνίες</b> που φτάνουν μέχρι και τις <math>180^\circ</math> (πλήρης οπισθοσκέδαση)</li> </ul> <p style="text-align: center;"><b>...και η εξήγηση</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Η σκέδαση σε μεγάλες γωνίες οφείλεται στην ύπαρξη ενός μαζικού μικροσκοπικού πυρήνα που παραμένει ακίνητος καθώς τον πλησιάζουν τα σωματίδια <math>\alpha</math> και μπορεί έτσι να ασκήσει πάνω τους μια μεγάλη απωστική δύναμη ικανή να τα εκτρέψει αισθητά από την ευθύγραμμη τροχιά τους.</li> </ul>

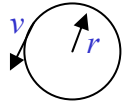
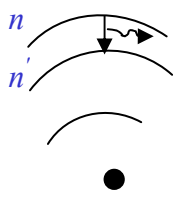
### II. ... και το μυστήριο της ατομικής σταθερότητας

Οι δύο βασικές πηγές αστάθειας του κλασικού ατόμου		
1	Η εκπομπή ΗΜ ακτινοβολίας	Ως φορτισμένα σωματίδια που εκτελούν επιταχυνόμενη κίνηση, τα ατομικά ηλεκτρόνια θα εκπέμπουν ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, με αναπόφευκτο τέλος την πτώση τους πάνω στον πυρήνα λόγω συνεχούς απώλειας ενέργειας. Προβλεπόμενος χρόνος πτώσεως, σύμφωνα με την Κλασική Φυσική, $\sim 10^{-10}$ sec.
2	Οι κρούσεις με άλλα άτομα	Ακόμα όμως και χωρίς εκπομπή ακτινοβολίας τα κλασικά άτομα θα ήταν ασταθείς κατασκευές λόγω των κρούσεων τους με άλλα άτομα ( $\sim 10^9$ ανά sec), οι οποίες θα προκαλούσαν διαρκή μεταβολή των ηλεκτρονικών τροχιών με αποτέλεσμα κανένα άτομο να μην έχει ποτέ σταθερή μορφή.

### Συμπέρασμα

Μέσα στο πλαίσιο της Κλασικής Φυσικής η ύπαρξη ατόμων με σταθερή φυσικοχημική συμπεριφορά – μια βασική προϋπόθεση για την ίδια την ύπαρξή μας – είναι **αδύνατη**. Κλασικό άτομο δεν είναι δυνατόν να υπάρξει.

## Η θεωρία του Bohr I

1	Οι συνθήκες του Bohr για το άτομο του Υδρογόνου		
1 <sup>η</sup> συνθήκη	$l = n \hbar$	Επιτρέπονται μόνο εκείνες οι κυκλικές τροχιές για τις οποίες η στροφορμή του ηλεκτρονίου είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της σταθεράς του Planck, $\hbar (=h/2\pi)$ .	
2 <sup>η</sup> συνθήκη	$E_n - E_{n'} = \hbar f$ $n > n'$	Κατά την παραμονή του σε μια κβαντωμένη τροχιά το ηλεκτρόνιο δεν ακτινοβολεί. Ακτινοβολία εκπέμπεται μόνο κατά τη μετάπτωση του $e$ από μια ανώτερη σε μια κατώτερη τροχιά, και τότε η ενέργεια του εκπεμπόμενου φωτονίου δίδεται από την ενεργειακή διαφορά των δύο τροχιών.	

2	Τα βασικά αποτελέσματα		
Επιτρεπόμενες ακτίνες	$r_n = \frac{\hbar^2}{me^2} n^2 = n^2 a_0$ , $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,5 \text{ \AA} = \text{ακτίνα του Bohr}$		Προκύπτουν με λύση του συστήματος
Επιτρεπόμενες ταχύτητες	$v_n = \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{n} = \frac{\alpha c}{n}$ , $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} = \text{σταθερά λεπτής υφής}$		$m v r = n \hbar$ $m \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}$
Επιτρεπόμενες ενέργειες	$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}, n = 1, 2, \dots$		$E = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{e^2}{r}$

3	... και ο εμπειρικός τους έλεγχος		
Ατομική ακτίνα	$r_1 = a_0 = 0,5 \text{ \AA}$	Η ακτίνα της θεμελιώδους τροχιάς (=ακτίνα του ατόμου) συμπίπτει με την πειραματική τιμή που είναι γύρω στο μισό Angstrom.	
Έργο ιονισμού	$W_1 = -E_1 = 13,6 \text{ eV}$	Το προβλεπόμενο έργο ιονισμού του ατόμου συμπίπτει ακριβώς με την πειραματική τιμή των 13,6 eV.	
Ατομικά φάσματα	$f = \frac{E_n - E_{n'}}{h} = R \left( \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ , $R = 3,27 \cdot 10^{15} \text{ sec}^{-1}$	Ο θεωρητικός τύπος για τις επιτρεπόμενες συχνότητες συμπίπτει ακριβώς με τον τύπο του Balmer.	

## Η θεωρία του Bohr II

Το κλασικό όριο της θεωρίας του Bohr			
1	Το όριο των μεγάλων κβαντικών αριθμών [Αρχή της αντιστοιχίας]	2	Το όριο $\hbar \rightarrow 0$ ή $m \rightarrow \infty$
	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Στο όριο <math>n \rightarrow \infty</math> (μεγάλοι κβαντικοί αριθμοί) η θεωρία του Bohr οφείλει να αναπαράγει τα αντίστοιχα κλασικά αποτελέσματα.</li> <li>• Ο ΛΟΓΟΣ: Για <math>n \rightarrow \infty</math> οι ακτίνες των επιτρεπόμενων τροχιών, <math>r_n = n^2 a_0</math>, διαρκώς μεγαλώνουν, οπότε το <math>e</math> κινείται πλέον σε μεγάλες τροχιές όπου θα πρέπει να επαναβεβαιώνεται η ισχύς των κλασικών νόμων.</li> <li>• ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ: Για μεγάλα <math>n</math> η «συχνότητα Bohr» της μετάπτωσης <math>n \rightarrow n-1</math> θα πρέπει να τείνει στην κλασική συχνότητα περιφοράς του <math>e</math> στην τροχιά <math>n</math> ή <math>n-1</math>. [Η διαφορά είναι αμελητέα για μεγάλα <math>n</math>]</li> </ul>		<ul style="list-style-type: none"> <li>• Τα κλασικά αποτελέσματα πρέπει επίσης να επανέρχονται και στο όριο <math>\hbar \rightarrow 0</math> (προφανές) ή <math>m \rightarrow \infty</math>, διότι για σώματα μακροσκοπικά μεγάλης μάζας θα πρέπει να ισχύει πλήρως η Κλασική Φυσική.</li> <li>• <b>Αντίθετα</b>, στο όριο <math>\hbar \rightarrow \infty</math> ή <math>m \rightarrow 0</math> (ισχυρό κβαντικό όριο) τα καθαυτό κβαντικά φαινόμενα θα πρέπει να γίνονται όλο και εντονότερα.</li> <li>• ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ: Για <math>\hbar \rightarrow 0</math> ή <math>m \rightarrow \infty</math> οι κβαντικοί τύποι <math>a_0 = \hbar^2 / me^2</math> και <math>E_1 = -me^4 / 2\hbar^2</math> θα πρέπει να τείνουν στις κλασικά αναμενόμενες τιμές <u>μηδέν</u> και <u>μείον άπειρο</u> αντίστοιχα, διότι αυτή είναι η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας στην Κλασική Φυσική όπου το <math>e</math> έχει πέσει στον πυρήνα.</li> </ul>

Κβάντωση = Σταθερότητα [Η ιδέα – κλειδί της θεωρίας του Bohr]
<p>Στα πλαίσια της θεωρίας του Bohr τα άτομα στη θεμελιώδη τους κατάσταση είναι σταθερά, <u>ενάντια σε κρούσεις</u>, διότι:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>a) Δεν μπορούν να πάνε πιο κάτω εφόσον δεν υπάρχει διαθέσιμη ενεργειακή στάθμη (χαμηλότερη τροχιά)</li> <li>b) Δεν μπορούν να πάνε ούτε πιο πάνω διότι η ενέργεια που δέχονται λόγω κρούσεων – <math>(KT)_{\delta\omega\mu\alpha\tau\iota\omicron\nu} \approx 1/40 \text{ eV}</math> – είναι αμελητέα σε σύγκριση με την ενεργειακή διαφορά των 10,2 eV που χωρίζει τη θεμελιώδη από την αμέσως επόμενη στάθμη.</li> </ul> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Έτσι, παρά τη βιαιότητα και τη συχνότητα των θερμικών τους κρούσεων και το τεράστιο ενδοατομικό κενό, τα άτομα (στη θεμελιώδη τους κατάσταση) συμπεριφέρονται πράγματι σαν ατσάλινες απαραμόρφωτες σφαίρες.</li> <li>▪ Αποκλείοντας τις βαθμιαίες και συνεχείς αλλαγές στην κατάσταση των ατόμων – και επιτρέποντας μόνο μεγάλες και ασυνεχείς μεταβολές – η κβάντωση αναδεικνύεται ως ο φυσιολογικός μηχανισμός εξήγησης του μυστηρίου της ατομικής σταθερότητας. Η εννοιολογική εξίσωση ΚΒΑΝΤΩΣΗ = ΣΤΑΘΕΡΟΤΗΤΑ αποτελεί τη βασική συμβολή της θεωρίας του Bohr στην ανάπτυξη της Κβαντικής Φυσικής.</li> </ul>



## Η Υπόθεση του de Broglie

### [Ο κυματοσωματιδιακός δυϊσμός της ύλης]

#### I. Η υπόθεση

Όλα τα σωματίδια έχουν ταυτόχρονα και κυματική συμπεριφορά δίπλα στη σωματιδιακή, με κυματικά χαρακτηριστικά  $f$  και  $\lambda$  που συνδέονται με τα σωματιδιακά  $E$  και  $p$  μέσω των σχέσεων

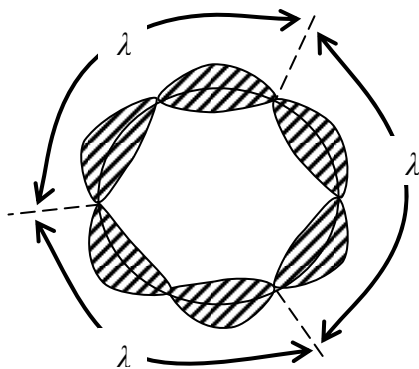
$$f = \frac{E}{h}, \quad \lambda = \frac{h}{p}$$

που είναι ταυτόσημες με εκείνες για τα φωτόνια αλλά λυμένες ως προς  $f$  και  $\lambda$ .

**Δηλαδή:** Κάθε **σωματίδιο** ενέργειας  $E$  και ορμής  $p$  συμπεριφέρεται **και** σαν ένα **κύμα** μήκους κύματος  $\lambda = h/p$  και συχνότητας  $f = E/h$

#### II. ....και οι συνέπειές της

[Η συνθήκη κβάντωσης του Bohr ως συνέπεια της υπόθεσης De Broglie]



**Συνθήκη δημιουργίας στάσιμων κυμάτων.** Επιτρέπονται μόνο εκείνες οι τροχιές πάνω στις οποίες «χωράει» ένας ακέραιος αριθμός μηκών κύματος.

**Δηλαδή:**

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

$$\Rightarrow 2\pi r = n \frac{h}{p} \Rightarrow 2\pi(r \cdot p) = nh$$

$$\Rightarrow r \cdot p = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

$$\Rightarrow \boxed{\ell = n\hbar}$$

**Συμπέρασμα:** Η συνθήκη κβάντωσης του Bohr δεν είναι τίποτε άλλο παρά η συνθήκη δημιουργίας στάσιμων κυμάτων πάνω σε μία κυκλική τροχιά.

