Κεφάλαιο 13

Κβαντική θεωρία: εισαγωγή και βασικές αρχές

Αντικείμενα μάθησης

Μετά από προσεκτική μελέτη του κεφαλαίου αυτού θα πρέπει να είστε σε θέση:

(1) Να αναφέρετε τα χαρακτηριστικά της *ακτινοβολίας μέλανος σώματος*, και να εξηγείτε την αποτυχία του *νόμου Rayleigh-Jeans* (Εξ. (13.3)) της κλασικής φυσικής να την εξηγήσει και την επιτυχία της *κατανομής του Planck* (Εξ. (13.5)) που βασίζεται στην *κβάντωση* της ενέργειας.

(2) Να γνωρίζετε την κλασική ερμηνεία της θερμοχωρητικότητας από το *νόμο των Dulong και Petit* (Εξ. (13.6)) και την αποτυχία του σε χαμηλές θερμοκρασίες καθώς και την επιτυχία του *τύπου του Einstein* (Εξ. (13.7)) που βασίζεται στην κβάντωση των ταλαντωτών της ύλης.

(3) Να ερμηνεύετε το *φωτοηλεκτρικό φαινόμενο* με όρους *φωτονίων* ακτινοβολίας (Εξ. (13.8)).

(4) Να γράφετε τη *σχέση de Broglie* (Εξ. (13.9)) μεταξύ του μήκους κύματος ενός σωματιδίου και της ορμής του και να δικαιολογείτε το πώς αυτή επικυρώνεται από πειράματα περίθλασης ηλεκτρονίων.

(5) Να κατανοείτε την *κυματοσυνάρτηση* ενός συστήματος και να γράφετε την *εξίσωση του Schrödinger* (Εξ. (13.10)) για τον υπολογισμό αυτής.

(6) Να ερμηνεύετε την καμπυλότητα της κυματοσυνάρτησης συναρτήσει της *κινητικής ενέργειας* του σωματιδίου (Ενότητα 13.3).

(7) Να διατυπώνετε την *ερμηνεία Born* της κυματοσυνάρτησης, ως *πλάτους πιθανότητας* για τον εντοπισμό ενός σωματιδίου (Ενότητα 13.4).

(8) Να αναφέρετε τους *περιορισμούς* προκειμένου μια κυματοσυνάρτηση να είναι φυσικά αποδεκτή και να δικαιολογείτε την κβάντωση της ενέργειας ενός συστήματος ως απόρροιά τους (Ενότητα 13.4).

(9) Να κατανοείτε το ρόλο των *τελεστών* στην κβαντική μηχανική και τη σημασία των *ιδιοσυναρτήσεων* και *ιδιοτιμών* (Ενότητα 13.5).

(10) Να ερμηνεύετε τις *γραμμικές υπερθέσεις* (Εξ. (13.23)) και να τονίζετε τη σημασία μιας *αναμενόμενης τιμής* (Εξ. (13.24)) ως μιας κβαντομηχανικής μέσης τιμής.

(11) Να διατυπώνετε την *αρχή της αβεβαιότητας* (Εξ. (13.25)), και να κατανοείτε τη σημασία της και την ερμηνεία της μέσω υπερθέσεων.

(12) Να ορίζετε τα *συμπληρωματικά παρατηρήσιμα μεγέθη* στην κβαντική μηχανική (Ενότητα 13.6)