## Παλιά Κβαντική Θεωρία

[Συγκεντρωτικό τυπολόγιο]

Μέλαν σώμα	
Stefan – Boltzmann	Wien
$I = \sigma T^4$	$\lambda_{max}(cm) = \frac{0,3}{T(^{\circ}K)}$

Φωτοηλεκτρικό Φαινόμενο
$hf = W + \frac{1}{2}m\omega^2$
[Φωτοηλεκτρική εξίσωση Einstein] (προφανής)

Φαινόμενο Compton
$\Delta\lambda \equiv \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta)$
[Μετατόπιση Compton]

Θεωρία του Bohr [ $\ell = n\hbar$ ]	
Επιτρεπόμενες ακτίνες	$r_n = n^2 a_o, \quad a_o = \frac{\hbar^2}{me^2}$
Επιτρεπόμενες ταχύτητες	$v_n = \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{n} \equiv \frac{ac}{n}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$
Επιτρεπόμενες ενέργειες	$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} eV$

Αρχή του κυματοσωματιδιακού διΐσμου	
Για το φως	Για τα σωματίδια
$\varepsilon = hf \quad \text{ή} \quad \varepsilon = \hbar\omega$	$f = \frac{\varepsilon}{h}$
$p = \frac{h}{\lambda} \quad \text{ή} \quad p = \hbar k$	$\lambda = \frac{h}{p}$
( $\omega = 2\pi f, \quad k = 2\pi / \lambda$ )	

## Η Εξίσωση του Schrödinger ....

### Κατευθυντήριες σκέψεις:

1. Η σωστή μαθηματική περιγραφή των υλικών κυμάτων απαιτεί την χρήση μιας **κυματικής εξίσωσης** ανάλογης (αλλά όχι ταυτόσημης) με εκείνη των κλασικών κυμάτων.
2. Στην Κλασική Φυσική ένα κύμα καθορισμένου μήκους κύματος  $\lambda$  (και κυματαριθμού  $k=2\pi/\lambda$ ) περιγράφεται από τη συνάρτηση  $y = A \sin(2\pi x / \lambda) = A \sin(kx)$  και ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση ( $\Delta.E.$ )  $y'' + k^2 y = 0$ .
3. Κατ' αναλογία με τα κλασικά κύματα, υποθέτουμε ότι η **κυματοσυνάρτηση**  $\psi(x)$  ενός υλικού κύματος κυματαριθμού  $k = p / \hbar$  ικανοποιεί τη  $\Delta.E.$

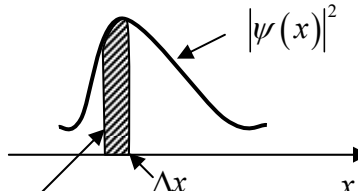
$$\psi'' + k^2 \psi = \psi'' + \frac{p^2}{\hbar^2} \psi = 0 \quad (1)$$

4. ...κι αν υποθέσουμε επιπλέον ότι η (1) ισχύει και όταν το σωματίδιο κινείται υπό την επίδραση ενός δυναμικού  $V(x)$ , τότε θα είναι  $E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \Rightarrow p^2 = 2m(E - V(x))$ , τότε η (1) καταλήγει στην “**εξίσωση Schrödinger**”  $\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0$  ως υποψήφια θεμελιώδη εξίσωση της Κβαντικής Φυσικής.

Εξίσωση Schrödinger *	
$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0$	1-D
$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x, y, z))\psi = 0,$  $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$	3-D

\* Η, ακριβέστερα, **χρονοανεξάρτητη Εξίσωση Schrödinger**

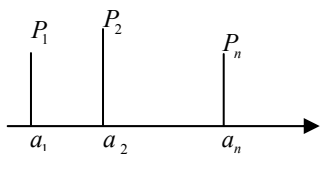
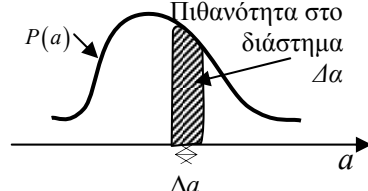
### ...και η στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης (I)

$P(x) =  \psi(x) ^2$ <hr/> $\int_{-\infty}^{+\infty}  \psi(x) ^2 dx = 1$ Συνθήκη κανονικοποίησης <hr/> 	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Η κυματοσυνάρτηση δεν περιγράφει ένα μετρήσιμο φυσικό κύμα αλλά ένα <b>κύμα πιθανότητας</b>. Το τετράγωνο της απόλυτης τιμής της δίνει την <b>πιθανότητα ανά μονάδα μήκους</b> να βρούμε το σωματίδιο στη γειτονιά του σημείου <math>x</math>.</li> <li>➤ Η στατιστική ερμηνεία της <math>\psi</math> αίρει την αντίφαση «σωματίδιο – κύμα», διότι τώρα το κύμα περιγράφει την πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο εδώ ή εκεί αλλά ποτέ εδώ και εκεί ταυτόχρονα.</li> <li>➤ Αναγκαία συνθήκη για να είναι μια κυματοσυνάρτηση φυσικά παραδεκτή είναι <b>να μηδενίζεται στο <math>\pm\infty</math></b>.</li> </ul>
---	--

## Η στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης Ψ

### [Μέση θέση και αβεβαιότητα θέσης]

#### A: Ανασκόπηση των βασικών στατιστικών εννοιών

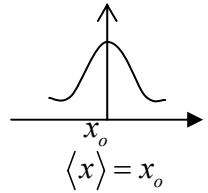
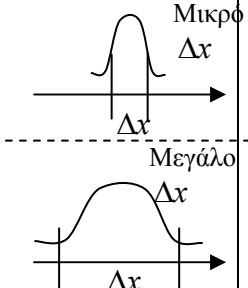
	Διάκριτη κατανομή	Συνεχής κατανομή
		
Μέση τιμή	$\langle A \rangle = \sum_n a_n P_n$	$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} a P(a) da$
	<p>Η μέση τιμή ισούται με το άθροισμα των δυνατών τιμών του μεγέθους πολλαπλασιασμένων με τις αντίστοιχες πιθανότητες.</p>	<p>Η μέση τιμή ισούται με το ολοκλήρωμα του γινομένου της στατιστικής μεταβλητής επί την αντίστοιχη πυκνότητα πιθανότητας.</p>
Διασπορά ή αβεβαιότητα	$(\Delta A)_{op}^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$ <p>Το τετράγωνο της αβεβαιότητας (ή διασποράς) ισούται με:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Τη μέση τιμή της τετραγωνισμένης απόκλισης από τη μέση τιμή (ορισμός).</li> <li>2. Τη μέση τιμή του τετραγώνου μείον το τετράγωνο της μέσης τιμής (συνέπεια).</li> </ol>	
	$\langle A^2 \rangle = \sum_n a_n^2 P_n$	$\langle A^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 P(a) da$
	$\sum_n P_n = 1$	$\int_{-\infty}^{+\infty} P(a) da = 1$

$$\sum_n \rightarrow \int da$$

Διακριτό → Συνεχές

#### B: Εφαρμογή στην Κβαντομηχανική

$$[ a \rightarrow x, P(a) \rightarrow P(x) = |\psi(x)|^2 ]$$

Μέση θέση	$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x  \psi(x) ^2 dx$	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Αποτελεί χονδρική ένδειξη για το πού περίπου βρίσκεται το σωματίδιο.</li> <li>➤ Για μια συμμετρική κατανομή η μέση θέση βρίσκεται στο κέντρο συμμετρίας της</li> </ul>	
Αβεβαιότητα θέσης	$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ $\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2  \psi(x) ^2 dx$	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Αποτελεί ένα χονδρικό μέτρο του εύρους της περιοχής γύρω από τη μέση τιμή μέσα στην οποία με μεγάλη πιθανότητα βρίσκεται το σωματίδιο.</li> <li>➤ Οι «ψιλόλιγνες» κυματοσυναρτήσεις έχουν μικρό <math>\Delta x</math> και οι «κοντόχοντρες» μεγάλο.</li> </ul>	

## Η αρχή της αβεβαιότητας

### [Φυσική εξήγηση και εφαρμογές]

#### Η αρχή

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Το γινόμενο των αβεβαιοτήτων θέσης ορμής δεν μπορεί ποτέ να γίνει μικρότερο από το μισό της σταθεράς του Planck

#### ...η φυσική της εξήγηση

$\Delta p_y = p \tan \vartheta \approx p \cdot \vartheta \approx \frac{h}{\lambda} \cdot \frac{\lambda}{2D} = \frac{h}{2D}$

$D \cdot \Delta p_y = \Delta y \cdot \Delta p_y \approx \frac{h}{2}$

Λόγω της κυματικής φύσης του σωματιδίου κάθε απόπειρα να μετρήσουμε τη θέση του περνώντας το από μια σχισμή προκαλεί άνοιγμα της δέσμης (≡ περίθλαση) και άρα αβεβαιότητα στην αντίστοιχη συνιστώσα της ορμής του.  
**ΑΡΧΗ ΤΗΣ ΑΒΕΒΑΙΟΤΗΤΑΣ ΕΙΝΑΙ ΑΠΑΠΟΔΡΑΣΤΗ ΣΥΝΕΠΕΙΑ ΤΟΥ ΚΥΜΑΤΟΣΩΜΑΤΙΔΙΑΚΟΥ ΔΥΪΣΜΟΥ ΤΗΣ ΥΛΗΣ**

#### ...η βασική της συνέπεια

### [Η αντίσταση στον εντοπισμό]

$\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar$   
 $\Rightarrow \Delta p \approx \frac{\hbar}{a}$   
 $\bar{E}_K = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\Delta p)^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2}$   
 $\Rightarrow \bar{E}_K \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2}$

Τα κβαντικά σωματίδια «αντιδρούν» στον εντοπισμό αυξάνοντας την κινητική τους ενέργεια. Ένα σωματίδιο μάζας  $m$  απλώς και μόνο επειδή βρίσκεται παγιδευμένο σε μια περιοχή διαστάσεως  $a$  θα έχει μια μέση κινητική ενέργεια ίση με

$$\bar{E}_K \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

#### ...και οι δύο θεμελιώδεις εφαρμογές της

#### I: Η σταθερότητα και το μέγεθος των ατόμων

$E(a) = E_K + E_\Delta$   
 $\approx \frac{\hbar^2}{2ma^2} - \frac{e^2}{a}$   
 $\frac{dE}{da} = 0 \Rightarrow a = a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$

Το άτομο ούτε μικρότερο μπορεί να γίνει – διότι τότε μειώνεται μεν η δυναμική του ενέργεια αλλά αυξάνει υπέρμετρα η κινητική – ούτε όμως και μεγαλύτερο – διότι τότε μειώνεται μεν η κινητική αυξάνεται όμως υπερβολικά η δυναμική.  
 Η ελάχιστη ολική ενέργεια του ατόμου επιτυγχάνεται όταν η ακτίνα του γίνει ίση με την ακτίνα του Bohr.

**ΠΑΡΟΤΙ ΚΟΥΦΙΟ ΤΟ ΑΤΟΜΟ ΕΙΝΑΙ ΣΤΑΘΕΡΟ ΚΑΙ ΑΣΥΜΠΙΕΣΤΟ ΛΟΓΩ ΤΗΣ ΑΡΧΗΣ ΤΗΣ ΑΒΕΒΑΙΟΤΗΤΑΣ**

#### II: Το μέγεθος των πυρηνικών ενεργειών

$E_{\pi p} \approx \frac{\hbar^2}{2m_p R^2} = \frac{\hbar^2}{2m_c a_0^2} \left(\frac{a_0}{R}\right)^2 \frac{m_e}{m_p}$   
 $\Rightarrow E_{\pi p} \approx 13,6 \text{ eV} \cdot 10^5 \frac{1}{1843}$   
 $\Rightarrow E_{\pi p} \approx \text{μερικά MeV}$

Οι πυρηνικές ενέργειες είναι κατά ένα εκατομμύριο φορές μεγαλύτερες από τις ατομικές (ενέργειες των ηλεκτρονίων στα άτομα)

**Ο ΠΥΡΗΝΑΣ ΕΙΝΑΙ ΕΝΑΣ ΓΙΓΑΝΤΑΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ ΑΚΡΙΒΩΣ ΕΠΕΙΔΗ ΕΙΝΑΙ ΕΝΑΣ ΝΑΝΟΣ ΜΕΓΕΘΟΥΣ.**

## Η στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης III

[Μέσες τιμές και αβεβαιότητες για όλα τα φυσικά μεγέθη]

### Ο κβαντικός τύπος της μέσης τιμής

Για κάθε δεδομένη κυματοσυνάρτηση  $\psi$  η μέση τιμή των αποτελεσμάτων των μετρήσεων ενός τυχόντος φυσικού μεγέθους  $A$  δίδεται από τον τύπο

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^* (\hat{A}\psi) dx$$

Όπου  $\hat{A}$  ένας κατάλληλος για το κάθε φυσικό μέγεθος τελεστής.

**Τελεστής**  $\equiv$  κάθε «πράξη» που μπορεί να εκτελεστεί επί μιας συναρτήσεως  $\psi(x)$  και να δώσει μια άλλη συνάρτηση  $\phi(x)$ .

**Παραδ. 1:**  $\hat{A} = x \equiv$  πολλαπλασιασμός των συναρτήσεων επί  $x$

**Παραδ. 2:**  $\hat{A} = \frac{d}{dx} \equiv$  παραγώγιση των συναρτήσεων ως προς  $x$

### ...και οι αντίστοιχοι κβαντικοί τελεστές

**Τελεστής θέσης:**  $\hat{x} = x$

Απόρροια του τύπου  $\langle x \rangle = \int x |\psi(x)|^2 dx \equiv \int x \psi^* \psi dx \equiv \int \psi^* (x\psi) dx$

**Τελεστής ορμής:**  $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$

Τυχόν άλλο μέγεθος  $A = A(x, p)$

$$\hat{A} = A(\hat{x}, \hat{p}) \equiv A\left(x, -i\hbar \frac{d}{dx}\right)$$

Όπου  $A=A(x,p)$  η κλασσική έκφραση του μεγέθους συναρτήσεως των βασικών φυσικών μεγεθών  $x$  και  $p$ .

**ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ: (Τελεστής Ενέργειας)**

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

### Μέση ορμή, αβεβαιότητα ορμής και ο μαθηματικός μηχανισμός της αρχής της αβεβαιότητας

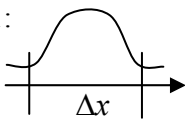
$$\langle p \rangle = \int \psi^* (\hat{p}\psi) dx \equiv \int \psi^* (-i\hbar \psi') dx \Rightarrow \langle p \rangle = 0 \text{ όταν } \psi = \text{πραγματική συνάρτηση}$$

$$\langle p^2 \rangle = \int \psi^* (\hat{p}^2\psi) dx \equiv \int \psi^* (-i\hbar^2 \psi'') dx \xrightarrow[\text{ολοκλήρωση}]{\text{παραγοντική}} \langle p^2 \rangle = \hbar^2 \int |\psi'|^2 dx$$

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \langle p^2 \rangle \equiv \hbar^2 \int |\psi'|^2 dx$$

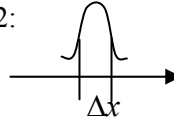
**ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ:** Η αβεβαιότητα ορμής αποτελεί ένα μέτρο του πόσο μεγάλες κλίσεις – πόσο απότομα «σκαμπανεβάσματα» - έχει μια δεδομένη κυματοσυνάρτηση.

Παρ. 1:



Πλατιά  $\psi(x)$  [μεγάλο  $\Delta x$ ]  $\Rightarrow$  μικρές κλίσεις  $\Rightarrow$  Μικρό  $\Delta p$

Παρ. 2:



Στενή  $\psi(x)$  [μικρό  $\Delta x$ ]  $\Rightarrow$  μεγάλες κλίσεις  $\Rightarrow$  Μεγάλο  $\Delta p$

Η αντίστροφη σχέση των  $\Delta x$  και  $\Delta p$  είναι προφανής και αποκαλύπτει τον μαθηματικό μηχανισμό πίσω από την αρχή της αβεβαιότητας  $\Delta x \Delta p \geq \hbar / 2$  που φαίνεται πλέον ως μια καθαρά μαθηματική ανισότητα με  $\Delta x$  και  $\Delta p$  που ορίζονται αυστηρά όταν η κυματοσυνάρτηση  $\psi(x)$  του σωματιδίου είναι γνωστή.

### Κυματοσυναρτήσεις μηδενικής αβεβαιότητας

**ΘΕΩΡΗΜΑ:** Αν μια κυματοσυνάρτηση  $\psi$  ικανοποιεί την «εξίσωση ιδιοτιμών»  $\hat{A}\psi = a\psi$  όπου  $\hat{A}$  ο κβαντικός τελεστής του μεγέθους  $A$  και  $a$  ένας αριθμός (ή ιδιοτιμή) τότε η αβεβαιότητα του μεγέθους μηδενίζεται.

**ΑΠΟΔΕΙΞΗ:** Αν  $\hat{A}\psi = a\psi \Rightarrow \langle A \rangle = \int \psi^* (\hat{A}\psi) dx$

$$= \int \psi^* (a\psi) dx = a \int \psi^* \psi dx = a \int |\psi|^2 dx = a$$

Και παρόμοια,  $\langle A^2 \rangle = \int \psi^* (\hat{A}^2\psi) dx =$

$$= \int \psi^* (a^2\psi) dx = a^2 \int |\psi|^2 dx = a^2$$

$$\Rightarrow (\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = a^2 - a^2 = 0$$

Η μόνη τιμή που μπορεί να προκύψει από τις μετρήσεις του μεγέθους  $A$  είναι ιδιοτιμή  $a$ .

### ...και οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger

**ΠΟΡΙΣΜΑ:** Οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\psi = 0$$

αντιπροσωπεύουν καταστάσεις του σωματιδίου για τις οποίες η αβεβαιότητα της ενέργειάς του μηδενίζεται ( $\Delta E=0$ ).

**ΑΠΟΔΕΙΞΗ:** Η εξίσωση Schrödinger δεν είναι παρά η εξίσωση ιδιοτιμών  $\hat{H}\psi = E\psi$  του τελεστή ενέργειας

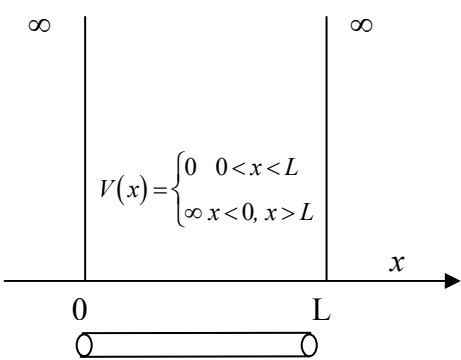
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x).$$

**ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ:** Οι ενέργειες που προκύπτουν από τη λύση της εξίσωσης Schrödinger είναι **αυστηρά καθορισμένες**. Η αβεβαιότητα της ενέργειας μηδενίζεται.

## Σωματίδιο σ' ένα σωληνάκι

[Η κβάντωση ως ένα καθαρά μαθηματικό αποτέλεσμα της εξίσωσης Schrödinger]

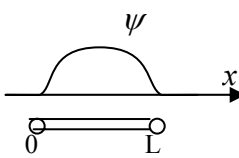
### Το πρόβλημα



$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ \infty & x < 0, x > L \end{cases}$$

Το σωματίδιο κινείται ελεύθερα μέσα στο σωλήνα χωρίς όμως να μπορεί να εξέλθει απ' αυτό.

### Η μαθηματική του διατύπωση



$\Rightarrow \psi(0) = \psi(L) = 0$

- Η  $\psi$  είναι μηδέν έξω από το σωλήνα (αφού η πιθανότητα να βρεθεί εκεί είναι μηδενική) οπότε – λόγω συνέχειας – και οι τιμές στο εσωτερικό του σωλήνα θα μηδενίζονται στα άκρα του.
- Επομένως το μαθηματικό πρόβλημα είναι να λυθεί η εξίσωση Schrödinger με  $V(x)=0$  (εσωτερικό του σωλήνα) και με την απαίτηση να μηδενίζεται η λύση στα άκρα του.

### Η λύση

$$\Delta E. \psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi \equiv \psi'' + k^2 \psi = 0, \quad \frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$$

$$\Rightarrow \psi = A \sin kx + B \cos kx$$

$$\Rightarrow \psi(0) = A \cdot 0 + B \cdot 1 = 0 \Rightarrow B = 0$$

$$\Rightarrow \psi = A \sin kx \Rightarrow \psi(L) = A \sin kL = 0$$

$$\Rightarrow kL = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots, \infty$$

$$\Rightarrow \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2 \pi^2}{L^2} \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

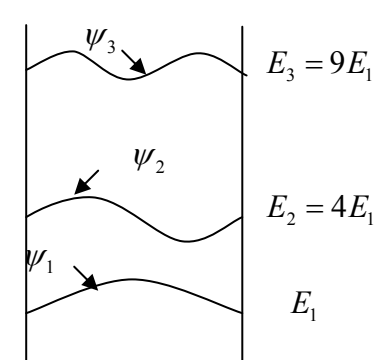
$$\Rightarrow \psi_n = A \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad n = 1, 2, \dots, \infty$$

$$\int_0^L |\psi_n|^2 dx = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$[\psi] = L^{-1/2}$$

### Τα αποτελέσματα ...

$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$ ιδιοτιμές	$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$ ιδιοσυναρτήσεις
--	--



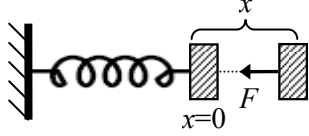
### ...και τα βασικά συμπεράσματα

**ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ 1:** Η κβάντωση της ενέργειας είναι ένα καθαρά μαθηματικό αποτέλεσμα της εξίσωσης Schrödinger. Η εξίσωση έχει λύση που ικανοποιεί τις συνθήκες του προβλήματος μόνο όταν η ενέργεια του σωματιδίου παίρνει μια διάκριτη ακολουθία τιμών.

**ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ 2:** Η ελάχιστη δυνατή ενέργεια του σωματιδίου μέσα στο σωλήνα είναι μη μηδενική και γίνεται τόσο μεγαλύτερη όσο το μήκος του σωλήνα μικραίνει. Η ακινησία των παγιδευμένων κβαντικών σωματιδίων είναι αδύνατη. Και όσο πιο παγιδευμένα είναι τόσο πιο πολύ κινούνται.

## Ο αρμονικός ταλαντωτής

### Στην Κλασική Μηχανική



$F = -kx$

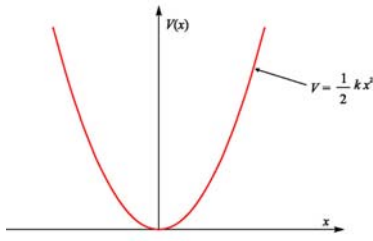
---

Εξίσωση Νεύτωνα:  $m\ddot{x} = -kx$   
 $\Rightarrow \ddot{x} + \omega^2 x = 0, \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$   
 $\Rightarrow x(t) = A \sin(\omega t + \varphi)$

---

**ΒΑΣΙΚΟ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΟ:** Η περίοδος  
 $T = \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi \sqrt{\frac{m}{k}}$   
 είναι ανεξάρτητη του πλάτους της ταλάντωσης

### Στην Κβαντομηχανική



$F = -kx = -\frac{dV}{dx}$   
 $\Rightarrow V = \frac{1}{2} kx^2$

---

Εξίσωση Schrödinger  
 $\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\psi = 0$   
 $\Rightarrow \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2} \underbrace{m\omega^2}_{k} x^2 \right) \psi = 0$

Αντιστοιχία: Εξίσωση Νεύτωνα  $\Rightarrow$  Εξίσωση Schrödinger

### Λύση της εξίσωσης Schrödinger

Φυσικό Σύστημα μονάδων  
 $\hbar = m = \omega = 1$

$\Rightarrow \psi'' + (2E - x^2)\psi = 0 \Rightarrow \psi''_{(x \rightarrow \pm\infty)} - x^2\psi_{\infty} = 0 \Rightarrow$   
 $\Rightarrow \psi_{\infty} \sim e^{\pm x^2/2} \Rightarrow \psi(x) = e^{-x^2/2} H(x)$

Εξασφαλίζει τον μηδενισμό της κυματοσυνάρτησης στο  $\pm\infty$

Πολυώνυμο του x που εξασφαλίζει την ύπαρξη του κατάλληλου αριθμού κόμβων στην κυματοσυνάρτηση