Στο κεφάλαιο αυτό εισάγονται κάποιες από τις βασικές αρχές της κβαντικής μηχανικής. Αρχικά, γίνεται μια ανασκόπηση των κυριότερων πειραματικών αποτελεσμάτων που ανέτρεψαν τις έννοιες της κλασικής φυσικής. Τα πειράματα αυτά οδήγησαν στο συμπέρασμα ότι η ενέργεια των σωματιδίων δεν μπορεί να παίρνει αυθαίρετες τιμές και ότι οι έννοιες σωματίδιο και κύμα μπορούν να ενοποιηθούν. Η ανατροπή της κλασικής μηχανικής ενέπνευσε την ανάπτυξη ενός νέου συνόλου εννοιών και τη διατύπωση της κβαντικής μηχανικής. Στην κβαντική μηχανική όλες οι ιδιότητες ενός συστήματος εκφράζονται συναρτήσει μιας κυματοσυνάρτησης η οποία προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης του Schrödinger. Θα δούμε πώς ερμηνεύονται οι κυματοσυναρτήσεις αυτές. Τέλος, θα εισαγάγουμε μερικές από τις τεχνικές της κβαντικής μηχανικής με χρήση τελεστών και θα δούμε ότι οδηγούν στην αρχή της αβεβαιότητας, μία από τις ριζικότερες αποκλίσεις από την κλασική μηχανική.

Στον πρώτο τόμο, όπου ασχοληθήκαμε με τις μακροσκοπικές ιδιότητες της ύλης, αναφέραμε ότι οι μακροσκοπικές ιδιότητες μπορούν να συσχετιστούν με τη συμπεριφορά των μεμονωμένων ατόμων και μορίων. Οι μεμονωμένες αυτές οντότητες έρχονται τώρα στο προσκήνιο και θα πραγματευθούμε τους νόμους που καθορίζουν τη συμπεριφορά τους. Για να κατανοήσουμε τη δομή των μεμονωμένων ατόμων και μορίων καθώς και τη συμπεριφορά των συστατικών τους, ηλεκτρονίων και πυρήνων, πρέπει να γνωρίζουμε πώς τέτοια υποατομικά σωματίδια κινούνται, αποκρινόμενα στις δυνάμεις που τους ασκούνται. Αρχικά θεωρήθηκε ότι η κίνηση των ατόμων και των υποατομικών σωματιδίων θα μπορούσε να περιγραφεί βάσει των νόμων της **κλασικής μηχανικής**, τους οποίους εισήγαγε ο Ισαάκ Νεύτων τον 17ο αιώνα, αφού αυτοί οι νόμοι εξηγούσαν με μεγάλη επιτυχία την κίνηση των σωμάτων της καθημερινής εμπειρίας και των πλανητών. Παρ' όλα αυτά, προς τα τέλη του 19ου αιώνα, συσσωρεύτηκαν πειραματικά δεδομένα που κατέδειξαν την αποτυχία της κλασικής μηχανικής όταν αυτή εφαρμόζεται σε πολύ μικρά σωματίδια και χρειάστηκε να περιμένουμε μέχρι το 1926 περίπου για να ανακαλυφθούν οι κατάλληλες έννοιες και εξισώσεις για την περιγραφή τους. Στο κεφάλαιο αυτό περιγράφουμε τις έννοιες αυτής της νέας μηχανικής, που καλείται **κβαντική μηχανική** και τις εφαρμόζουμε σε όλα τα υπόλοιπα κεφάλαια του βιβλίου.

ΟΙ ΑΠΑΡΧΕΣ ΤΗΣ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ

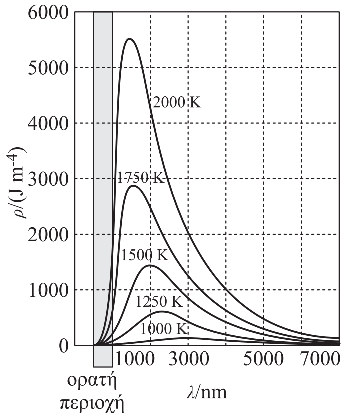
Μια ανασκόπηση των βασικών αρχών της κλασικής μηχανικής γίνεται στο Παράρτημα Α. Εν συντομία, δείχνουν ότι η κλασική φυσική:

(1) προβλέπει μια συγκεκριμένη τροχιά για τα σωματίδια και

(2) επιτρέπει στους μεταφορικούς, περιστροφικούς και δονητικούς τρόπους κίνησης να διεγερθούν σε οποιαδήποτε ενέργεια, με βάση απλώς τις ασκούμενες δυνάμεις. Τα συμπεράσματα αυτά συμφωνούν με την καθημερινή εμπειρία. Η καθημερινή εμπειρία, ωστόσο, δεν εκτείνεται στο επίπεδο των μεμονωμένων ατόμων και ενδελεχή πειράματα, όπως αυτά που περιγράφονται στην ενότητα 13.1, έχουν δείξει ότι οι νόμοι της κλασικής μηχανικής αποτυγχάνουν όταν εφαρμόζονται στην ανταλλαγή πολύ μικρών ποσοτήτων ενέργειας. Η κλασική μηχανική είναι στην πραγματικότητα μόνο μία προσεγγιστική περιγραφή της κίνησης των σωματιδίων και αποτυγχάνει στην περίπτωση μικρών μαζών και μικρών ενεργειακών ανταλλαγών.

13.1 Οι αποτυχίες της κλασικής φυσικής

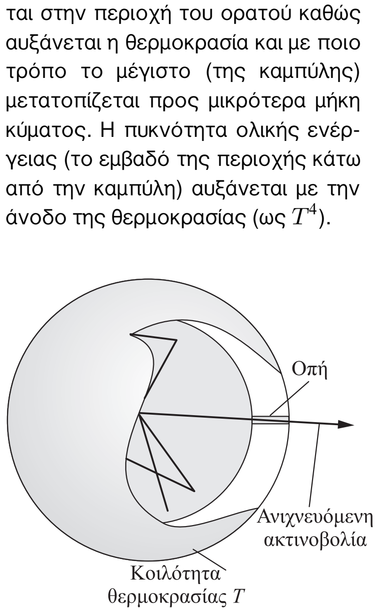
Στην παρούσα ενότητα γίνεται μια συνοπτική ανασκόπηση κάποιων από τα πειράματα που κατέδειξαν την ανάγκη αναθεώρησης αρκετών από τις έννοιες της κλασικής μηχανικής. Συγκεκριμένα, θα δούμε ότι παρατηρήσεις σχετικές με την ακτινοβολία μέλανος σώματος, τις θερμοχωρητικότητες καθώς και τα ατομικά και μοριακά φάσματα υποδεικνύουν ότι τα φυσικά συστήματα μπορούν να απορροφούν ενέργεια μόνο σε διακριτά ποσά.



Σχ. 13.1: Η ενεργειακή πυκνότητα ανά μονάδα μήκους κύματος, σε ένα εύρος τιμών του λ, για μια κοιλότητα μέλανος σώματος σε διάφορες θερμοκρασίες. Παρατηρήστε πώς η ενεργειακή πυκνότητα αυξάνεται στην περιοχή του ορατού καθώς αυξάνεται η θερμοκρασία και με ποιο τρόπο το μέγιστο (της καμπύλης) μετατοπίζεται προς μικρότερα μήκη κύματος. Η πυκνότητα ολικής ενέργειας (το εμβαδό της περιοχής κάτω από την καμπύλη) αυξάνεται με την άνοδο της θερμοκρασίας (ως T^4).

13.1(α) Ακτινοβολία μέλανος σώματος

Κάθε θερμό σώμα εκπέμπει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία. Σε υψηλές θερμοκρασίες ένα υπολογίσιμο ποσοστό της ακτινοβολίας βρίσκεται στην ορατή περιοχή του φάσματος και, καθώς η θερμοκρασία αυξάνεται, παράγεται ολοένα και μεγαλύτερο ποσοστό της μικρού μήκους κύματος κυανής ακτινοβολίας. Αυτή η συμπεριφορά παρατηρείται όταν μια πυρακτωμένη ράβδος σιδήρου γίνεται από ερυθρή λευκή, αφού θερμανθεί περαιτέρω. Η ακριβής εξάρτηση απεικονίζεται στο σχήμα 13.1, που δείχνει τη μεταβολή της εκπεμπόμενης ενέργειας με το μήκος κύματος, σε διάφορες θερμοκρασίες. Οι καμπύλες προσιδιάζουν σε ένα ιδανικό υλικό εκπομπής, που καλείται **μέλαν σώμα**, το οποίο είναι ένα αντικείμενο ικανό να εκπέμπει και να απορροφά πλήρως ακτινοβολίες όλων των συχνοτήτων. Καλή προσέγγιση μέλανος σώματος αποτελεί μια μικρή οπή σε μια κοιλότητα, λόγω του ότι κάθε δέσμη ακτινοβολίας που διαφεύγει μέσω της οπής έχει προηγουμένως απορροφηθεί και επανεκπεμφθεί τόσο πολλές φορές στο εσωτερικό της κοιλότητας, ώστε να βρίσκεται σε θερμική ισορροπία με τα τοιχώματα (Σχ. 13.2).