$\psi'' + (2E - x^2)\psi \Big|_{\psi = e^{-x^2/2} H(x)} = 0 \Rightarrow H'' - 2xH' + (2E - 1)H = 0 : \text{ Εξίσωση Hermite}$

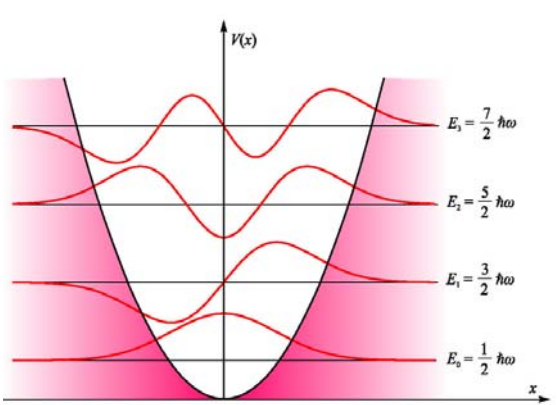
$H(x) \equiv H_n(x)$  πολυώνυμα Hermite: εναλλάξ άρτια και περιττά

$n = 0 \Rightarrow H_0(x) = 1 \Rightarrow (2E - 1) \cdot 1 = 0 \Rightarrow E_0 = 1/2$

$n = 1 \Rightarrow H_1(x) = x \Rightarrow 0 - 2x \cdot 1 + (2E - 1) \cdot x = 0 \Rightarrow E_1 = 3/2$

$n = 2 \Rightarrow H_2(x) = x^2 + c \Rightarrow 2 - 2x \cdot 2x + (2E - 1) \cdot (x^2 + c) = 0 \Rightarrow E_2 = 5/2, c = -1/2$

### ... και τα αποτελέσματά της



$E_n = n + \frac{1}{2}, \quad \psi_n(x) = c^{-x^2/2} H_n(x)$   
 $H_0 = 1, H_1 = x, H_2 = 2x^2 - 1, \dots$ 


---

Αποκατάσταση των διαστάσεων

$$E_n \rightarrow \varepsilon E_n, \quad \psi_n(x) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{a}} \psi_n(x/a)$$

$\varepsilon, a$ , οι φυσικές μονάδες ενέργειας και μήκους του προβλήματος

$\varepsilon = \hbar\omega$

,
  $\frac{\hbar^2}{ma^2} = \hbar\omega \Rightarrow a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$



## Το κβαντομηχανικό «σκαλοπάτι δυναμικού»

[Το φαινόμενο της ανάκλασης]

### I. Το πρόβλημα

	<p>Ένα σωματίδιο που έρχεται από αριστερά συναντά στο σημείο <math>x = 0</math> μια περιοχή (<math>x &gt; 0</math>) με δυναμική ενέργεια <math>V_0 &gt; 0</math> αλλά μικρότερη από την ενέργεια <math>E</math> του σωματιδίου. Κλασικά το σωματίδιο θα μπει σ' αυτή την περιοχή και θα συνεχίσει την κίνησή του προς τα δεξιά ενώ κβαντομηχανικά υπάρχει μια πεπερασμένη πιθανότητα να ανακλαστεί και να επιστρέψει στην περιοχή <math>x &lt; 0</math>. Και το ζητούμενο είναι να υπολογιστεί ο <u>συντελεστής ανάκλασης</u> <math>R</math> συναρτήσει της ενέργειας <math>E</math> του σωματιδίου.</p>
--	--

### II ... και η λύση του: Υπολογισμός του συντελεστή ανάκλασης

<p>Περιοχή A: <math>\psi_A'' + \underbrace{(2mE/\hbar^2)}_{k^2} \psi_A = 0 \Rightarrow \psi_A = A_+ e^{ikx} + A_- e^{-ikx}</math></p>	<p>Προσπίπτοντα σωματίδια</p>	<p>Σωματίδια που ανακλώνται</p>
<p>Περιοχή B: <math>\psi_B'' + \underbrace{(2m(E-V_0)/\hbar^2)}_{k'^2} \psi_B = 0 \Rightarrow \psi_B = B e^{-ik'x}</math></p>	<p>Σωματίδια που προχωρούν προς τα δεξιά</p>	

Συνθήκες συνέχειας της  $\psi$  και της παραγώγου της στο  $x = 0$

$$\psi_A(0) = \psi_B(0) \Rightarrow A_+ + A_- = B$$

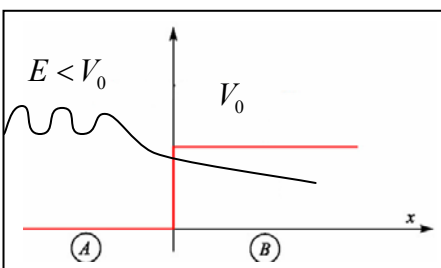
$$\psi_A'(0) = \psi_B'(0) \Rightarrow ikA_+ - ikA_- = ik'B$$

$$\text{Συντελεστής ανάκλασης: } R = \frac{\text{οπ. } |A_-|^2}{|A_+|^2} = \left( \frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 = \left( \frac{\sqrt{E/(E-V_0)} - 1}{\sqrt{E/(E-V_0)} + 1} \right)^2$$

**Συμπέρασμα:** Στην κβαντομηχανική το σωματίδιο έχει μη μηδενική πιθανότητα να ανακλαστεί στο «σκαλοπάτι» και να επιστρέψει, παρ' ότι η ενέργεια του τού επιτρέπει να συνεχίσει την κίνησή του προς τα δεξιά.

**Κλασσικό ανάλογο:** Η ανάκλαση των ΗΜ κυμάτων (π.χ. φως) κατά την (κάθετη) πρόσπτωση τους στη διαχωριστική επιφάνεια δύο μέσων με διαφορετικό δείκτη διάθλασης.

### III. Πρόσπτωση με $E < V_0$ : Διεσόδση σε κλασικά απαγορευμένες περιοχές

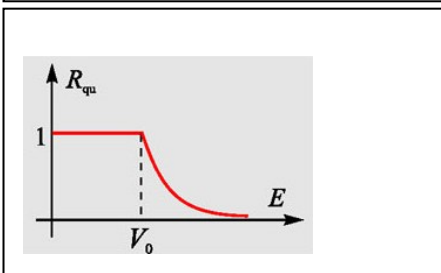


$$\psi_B'' + \underbrace{(2m(E-V_0)/\hbar^2)}_{-\gamma^2} \psi_B = 0 \Rightarrow \psi_B = B e^{-\gamma x} \quad \left| \begin{array}{l} \text{όπως προηγουμένως} \\ \text{αλλά με } k' = i\gamma \end{array} \right.$$

$$\Rightarrow R(E < V_0) = R(E > V_0) \Big|_{k'=i\gamma} = \left. \frac{|k - k'|^2}{|k + k'|^2} \right|_{k'=i\gamma} = 1$$

➤ Για  $E < V_0$  το σωματίδιο πάντα ανακλάται. Έχει όμως τη δυνατότητα να διεσόδει «προσωρινά» στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή  $x > 0$ , χωρίς πάντως να μπορεί να φτάσει ως το άπειρο λόγω της εκθετικής απόσβεσης της κυματοσυνάρτησης σ' αυτή την περιοχή.

➤ Αν όμως το σκαλοπάτι έχει πεπερασμένο πλάτος τότε η εκθετική απόσβεση θα ανακοπεί και το σωματίδιο θα καταφέρει να περάσει από την άλλη μεριά μιας κλασικά απαγορευμένης περιοχής (φαινόμενο σήραγγας).

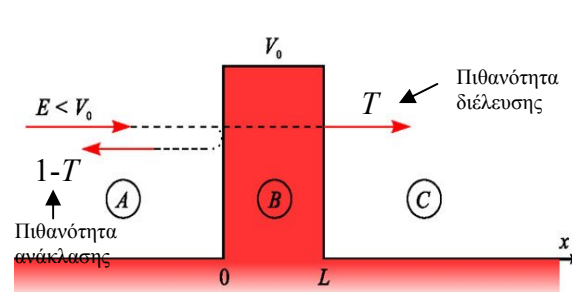


## Το φράγμα δυναμικού στην Κβαντομηχανική

[Διέλευση μέσα από κλασικά απαγορευμένες περιοχές: Το φαινόμενο της σήραγγας]

### Το βασικό αποτέλεσμα

### ...και η ποιοτική του εξήγηση

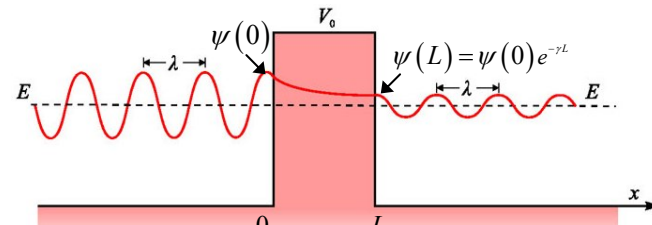


Πιθανότητα διέλευσης  $T$

Πιθανότητα ανάκλασης  $1-T$

(1) 
$$T = e^{-2\gamma L}$$
 
$$\gamma = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Στην Κβαντομηχανική ένα σωματίδιο έχει πεπερασμένη πιθανότητα να διασχίσει μια κλασικά απαγορευμένη περιοχή και να βρεθεί στην «άλλη μεριά» ενός φράγματος δυναμικού υψηλότερου από την ενέργεια του σωματιδίου.



Η κυματοσυνάρτηση υφίσταται μια εκθετική απόσβεση πλάτους μέσα στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή, οπότε ο συντελεστής διέλευσης  $T$  – που ισούται προσεγγιστικά με το τετράγωνο του λόγου των τιμών της  $\psi$  πριν και μετά το φράγμα – θα ισούται χονδρικά με

$$T \approx \left| \frac{\psi(L)}{\psi(0)} \right|^2 = |e^{-\gamma L}|^2 = e^{-2\gamma L}, \text{ όπου το } \gamma = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

προκύπτει αμέσως από τη μορφή της εξίσωσης Schrödinger στο εσωτερικό του φράγματος ( $0 < x < L$ ).

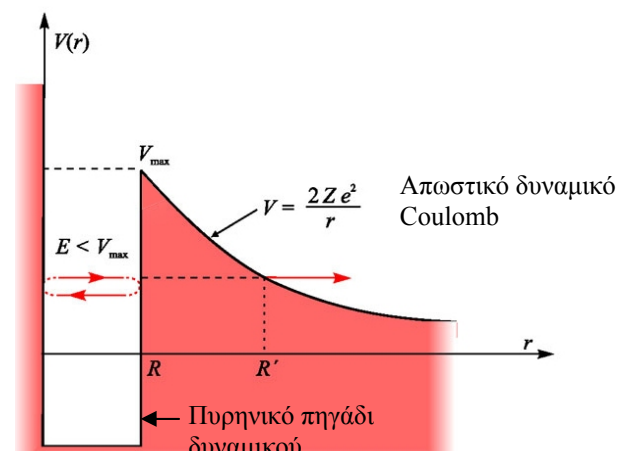
### Το βασικό «δίδαγμα»: Η εκθετική ευαισθησία του φαινομένου της σήραγγας

Η πιθανότητα διέλευσης – τύπος (1) – είναι εκθετικά ευαίσθητη στις μεταβολές του πλάτους  $L$  του φράγματος και της ενέργειας  $E$  του σωματιδίου. Μικρές μεταβολές στο  $L$  ή το  $E$  προκαλούν τεράστιες μεταβολές στην πιθανότητα διέλευσης του φράγματος.

### ...και οι εφαρμογές

#### α. Η ακτινοβολία άλφα των πυρήνων

#### β. Η πυρηνική σύντηξη στα άστρα



Απωστικό δυναμικό Coulomb  $V = \frac{2Ze^2}{r}$

Πυρηνικό πηγάδι δυναμικού

➤ Το φαινόμενο: Παρότι δεν έχει ενέργεια αρκετή για να διαφύγει από τον πυρήνα το σωματίδιο  $\alpha$  «δραπετεύει» τελικά από αυτόν χάρις στο φαινόμενο της σήραγγας.