Σχ. 13.2: Μια μικρή οπή σε μια κοιλότητα αποτελεί καλή προσέγγιση μέλανος σώματος.

Το σχήμα 13.1 δείχνει ότι το μέγιστο της εκπεμπόμενης ενέργειας μετατοπίζεται σε μικρότερα μήκη κύματος, καθώς η θερμοκρασία αυξάνεται. Ως αποτέλεσμα, η ουρά της ενεργειακής κατανομής προς τα μικρά μήκη κύματος ενισχύεται στην περιοχή του ορατού και το χρώμα που αντιλαμβανόμαστε μετατοπίζεται προς το κυανό, όπως ήδη αναφέρθηκε. Η ανάλυση των δεδομένων οδήγησε τον Wilhelm Wien (το 1893) να συνοψίσει αυτή τη συμπεριφορά ως εξής:

$$\textit{Νόμος μετατόπισης του Wien:} \quad T\lambda_{\max} = \frac{1}{5}c_2, \qquad (13.1)$$

όπου $c_2 = 1{,}44\,\mathrm{cm\,K}$. Η σταθερά c_2 καλείται **δεύτερη σταθερά ακτινοβολίας**. Κάνοντας χρήση της τιμής της, μπορούμε να υπολογίσουμε ότι $\lambda_{\max} = 2900\,\mathrm{nm}$ στους $1000\,\mathrm{K}$.

Ένα δεύτερο χαρακτηριστικό της ακτινοβολίας μέλανος σώματος είχε παρατηρηθεί το 1879 από τον Josef Stefan, ο οποίος μελέτησε την **πυκνότητα ολικής ενέργειας**, $\mathcal{E}$, δηλαδή την ολική ενέργεια του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου ανά μονάδα όγκου. Το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο μέσα στην κοιλότητα (Σχ. 13.2) έχει καθορισμένη ολική ενέργεια, που αυξάνεται με την άνοδο της θερμοκρασίας· η πυκνότητα ολικής ενέργειας είναι αυτή η ολική ενέργεια διαιρεμένη με τον όγκο (του εσωτερικού) της κοιλότητας. Ο Stefan συμπέρανε ότι η πυκνότητα ολικής ενέργειας είναι ανάλογη της τέταρτης δύναμης της θερμοκρασίας

$$\textit{Νόμος Stefan-Boltzmann:} \quad \mathcal{E} = aT^4. \qquad (13.2α)$$

Το όνομα του Boltzmann συνδέεται με αυτόν το νόμο, επειδή εκείνος τον εξήγησε θεωρητικά. Μια εναλλακτική μορφή του νόμου δίνεται βάσει της **αφετικής ικανότητας**, M, δηλαδή της ισχύος (της ενέργειας, ανά μονάδα χρόνου, σε watts) που εκπέμπεται ανά μονάδα επιφάνειας (μιλώντας γενικά, της λαμπρότητας εκπομπής). Επειδή η αφετική ικανότητα είναι ανάλογη της πυκνότητας ενέργειας στην κοιλότητα, το M είναι επίσης ανάλογο του T^4 και μπορούμε να γράψουμε

$$M = \sigma T^4, \qquad \sigma = 5{,}67 \times 10^{-8}\,\mathrm{W\,m^{-2}\,K^{-4}}. \qquad (13.2β)$$