➤ Βασική πρόβλεψη: Λόγω της εκθετικής ευαισθησίας του φαινομένου, οι χρόνοι ζωής των πυρήνων που υφίστανται διάσπαση άλφα παρουσιάζουν γιγάντιες μεταβολές συναρτήσει της ενέργειας του εκπεμπόμενου σωματιδίου  $\alpha$ .

Η εσωτερική θερμοκρασία ( $\sim 10^6 \text{ K}$ ) των άστρων δεν προσδίδει στους πυρήνες αρκετή κινητική ενέργεια ώστε να υπερβούν τη μεταξύ τους άπωση Coulomb και να «αγγίξουν» ο ένας τον άλλον, οπότε μπορεί να λάβει χώρα πυρηνική σύντηξη. Η σύντηξη παρόλα αυτά συμβαίνει – τα άστρα «δουλεύουν» – χάρις στο φαινόμενο της σήραγγας.

Οι πυρήνες δεν υπερπηδούν το μεταξύ τους φράγμα Coulomb – αφού δεν έχουν την αναγκαία ενέργεια – αλλά το διαπερνούν ανοίγοντας ...σήραγγα.

ΜΕΛΕΤΗ: Σ. Τραχανά, Κβαντομηχανική I, σελ. 261 – 276 (επιλεκτικά).

## Το άτομο του Υδρογόνου I [Καταστάσεις με σφαιρική συμμετρία]

### I. Γενικά: Η εξίσωση Schrödinger σε 3D

### II. Αναζήτηση σφαιρικά συμμετρικών λύσεων [ $\psi = \psi(r)$ ]

<p style="text-align: center;">Εξίσωση Schrödinger</p> $\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi = 0$ <p style="text-align: center;">Όπου</p> $V = V(r) = -\frac{e^2}{r}$ $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \text{ (Καρτεσιανές συντεταγμένες)}$ <p>ή</p> $\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}$ <p style="text-align: center;">(Σφαιρικές συντεταγμένες)</p> <p>➤ Για δυναμικά, όπως το <math>V = -e^2/r</math>, που εξαρτώνται μόνο από το <math>r</math> (κεντρικά δυναμικά), η χρήση του σφαιρικού συστήματος συν/νων είναι επιβεβλημένη</p>	<p>Για <math>\psi = \psi(r) \Rightarrow \nabla^2 \psi(r) \equiv \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \cdot \psi = \frac{1}{r} (r\psi)''</math></p> $\Rightarrow (r\psi)'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) r\psi = 0$ $r\psi = y \Rightarrow \boxed{y'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) y = 0}$ <p>ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ: Η βοηθητική κυματοσυνάρτηση <math>y = r\psi</math> ικανοποιεί μια μονοδιάστατη εξίσωση Schrödinger με το <math>r</math> στη θέση του <math>x</math>.</p> <p>ΣΥΝΟΡΙΑΚΕΣ ΣΥΝΘΗΚΕΣ: Για <u>δέσμιες καταστάσεις</u> (στις οποίες το σωματίδιο δεν μπορεί να διαφύγει στο άπειρο) η ακτινική εξίσωση Schrödinger θα πρέπει να λυθεί σε συνδυασμό με τις συνοριακές συνθήκες:</p> $y(0) = 0, \quad y(\infty) = 0$
---	--

### III. Λύση της ακτινικής εξίσωσης Schrödinger για το άτομο του Υδρογόνου

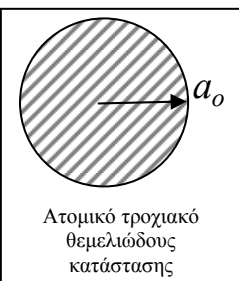
<p style="border: 1px dashed black; padding: 5px;">Ατομικό σύστημα μονάδων (A.U.) <math>\hbar = m = e = 1</math></p>	$\Rightarrow y'' + \left( 2E + \frac{2}{r} \right) y = 0 \xrightarrow{(r \rightarrow \infty)} y'' + \frac{2E}{-\gamma^2} y_\infty = 0 \Rightarrow y_\infty = e^{\pm \gamma r}$ $\Rightarrow y(r) = e^{-\gamma r} F(r)$
<p style="border: 1px dashed black; padding: 5px;">Εξασφαλίζει τον μηδενισμό της <math>y(r)</math> στο <math>\infty</math></p>	<p style="border: 1px dashed black; padding: 5px;">Πολυώνυμο που εξασφαλίζει τον κατάλληλο αριθμό κόμβων</p>
$y'' + \left( \frac{2E}{-\gamma^2} + \frac{2}{r} \right) y \Big _{y=e^{-\gamma r} F} = 0 \Rightarrow F'' - 2\gamma F' + \frac{2}{r} F = 0 \quad \left  \begin{array}{l} F = F_n(r) \text{ πολυώνυμο βαθμού } n \text{ που αρχίζει πάντα με την} \\ \text{πρώτη δύναμη } (r) \text{ ώστε να ικανοποιείται η } y(0) = 0 \end{array} \right.$	
<p>α) <math>n = 1 \Rightarrow F = F_1(r) = r \Rightarrow 0 - 2\gamma \cdot 1 + 2 = 0 \Rightarrow \gamma = 1 \Rightarrow E = E_1 = -1/2</math></p> <p>β) <math>n = 2 \Rightarrow F = F_2(r) = r + ar^2 \Rightarrow 2a - 2\gamma \cdot (1 + 2ar) + 2(1 + ar) = 0 \Rightarrow \gamma = 1/2, E_2 = -1/4, a = -1/2</math></p>	
<p>ΓΕΝΙΚΑ: <math>F = F_n(r) \Rightarrow \gamma = 1/n \Rightarrow \boxed{E_n = -1/2n^2} \quad \boxed{\psi_n(r) = e^{-r/n} F_n(r) / r}</math></p>	

### IV. Αποκατάσταση των διαστάσεων

$E_n \rightarrow \varepsilon E_n, \quad \psi_n(r) \rightarrow a^{-3/2} \psi_n(r/a)$ <p><math>a, \varepsilon</math>: Ατομικές μονάδες μήκους και ενέργειας</p> $\frac{e^2}{a} = \frac{\hbar^2}{ma^2} \Rightarrow a = \frac{\hbar^2}{me^2} = a_0 = \text{ακτίνα Bohr}$ $\varepsilon = \left( \frac{e^2}{a} \right)_{a=a_0} = \frac{me^4}{\hbar^2} = 27,2 \text{ eV} \equiv 1 \text{ Hartree}$ $E_n \left( \begin{array}{l} \text{συνήθεις} \\ \text{μονάδες} \end{array} \right) = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}$ <p><math>E_n</math> (Schrödinger) = <math>E_n</math> (Bohr)   Σύμπτωση!</p>
---

ΜΕΛΕΤΗ: Σ. Τραχανάς, *Κβαντομηχανική I*, Σελ. 323-342.

### V. Η θεμελιώδης κατάσταση του ατόμου

$\psi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$ <p>Η κυματοσυνάρτηση σβήνει στο <math>1/e</math> της «αρχικής» τιμής της για <math>r = a_0 \Rightarrow</math> το χαρακτηριστικό μέγεθος του ατόμου είναι περίπου <math>a = a_0</math></p>	 <p>Ατομικό τροχιακό θεμελιώδους κατάστασης</p>
$E_1 = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -13,6 \text{ eV} \Rightarrow W_I = 13,6 \text{ eV}$	
<p><b>Συμπέρασμα:</b> Η σύγχρονη Κβαντομηχανική (εξίσωση Schrödinger) προβλέπει σωστά τόσο το <u>μέγεθος</u> όσο και το <u>έργο ιονισμού</u> του ατόμου του Υδρογόνου.</p>	

## Το άτομο του Υδρογόνου II [ Το σύνολο των λύσεων ]

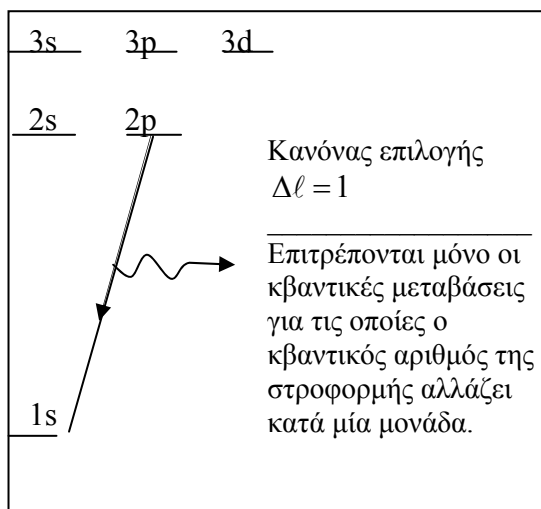
Οι κβαντικοί αριθμοί  $n, \ell, m$  και η σημασία τους

Κβαντικός αριθμός		Φυσικό νόημα		Μορφή κυματοσυναρτήσεων
Σύμβολο	Όνομα			
$n$	Κύριος κβαντικός αριθμός	$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$ $n = 1, 2, \dots, \infty$	Ορίζει την <u>ενέργεια</u> του ηλεκτρονίου	$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) \underbrace{Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)}_{\text{Σφαιρικές αρμονικές}}$
$\ell$	Κβαντικός αριθμός στροφορμής [ή μεγέθους της στροφορμής]	$ \vec{\ell}  = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ $\ell = 0, 1, \dots, (n-1)$	Ορίζει το <u>μέτρο</u> του διανύσματος της <u>στροφορμής</u>	$Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) = \underbrace{P_{\ell}^m(\cos\theta)}_{\text{Συναφή πολυώνυμα Legendre}} e^{im\varphi}$ ( $\xi = \cos\theta$ ) βαθμού $\ell -  m $
$m$	Κβαντικός αριθμός προβολής της στροφορμής Ή μαγνητικός κβαντικός αριθμός	$\ell_z = \hbar m$ $m = \underbrace{-\ell, \dots, +\ell}_{2\ell+1}$	Ορίζει την <u>προβολή</u> της <u>στροφορμής</u> σε (κάποιον) άξονα Z.	<p>➤ Για <math>\ell = 0 \Rightarrow m = 0 \Rightarrow P_0^0 = \text{σταθερά}</math> <math>\Rightarrow Y_0^0 = \text{σταθερά}</math></p> <p><b>ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ:</b> Οι λύσεις με <math>\ell = 0</math> δεν έχουν γωνιακή εξάρτηση κι επομένως συμπίπτουν με τις σφαιρικά συμμετρικές λύσεις του προηγούμενου μαθήματος.</p>

- Για κάθε δεδομένο  $n$  ο κβαντικός αριθμός  $\ell$  παίρνει όλες τις ακέραιες τιμές από μηδέν έως  $n-1$ , ενώ για κάθε δεδομένο  $\ell$  ο κβαντικός αριθμός  $m$  παίρνει όλες τις ακέραιες τιμές από  $-\ell$  έως  $+\ell$  (Σύνολο:  $2\ell+1$ )
- Το πλήθος των διαφορετικών καταστάσεων με την ίδια ενέργεια  $E_n$  ( $\equiv$  εκφυλισμός) είναι ίσο με  $d_n = n^2$ .
- **ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΚΟΣ ΣΥΜΒΟΛΙΣΜΟΣ ΤΩΝ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΩΝ ΔΙΑΦΟΡΕΤΙΚΟΥ  $\ell$** 

$\ell = 0$	$\ell = 1$	$\ell = 2$	$\ell = 3$
Νέο σύμβολο $\rightarrow$ s	p	d	f
- **ΒΑΣΙΚΟ ΓΕΝΙΚΟ ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ:** Η στροφορμή στην Κβαντομηχανική είναι μια κβαντωμένη ποσότητα. Τόσο το μήκος του διανύσματος  $\vec{\ell}$  όσο και η προβολή του σε κάποιον άξονα μπορούν να πάρουν μόνο μια διακριτή ακολουθία τιμών.