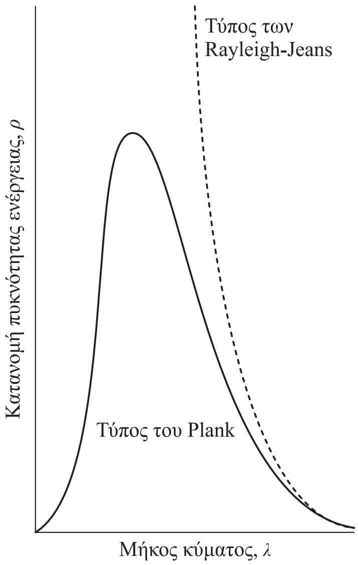
Η σταθερά σ καλείται **σταθερά των Stefan-Boltzmann**. Ο νόμος των Stefan-Boltzmann συνεπάγεται ότι, λαμβάνοντας υπ' όψιν όλα τα μήκη κύματος της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας, $1\,\mathrm{cm}^2$ της επιφάνειας μέλανος σώματος στους $1000\,\mathrm{K}$ ακτινοβολεί περίπου $6\,\mathrm{W}$.

Ο Λόρδος Rayleigh, φυσικός, μελέτησε την ακτινοβολία μέλανος σώματος από τη σκοπιά της κλασικής φυσικής. Θεώρησε το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο ως μια συλλογή ταλαντωτών και πραγματεύτηκε την παρουσία ακτινοβολίας συχνότητας ν (και συνεπώς μήκους κύματος $\lambda = c/\nu$) ως το αποτέλεσμα της διέγερσης του ηλεκτρομαγνητικού ταλαντωτή αυτής της συχνότητας. Ο Rayleigh χρησιμοποίησε το θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας (βλ. Εισαγωγή στον πρώτο τόμο) για να υπολογίσει τη μέση ενέργεια των ταλαντωτών. Με μια μικρή συνεισφορά του James Jeans, κατέληξε στο **νόμο των Rayleigh-Jeans**:

$$d\mathcal{E} = \rho d\lambda, \qquad \text{όπου} \quad \rho = \frac{8\pi kT}{\lambda^4}. \qquad (13.3)$$

Στην παραπάνω έκφραση το k είναι η σταθερά του Boltzmann, $k = 1{,}381 \times 10^{-23}\,\mathrm{J\,K^{-1}}$. Δυστυχώς (για τους Rayleigh, Jeans αλλά και για την κλασική φυσική) αν και ο τύπος Rayleigh-Jeans είναι απόλυτα επιτυχής σε μεγάλα μήκη κύματος και χαμηλές συχνότητες, αποτυγχάνει παταγωδώς στις υψηλές συχνότητες. Έτσι, καθώς το λ μειώνεται, το

ρ αυξάνεται απεριόριστα, χωρίς να παρουσιάζει κάποιο μέγιστο (Σχ. 13.3). Η εξίσωση, επομένως, προβλέπει ότι οι ταλαντωτές που αντιστοιχούν σε πολύ μικρά μήκη κύματος (δηλαδή σε υψηλές συχνότητες της υπεριώδους ακτινοβολίας, των ακτίνων X ή και των ακτίνων γ) είναι έντονα διεγερμένοι, ακόμα και σε θερμοκρασία δωματίου. Αυτό το παράλογο αποτέλεσμα, που υποδηλώνει ότι ένα μεγάλο ποσό ενέργειας ακτινοβολείται στην περιοχή των υψηλών συχνοτήτων του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος, καλείται **υπεριώδης καταστροφή**. Σύμφωνα, λοιπόν, με την κλασική φυσική ακόμα και σχετικώς ψυχρά σώματα θα ακτινοβολούσαν στις περιοχές του ορατού και του υπεριώδους, δηλαδή τα αντικείμενα θα εξέπεμπαν φως στο σκοτάδι· αυτό σημαίνει ότι στην πραγματικότητα δεν θα υπήρχε καν σκοτάδι.