### Το ενεργειακό διάγραμμα



### Τροχιακά s και τροχιακά p

Κυματοσυναρτήσεις	Τροχιακά	Συμπέρασμα
$\psi_{1s} = Ne^{-r}$		Όλα τα τροχιακά s είναι <u>σφαιρικά συμμετρικά</u> ενώ τα τροχιακά p έχουν <u>αξονική κατευθυντικότητα</u> κατά μήκος του αντίστοιχου άξονα.
$\psi_{2s} = N\left(1 - \frac{r}{2}\right)e^{-r/2}$		
$\psi_{2p_z} = Nre^{-r/2} \underbrace{\cos\theta}_{z/r}$		
$\psi_{2p_x} = Nre^{-r/2} \frac{x}{r}$		
$\psi_{2p_y} = Nre^{-r/2} \frac{y}{r}$		

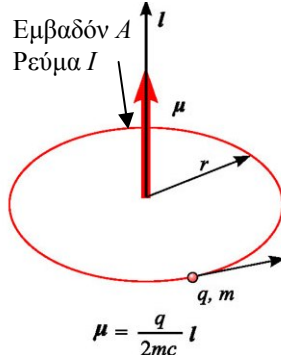
## Στροφορμή και ατομικός μαγνητισμός [Το φαινόμενο Zeeman και το πείραμα Stern – Gerlach]

### Η βασική σχέση

$$\vec{\mu} = \frac{q}{2mc} \vec{\ell}$$

Λόγω της περιστροφής του, ένα φορτισμένο σωματίδιο μάζας  $m$  και φορτίου  $q$  παράγει μια μαγνητική ροπή  $\vec{\mu} = \gamma \vec{\ell}$ , ανάλογη της στροφορμής του, με γυρομαγνητικό λόγο  $\gamma$  ίσο με  $q/2Mc$  (Σύστημα C.G.S.).

### ...και η απόδειξή της



$$\mu = \frac{IA}{c}$$

[Μαγνητική ροπή ρευματοφόρου βρόχου]

Για περιστρεφόμενο σωματίδιο φορτίου  $q$  και μάζας  $m \Rightarrow I = q/T$  ( $T =$  περίοδος περιστροφής)

$$\Rightarrow \mu = \frac{(q/T)\pi r^2}{c} \Big|_{T=2\pi r/v} = \frac{q}{2c} v r \equiv$$

$$\equiv \frac{q}{2mc} \left( \underbrace{mvr}_{\ell} \right) = \frac{q}{2mc} \ell \Rightarrow \vec{\mu} = \frac{q}{2mc} \vec{\ell}$$

### Το άτομο σ' ένα ομογενές μαγνητικό πεδίο: Το φαινόμενο Zeeman

#### I. Θεωρία

$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$  Ενέργεια αλληλεπίδρασης μιας μαγνητικής ροπής  $\vec{\mu}$  και ενός μαγν. πεδίου  $\vec{B}$

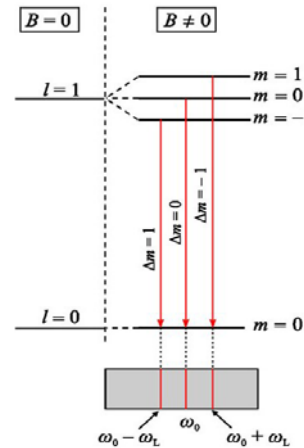
Για ένα ηλεκτρόνιο ( $q = -e$ , μάζα  $= m_e$ ) και ένα μαγνητικό πεδίο κατά τον άξονα  $z$  θα είναι

$$U = \frac{eB}{2m_e c} \ell_z \Big|_{\ell_z = \hbar m} \equiv \mu_B B m$$

Όπου  $\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e c} = 0,93 \cdot 10^{-20}$  erg/Gauss

είναι η λεγόμενη μαγνητόνη του Bohr, δηλ. η μονάδα μέτρησης των ατομικών μαγνητικών ροπών ( $\equiv$  των ατομικών μαγνητών)

#### II. Πειραματικές συνέπειες



**Συμπέρασμα:** Κατά την τοποθέτηση του ατόμου σ' ένα μαγν. πεδίο η αρχική φασματική γραμμή εμφανίζεται τριπλή (διαχωρισμός Zeeman)

### Ατομική δέσμη σ' ένα ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο: Το πείραμα Stern – Gerlach

#### I. Θεωρία

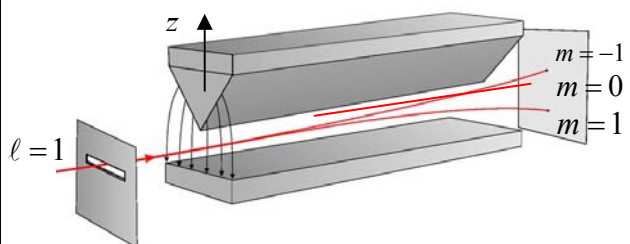
Όπως πριν  $U = \mu_B B(z) m$  αλλά με  $B = B(z)$  [πεδίο με «βαθμίδα» κατά τον άξονα  $z$ , παραγόμενο από έναν μαγνήτη σαν αυτόν του διπλανού Σχήματος.

$$\Rightarrow F_z = -\frac{dU}{dz} = -\mu_B \frac{dB}{dz} m \equiv \text{Δύναμη κατά τον άξονα}$$

$z$  εξαρτώμενη από την τιμή του μαγνητικού κβαντικού αριθμού  $m$ . ( $\ell_z = \hbar m$ )

ΜΕΛΕΤΗ: Σ. Τραχανά, *Κβαντομηχανική I*, σελ. 413 – 435.

#### II. Η πειραματική διάταξη



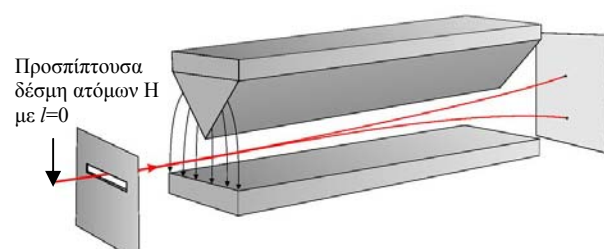
Μια δέσμη ατόμων με  $\ell = 1$  διερχόμενη από τον ανομοιογενή μαγνήτη του σχήματος παράγει τρεις κηλίδες στο πέτασμα εξόδου [όσες και οι τιμές του κβαντικού αριθμού  $m$ ]



## Το σπιν: Μια καθαρά κβαντική στροφορμή

Οι πειραματικές ενδείξεις για την ύπαρξη μιας εσωτερικής στροφορμής του ηλεκτρονίου

Πείραμα Stern-Gerlach με άτομα Υδρογόνου στη θεμελιώδη τους κατάσταση



Προσπίπτουσα δέσμη ατόμων H με  $l=0$

**Πειραματικό αποτέλεσμα:** Ο αριθμός των κηλίδων στο πέτασμα είναι ίσος με δύο. Η προσπίπτουσα δέσμη χωρίζεται πάντα σε δύο.

**ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ:** Ο μόνος τρόπος να εξηγηθεί το πειραματικό αποτέλεσμα είναι να υποθεθεί ότι το ηλεκτρόνιο είναι φορέας και μιας εσωτερικής στροφορμής ( $\equiv$  σπιν) με παρόμοιες ιδιότητες και πειραματικές εκδηλώσεις όπως η τροχιακή στροφορμή αλλά με τιμή του κβαντικού αριθμού  $s$  (το ανάλογο του  $\ell$ ) ίση με  $\frac{1}{2}$ .

### Τροχιακή στροφορμή και σπιν: Ομοιότητες και διαφορές

	Τροχιακή στροφορμή	Σπιν	Κανόνας αντιστοίχισης
	$\vec{\ell}$	$\vec{S}$	$\vec{\ell} \rightarrow \vec{S}$
<b>Μέτρο στροφορμής</b>	$ \vec{\ell}  = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ $\ell = 0, 1, 2, \dots$	$ \vec{S}  = \hbar\sqrt{s(s+1)}$ $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$	$\ell \rightarrow s$
<b>Προβολή στροφορμής κατά τον άξονα z</b>	$\ell_z = \hbar m_\ell$ $m_\ell = -\ell, \dots, +\ell$ βήμα μονάδα Σύνολο τιμών προβολής $2\ell + 1$	$S_z = \hbar m_s$ $m_s = -s, \dots, +s$ βήμα μονάδα Σύνολο τιμών προβολής $2s + 1$	$m_\ell \rightarrow m_s$

Η βασική διαφορά μεταξύ τροχιακής στροφορμής και σπιν εντοπίζεται στο γεγονός ότι ο κβαντικός αριθμός  $s$  του σπιν μπορεί να πάρει όχι μόνο ακέραιες αλλά και ημιακέραιες τιμές ( $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ ). Η δυνατότητα ημιακέραιων τιμών προκύπτει από τον κανόνα ότι το διάστημα από  $-s$  έως  $+s$  (μήκους  $2s$ ) πρέπει να είναι ακέραιος αριθμός αφού καλύπτεται πλήρως ξεκινώντας από το  $-s$  και φτάνοντας στο  $+s$  με βήματα μονάδα. Άρα  $2s = \text{ακέραιος} \Rightarrow s = \text{ακέραιος ή ημιακέραιος}$

### Γιατί το σπιν του ηλεκτρονίου δεν οφείλεται σε περιστροφή περί τον άξονά του

ΛΟΓΟΣ 1	ΛΟΓΟΣ 2
<p>Διότι για να προκύψει μια τιμή στροφορμής <math>S_z = \hbar/2</math> με ιδιοπεριστροφή, η ταχύτητα περιφοράς του <math>e</math> στον “ισημερινό” του (θεωρώντας το ως σφαίρα) θα έπρεπε να υπερβαίνει κατά πολύ την ταχύτητα του φωτός.</p> $S_z = I \cdot \omega \approx ma^2 \omega \approx mav = \frac{\hbar}{2} \approx \hbar$ <div style="border: 1px dashed black; padding: 2px; display: inline-block; margin-left: 20px;"> <math>I</math>: ροπή αδράνειας <math>e</math>.  <math>\omega</math>: γωνιακή ταχύτητα         </div> <p><math>\Rightarrow v \approx \hbar / ma \approx 10^{17} \text{ cm/sec} \approx 10^6 c</math></p> <p>Όπου <math>a \approx 10^{-17} \text{ cm}</math> το σημερινό πειραματικό <u>άνω όριο</u> της ακτίνας του ηλεκτρονίου.</p>	<p>Σε αντίθεση με την τροχιακή στροφορμή της οποίας το μέγεθος μπορεί να μεταβληθεί, το μέγεθος του σπιν είναι ένα <u>πάγιο χαρακτηριστικό</u> του κάθε σωματιδίου, όπως η μάζα ηρεμίας ή το φορτίο του. Ο κβαντικός αριθμός του σπιν είναι <u>παγωμένος</u> σε μια και μοναδική τιμή. Αυτή η αδυναμία μεταβολής του σπιν είναι αδύνατον να ερμηνευθεί στα πλαίσια μιας κλασικής εικόνας ενός <math>e</math> περιστρεφόμενου περί τον άξονά του.</p>

## Το σπιν και η γενικευμένη αρχή του Pauli

### Φερμιόνια και Μποζόνια:

Οι δύο θεμελιώδεις κατηγορίες σωματιδίων και ο ρόλος τους στη φύση

	Σπιν	Είδος συμπεριφοράς	Ποια είναι ποια	...και γιατί
<b>Φερμιόνια</b>	<b>Ημιακέραιο</b> $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$	«Ατομικιστική» Υπόκεινται στην αρχή του Pauli (είναι αδύνατη η συνύπαρξη τους στην ίδια κβαντική κατάσταση). Περιγράφονται από <u>αντισυμμετρικές κυμ/σεις</u> .	Όλα τα σωματίδια <u>δομικοί λίθοι</u> της ύλης. (e, p, n, ν κουάρκς). Όλα έχουν $s = \frac{1}{2}$	Διαφορετικά θα ήταν δυνατή η απεριόριστη συσσώρευση τους στην ίδια περιοχή του χώρου υπό την επίδραση των αμοιβαίων έλξεων, με αποτέλεσμα την πλήρη κατάρρευση της ύλης σε μια «σταγόνα» άπειρης πυκνότητας.
<b>Μποζόνια</b>	<b>Ακέραιο</b> $s = 0, 1, 2, \dots$	«Κολλεκτιβιστική» Δεν υπόκεινται στην αρχή του Pauli (Είναι δυνατή η απεριόριστη συνύπαρξη τους στην ίδια κβαντική κατάσταση) περιγράφονται από <u>συμμετρικές κυμ/σεις</u> .	Όλα τα σωματίδια <u>φορείς δυνάμεων</u> της φύσης ( $\gamma, w^\pm, z$ , γλιόνια, βαρυτόνιο). Όλα έχουν $s = 1$ πλήν του βαρυτονίου που (εικάζεται ότι) έχει $s = 2$ .	Έτσι είναι δυνατή η απεριόριστη συνύπαρξη τους στην ίδια κβαντική κατάσταση και η δημιουργία μ' αυτό τον τρόπο ενός μακροσκοπικού πεδίου δυνάμεων (ΗΜ πεδίο, πεδίο βαρύτητας, πυρηνικά πεδία).

### Η απαγορευτική αρχή του Pauli για τα ατομικά ηλεκτρόνια: Μια ειδική συνέπεια της γενικευμένης αρχής

Έχοντας σπιν  $s = \frac{1}{2}$  τα ηλεκτρόνια είναι φερμιόνια και επομένως η συνύπαρξή τους στην ίδια κβαντική κατάσταση ενός ατόμου θα είναι αδύνατη. Και δεδομένου ότι μια κβαντική κατάσταση σ' ένα άτομο καθορίζεται μονοσήμαντα από την τετράδα κβαντικών αριθμών  $n, \ell, m_\ell, m_s$ , η εφαρμογή της γενικής αρχής του Pauli στα άτομα οδηγεί στην:

**ΑΠΑΓΟΡΕΥΤΙΚΗ ΑΡΧΗ ΤΟΥ PAULI:** Δύο ηλεκτρόνια σ' ένα άτομο είναι αδύνατον να έχουν την ίδια τετράδα κβαντικών αριθμών  $n, \ell, m_\ell, m_s$ . Θα διαφέρουν τουλάχιστον σε ένα κβαντικό αριθμό.

### Η απαγορευτική αρχή του Pauli και η μη διακρισιμότητα των ταυτόσημων σωματιδίων στην Κβαντομηχανική

Στην «ρίζα» της γενικευμένης αρχής του Pauli βρίσκεται το θεμελιώδες γεγονός ότι στην Κβαντομηχανική τα ταυτόσημα σωματίδια που ανήκουν στο ίδιο φυσικό σύστημα (π.χ. ένα άτομο) είναι μη διακρίσιμα διότι περιγράφονται από αλληλοεπικαλυπτόμενες κυματοσυναρτήσεις, κι επομένως είναι αδύνατον να πούμε ποιο είναι το #1 ποιο είναι το #2 κ.ο.κ. Αυτή η αδυναμία διάκρισης διασφαλίζεται κβαντομηχανικά μόνο με κύματοσυναρτήσεις  $\psi(x_1, x_2)$  που είναι συμμετρικές [ $\psi(x_2, x_1) = \psi(x_1, x_2)$ ] ή αντισυμμετρικές [ $\psi(x_2, x_1) = -\psi(x_1, x_2)$ ] κι επομένως οδηγούν σε πιθανότητα  $|\psi(x_1, x_2)|^2$  που είναι συμμετρική στην εναλλαγή  $x_1 \leftrightarrow x_2$  κι άρα δεν επιτρέπει τη διάκριση των δύο σωματιδίων.

## Πολυηλεκτρονικά άτομα [το περιοδικό σύστημα των στοιχείων]

Το διάγραμμα των ενεργειακών επιπέδων ενός πολυηλεκτρονικού ατόμου	... και η εξήγησή του [το φαινόμενο της «θωράκισης»]
	<p>Για κάθε δεδομένο <math>n</math> τα ηλεκτρόνια μεγαλύτερου <math>l</math> έχουν μεγαλύτερη μέση απόσταση από την αρχή και επομένως «βλέπουν» τον πυρήνα καλυμμένο (<math>\equiv</math> «θωρακισμένο») από το νέφος αρνητικού φορτίου που δημιουργούν τα ηλεκτρόνια μικρότερου <math>l</math>. «Αισθάνονται» επομένως μειωμένη πυρηνική έλξη – «βλέπουν» μικρότερο πυρηνικό φορτίο – κι άρα έχουν μικρότερη ενέργεια σύνδεσης. (Οι αντίστοιχες στάθμες βρίσκονται πιο ψηλά στο ενεργειακό διάγραμμα.)</p>
<p><b>ΚΑΝΟΝΑΣ:</b> Για δεδομένο <math>n</math> η ενέργεια αυξάνει όσο αυξάνει ο κβαντικός αριθμός <math>l</math></p>	

### Ο μικρός περιοδικός πίνακας

Z=1, <b>H</b> Υδρογόνο 13,6 (1s) <sup>1</sup>	Σχηματίζεται γεμίζοντας διαδοχικά τις προηγούμενες στάθμες σύμφωνα με την αρχή του Pauli και λαμβάνοντας υπόψη τη χωρητικότητα της κάθε μίας (δύο για τις στάθμες s και έξι για τις στάθμες p). Η τρίτη γραμμή κλείνει στη στάθμη 3p διότι η 3d είναι ενεργειακά πολύ ψηλότερα και ανήκει σε επόμενη στοιβάδα.						Z=2, <b>He</b> Ήλιο 24,6 (1s) <sup>2</sup>
Z=3, <b>Li</b> Λίθιο 5,4 (1s) <sup>2</sup> (2s) <sup>1</sup>	Z=4, <b>Be</b> Βυρήλλιο 9,3 (1s) <sup>2</sup> (2s) <sup>2</sup>	Z=5, <b>B</b> Βόριο 8,3 (1s) <sup>2</sup> (2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>1</sup>	Z=6, <b>C</b> Άνθρακας 11,3 (1s) <sup>2</sup> (2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>2</sup>	Z=7, <b>N</b> Άζωτο 14,5 (1s) <sup>2</sup> (2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>3</sup>	Z=8, <b>O</b> Οξυγόνο 13,6 (1s) <sup>2</sup> (2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>4</sup>	Z=9, <b>F</b> Φθόριο 17,4 (1s) <sup>2</sup> (2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>5</sup>	Z=10, <b>Ne</b> Νέο 21,6 (1s) <sup>2</sup> (2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>6</sup>
Z=11, <b>Na</b> Νάτριο 5,1 [Ne](3s) <sup>1</sup>	Z=12, <b>Mg</b> Μαγνήσιο 7,6 [Ne](3s) <sup>2</sup>	Z=13, <b>Al</b> Αργίλιο 6,0 [Ne](3s) <sup>2</sup> (3p) <sup>1</sup>	Z=14, <b>Si</b> Πυρίτιο 8,1 [Ne](3s) <sup>2</sup> (3p) <sup>2</sup>	Z=15, <b>P</b> Φώσφορος 10,5 [Ne](3s) <sup>2</sup> (3p) <sup>3</sup>	Z=16, <b>S</b> Θείο 10,4 [Ne](3s) <sup>2</sup> (3p) <sup>4</sup>	Z=17, <b>Cl</b> Χλώριο 13,0 [Ne](3s) <sup>2</sup> (3p) <sup>5</sup>	Z=18, <b>Ar</b> Αργό 15,8 [Ne](3s) <sup>2</sup> (3p) <sup>6</sup>

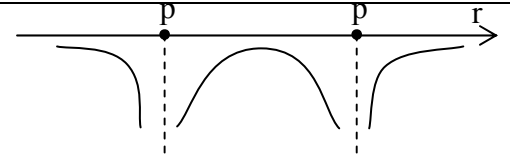
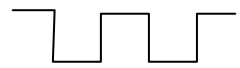
Οι τάσεις μεταβολής του έργου ιονισμού πάνω στον περιοδικό πίνακα	...και η εξήγησή τους
<ol style="list-style-type: none"> <li><b>Η βασική τάση:</b> το έργο ιονισμού αυξάνει καθώς κινούμαστε από αριστερά προς τα δεξιά πάνω στον περιοδικό πίνακα.</li> <li><b>...και οι εξαιρέσεις:</b> Από τη 2<sup>η</sup> στην 3<sup>η</sup> κι από την 5<sup>η</sup> στην 6<sup>η</sup> στήλη του (μικρού) περιοδικού πίνακα, το έργο ιονισμού σημειώνει μια <u>μικρή πτώση</u> για να συνεχίσει μετά τη γενική αυξητική τάση.</li> </ol> <div style="border: 1px dashed black; padding: 5px; margin-top: 10px;"> <p>ΜΕΛΕΤΗ: Σ. Τραχανά, <i>Κβαντομηχανική I</i>, σελ. 483-506 (με προφανείς εξαιρέσεις).</p> </div>	<ol style="list-style-type: none"> <li>Οφείλεται στο γεγονός ότι ενώ παραμένουμε στο ίδιο <math>n</math> το πυρηνικό φορτίο αυξάνει «τραβώντας» τις στάθμες προς τα κάτω. Άρα το έργο ιονισμού θα μεγαλώνει από αριστερά προς τα δεξιά.</li> <li>Από τη 2<sup>η</sup> στην 3<sup>η</sup> στήλη γίνεται η μετάβαση από τη στάθμη 2s στην (ψηλότερη) στάθμη 2p ενώ από την 5<sup>η</sup> στην 6<sup>η</sup> αρχίζει η τοποθέτηση δύο ηλεκτρονίων με αντίθετα spin σε μια από τις στάθμες 2p<sub>x</sub>, 2p<sub>y</sub>, 2p<sub>z</sub>, με συνέπεια την αύξηση των ηλεκτρονικών απώσεων και τη μείωση του έργου ιονισμού.</li> </ol>



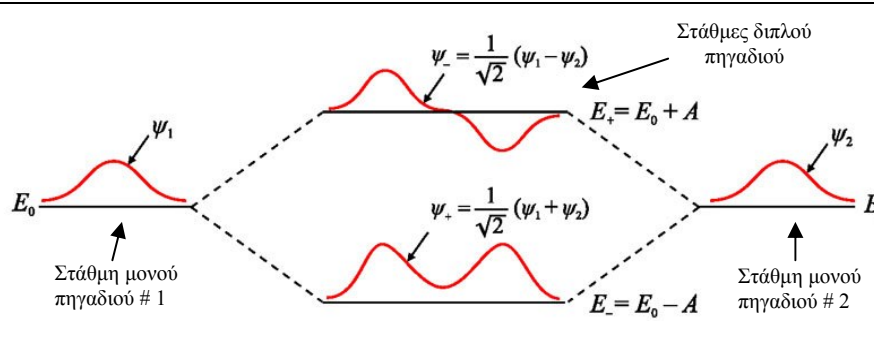
# Μόρια: Η Κβαντική Θεωρία του χημικού δεσμού

## I: Το πρόβλημα του διπλού πηγαδιού

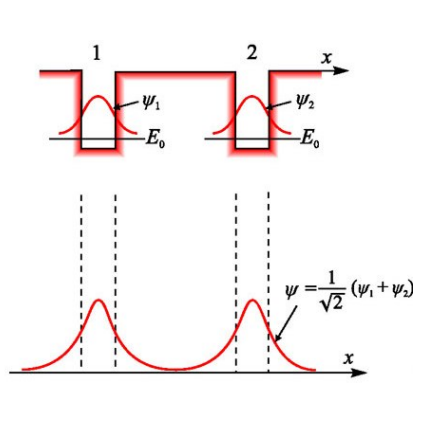
### 1. Η κίνηση υπό την επίδραση δύο ελκτικών κέντρων (≡ διπλό πηγάδι δυναμικού): Το βασικό πρόβλημα της μοριακής Φυσικής

 <p>Δυναμικό που «βλέπει» ένα ηλεκτρόνιο του μορίου του Υδρογόνου κατά μήκος της ευθείας που συνδέει τα δύο πρωτόνια.</p>	<p><b>ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ:</b> Η κατανόηση της Φυσικής του χημικού δεσμού απαιτεί την – προσεγγιστική κατ’ ανάγκη – λύση της εξίσωσης Schrödinger ενός σωματιδίου που κινείται υπό την επίδραση δύο ελκτικών κέντρων, δηλαδή ενός συστήματος δύο γειτονικών πηγαδιών που αναπαριστώνται σχηματικά ως δύο τετραγωνικά πηγάδια.</p> 
--	--

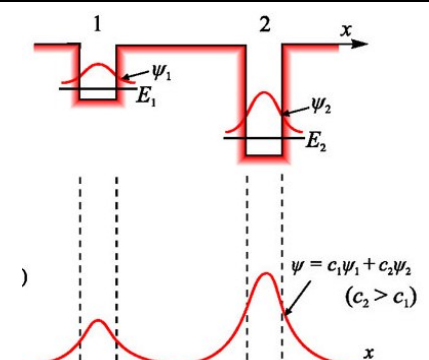
### 2. Το ενεργειακό διάγραμμα και οι κυματοσυναρτήσεις ενός διπλού πηγαδιού: Τα αποτελέσματα μιας προσεγγιστικής λύσης

 <p>Στάθμη μονού πηγαδιού # 1</p> <p>Στάθμη μονού πηγαδιού # 2</p> <p>Στάθμες διπλού πηγαδιού</p>	<p><b>ΚΑΝΟΝΑΣ:</b> Κατά την προσέγγιση δύο ίδιων μονών πηγαδιών προς σχηματισμό ενός διπλού, από κάθε στάθμη του μονού πηγαδιού προκύπτει μια <u>δύαδα σταθμών</u> του διπλού, συμμετρικά τοποθετημένων ως προς την αρχική και με κυματοσυναρτήσεις <math>\psi_{\pm}</math> ίσες με την <u>άρτια</u> ή την <u>περιττή συνένωση</u> των κυματοσυναρτήσεων <math>\psi_1</math> και <math>\psi_2</math> των δύο μονών πηγαδιών.</p>
--	--

### 3. ...η εξήγησή τους

	<p>Στη γειτονία του κάθε πηγαδιού η κυματοσυνάρτηση του διπλού πηγαδιού είναι πρακτικά η ίδια με την κυματοσυνάρτηση αυτού του πηγαδιού, αφού σ’ αυτή την περιοχή η επίδραση του άλλου πηγαδιού είναι αμελητέα. Η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης του διπλού πηγαδιού θα έχει λοιπόν, λόγω συμμετρίας, τη μορφή <math>\psi_+ = (\psi_1 + \psi_2) / \sqrt{2}</math> (άρτια συνένωση των <math>\psi_1, \psi_2</math>) ενώ η περιττή συνένωση, <math>\psi_- = (\psi_1 - \psi_2) / \sqrt{2}</math>, θα δίδει την κυματοσυνάρτηση της 1<sup>ης</sup> διεγερμένης στάθμης του διπλού πηγαδιού. Οι ενέργειες <math>E_0 \mp A</math> των δύο σταθμών προκύπτουν από τον τύπο της κβαντομηχανικής μέσης τιμής <math>\langle E \rangle = \int \psi^* (\hat{E} \psi) dx</math>, όπου <math>\hat{E}</math> είναι ο τελεστής της ενέργειας και <math>\psi = (\psi_1 \pm \psi_2) / \sqrt{2}</math> οι κυματοσυναρτήσεις του διπλού πηγαδιού.</p>
---	--

### 4. ...και η γενίκευση για ανισόβαθα πηγάδια

	<p>Η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης του διπλού πηγαδιού θα είναι μια <u>ανισοβαρής υπέρθεση</u> των κυματοσυναρτήσεων των μονών πηγαδιών, με μεγαλύτερο βάρος στην κυματοσυνάρτηση του βαθύτερου πηγαδιού αφού είναι ενεργειακά συμφερότερο για το σωματίδιο να βρίσκεται περισσότερο εκεί.</p>
---	--

### Απλά μόρια

#### Μόριο $H_2$

Ενεργειακό κέρδος  $2A$

Ατομικά τροχιακά  $\Rightarrow$  Μοριακό τροχιακό

#### Μόριο $He_2$

Συνολικό ενεργειακό κέρδος = 0

Οτι κερδίζουμε από την τοποθέτηση δύο  $e$  στην κάτω στάθμη της δυάδας των μοριακών σταθμών το χάνουμε από την τοποθέτηση των άλλων δύο στην πάνω στάθμη.

$\Rightarrow$  ΔΕΝ ΣΧΗΜΑΤΙΖΕΤΑΙ ΜΟΡΙΟ

#### Το μόριο $Li_2$

Εσωτερική στοιβάδα: Κέρδος = 0  
Εξωτερική στοιβάδα: Κέρδος =  $2A$

$\Rightarrow$  ΣΤΟΙΒΑΔΑ ΣΘΕΝΟΥΣ = Η ΕΞΩΤΕΡΙΚΗ ΣΤΟΙΒΑΔΑ

#### Σε ποια απόσταση ισορροπεί ένα μόριο

Ολική ενέργεια μορίου  $E(R)$   
Απώση πυρήνων  $e^2/R$   
Θέση ισορροπίας (ελάχιστη ολική ενέργεια)  $R_0$   
Ενεργειακό κέρδος ηλεκτρονίων σθένους  $\epsilon(R) = -2A(R)$

#### Το μόριο $O_2$ : Η περίπτωση του διπλού δεσμού

<p>Το ενεργειακό διάγραμμα ατόμου <math>O</math></p> <p><math>2s</math> <math>\uparrow\downarrow</math> <math>\uparrow</math> <math>\uparrow</math> <math>\uparrow\downarrow</math></p> <p><math>1s</math> <math>\uparrow\downarrow</math> <math>Z = 8</math></p> <p><math>\Rightarrow</math> Τροχιακά σθένους τα <math>2p_x, 2p_y</math></p>	<p>Δύο τρόποι συνένωσης των ατομικών τροχιακών</p> <p><b>I.</b> Ασθενής πλευρική συνένωση [δεσμός <math>\pi</math>]</p> <p><b>II.</b> Δύο δεσμοί ενδιάμεσης ισχύος</p> <p>Ισχυρή αξονική συνένωση [δεσμός <math>\sigma</math>]</p> <p>Χαμηλότερη ενέργεια (άρα καλύτερο δεσμό) εξασφαλίζει πάντα ο πρώτος τρόπος συνένωσης [ένας δεσμός <math>\sigma</math> και ένας <math>\pi</math>]</p>
---	--

#### Το μόριο του νερού

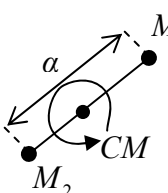
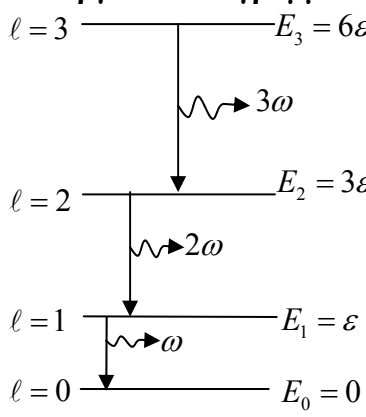
Το μόριο του νερού είναι ένα ισχυρά πολικό μόριο

Το  $O$  είναι άτομο ηλεκτραρνητικότερο του  $H$  (βαθύτερο πηγάδι) και «τραβάει» τα  $e$  προς το μέρος του. Ο δεσμός  $O-H$  θα είναι επομένως, ένας πολικός δεσμός (του τύπου  $O^- - ^+H$ ), οπότε τα θετικά φορτισμένα  $H$  θα απωθούνται, με αποτέλεσμα να ανοίξουν οι «βραχίονες» του χημικού δεσμού και η γωνία τους να διαμορφωθεί τελικά στις  $104^\circ$ .

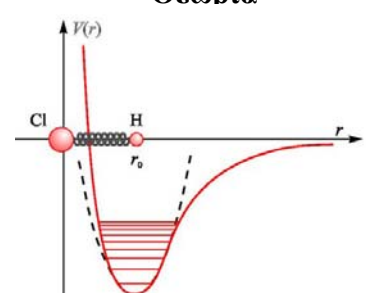
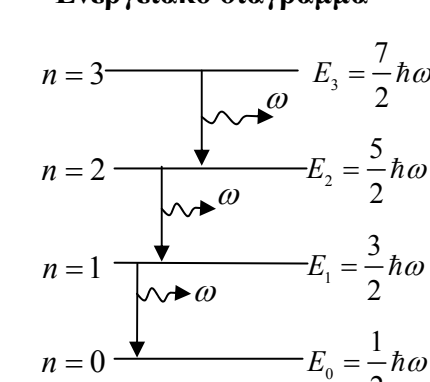
## Μοριακά φάσματα

Σε αντίθεση με τα άτομα, τα οποία μπορούν να απορροφήσουν ή να εκπέμψουν ΗΜ ενέργεια μόνο διεγείροντας ή αποδιεγείροντας τα ηλεκτρόνια τους (ηλεκτρονικό φάσμα), τα μόρια μπορούν επίσης να αλληλεπιδράσουν με την ΗΜ ακτινοβολία τιθέμενα σε ταλάντωση – κατά μήκος της ευθείας που συνδέει τα (δύο) άτομα – ή σε περιστροφή γύρω από το κέντρο μάζας τους. Κι επειδή τα κινούμενα σωματίδια σ' αυτή την περίπτωση δεν είναι τα ελαφριά ηλεκτρόνια αλλά οι πολύ βαρύτεροι πυρήνες, τα σχετικά φάσματα (ταλάντωσης και περιστροφής) πέφτουν όχι στο υπεριώδες ή το ορατό (όπως με τα ηλεκτρόνια) αλλά στο (κοντινό και μακρινό) υπέρυθρο.

### I. Περιστροφικό φάσμα

Θεωρία	Ενεργειακό διάγραμμα	Προβλέψεις
 <p>Διατομικό μόριο περιστρεφόμενο περί το κέντρο μάζας του (CM)</p> $\Rightarrow E^{rot} = \frac{\hbar^2 \ell^2}{2I} = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2Ma^2}$ $M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \quad (\text{ανηγμένη μάζα μορίου})$ $\Rightarrow E_\ell^{rot} = E_\ell = \frac{1}{2} \varepsilon \ell(\ell+1)$ <p>Όπου <math>\varepsilon = \frac{\hbar^2}{Ma^2}</math></p>	 <p>Κανόνας επιλογής <math>\Delta \ell = 1</math></p>	<p><b>1.</b> Οι εκπεμπόμενες συχνότητες είναι ακέραια <u>πολλαπλάσια</u> μιας βασικής συχνότητας και τα μήκη κύματος <u>υποπολλαπλάσια</u> ενός μέγιστου μήκους κύματος.</p> <p><b>2. Θέση στο φάσμα:</b></p> $E^{rot} \sim \frac{\hbar^2}{m_p a^2} = \frac{\hbar^2}{m_e a^2} \frac{m_e}{m_p} \rightarrow E^{rot} \sim E^e \frac{m_e}{m_p}$ <p>Οι περιστροφικές ενέργειες είναι μικρότερες από τις ηλεκτρονικές (<math>E^e \sim \text{eV}</math>) κατά ένα παράγοντα της τάξεως του <math>m_e / m_p \approx 1/2000</math>.</p> <p><math>\Rightarrow E^{rot} \sim \text{meV} \Rightarrow \lambda_r \sim \text{mm}</math></p> <p>ΜΑΚΡΙΝΟ ΥΠΕΡΥΘΡΟ</p>

### II. Ταλαντωτικό φάσμα

Θεωρία	Ενεργειακό διάγραμμα	Προβλέψεις
 <p>Τα πρώτα ταλαντωτικά ενεργειακά επίπεδα είναι εκείνα ενός αρμονικού ταλαντωτή</p> $E_n^{vibr} = -V_o + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, \dots$	 <p>Κανόνας επιλογής <math>\Delta n = 1</math></p>	<p><b>1.</b> Το φάσμα αποτελείται από μια και μοναδική συχνότητα. [Η πρόβλεψη παύει να ισχύει για τις υψηλότερες διεγέρσεις]</p> <p><b>2. Θέση στο φάσμα:</b></p> <p>Ισχύει ότι <math>E^{vibr} \approx E^e \sqrt{\frac{m_e}{M}}</math></p> <p><math>\Rightarrow E^{vibr} \approx E^e / 100 \approx 10^{-1} \text{ eV}</math></p> <p>ΚΟΝΤΙΝΟ ΥΠΕΡΥΘΡΟ</p>