Σχ. 13.3: Θεωρητικές απόπειρες για την εξήγηση της ακτινοβολίας μέλανος σώματος. Ο νόμος Rayleigh-Jeans (Εξ. (13.3)) οδηγεί σε απειρισμό της ενεργειακής πυκνότητας για μικρά μήκη κύματος, φαινόμενο που καλείται υπεριώδης καταστροφή. Η κατανομή Planck (Εξ. (13.5)) βρίσκεται σε καλή συμφωνία με το πείραμα.

13.1(β) Η κατανομή Planck

Ο γερμανός φυσικός Max Planck μελέτησε την ακτινοβολία μέλανος σώματος από τη σκοπιά της θερμοδυναμικής. Το 1900 βρήκε ότι θα μπορούσε να εξηγήσει τις πειραματικές παρατηρήσεις προτείνοντας ότι *η ενέργεια κάθε ηλεκτρομαγνητικού ταλαντωτή περιορίζεται σε διακριτές τιμές και δεν μπορεί να μεταβάλλεται αυθαίρετα*. Ο περιορισμός της ενέργειας σε διακριτές τιμές καλείται **κβάντωση της ενέργειας** (από τη λατινική λέξη *quantum*, ποσό). Συγκεκριμένα, πρότεινε ότι οι επιτρεπόμενες ενέργειες ενός ταλαντωτή συχνότητας ν είναι ακέραια πολλαπλάσια του $h\nu$:

$$E = nh\nu, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots, \tag{13.4}$$

όπου h μια θεμελιώδης σταθερά, γνωστή πλέον ως **σταθερά του Planck**:

$$h = 6{,}62608 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}.$$

Είναι πολύ εύκολο να δούμε γιατί η προσέγγιση του Rayleigh δεν ήταν επιτυχής και γιατί η υπόθεση του Planck ήταν. Η θερμική κίνηση των ατόμων στα τοιχώματα του μέλανος σώματος διεγείρει τους ταλαντωτές του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Σύμφωνα με την κλασική μηχανική, όλοι οι ταλαντωτές του πεδίου μοιράζονται εξίσου την ενέργεια που παρέχεται από τα τοιχώματα, έτσι ώστε να διεγείρονται ακόμα και οι πλέον υψηλές συχνότητες. Η διέγερση των ταλαντωτών υψηλής συχνότητας οδηγεί με τη σειρά της στην υπεριώδη καταστροφή. Σύμφωνα όμως με την υπόθεση του Planck, οι ταλαντωτές διεγείρονται μόνο όταν μπορούν να αποκτήσουν ενέργεια τουλάχιστον ίση με $h\nu$. Αυτή η ενέργεια, στην περίπτωση των ταλαντωτών υψηλής συχνότητας, είναι πολύ μεγάλη για να μπορεί να παρασχεθεί από τα τοιχώματα, γι' αυτό και οι τελευταίοι δεν διεγείρονται. *Το φαινόμενο της κβάντωσης έρχεται να αποκλείσει τη συνεισφορά των ταλαντωτών υψηλής συχνότητας, αφού η διαθέσιμη ενέργεια δεν επαρκεί για να τους διεγείρει.*

Λεπτομερής υπολογισμός (όπως γίνεται στο κεφάλαιο 21) δείχνει ότι η ενεργειακή πυκνότητα μεταξύ λ και $\lambda + d\lambda$ δίνεται από την **κατανομή Planck**:

$$d\mathcal{E} = \rho d\lambda, \quad \text{όπου} \quad \rho = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\left(\frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1}\right). \tag{13.5}$$

Η έκφραση αυτή ταιριάζει πολύ καλά με την πειραματική καμπύλη σε όλα τα μήκη κύματος και με την τιμή του h, το οποίο αρχικά, όταν το εισήγαγε ο Planck, αποτελούσε μια μη καθορισμένη παράμετρο της θεωρίας. Ο υπολογισμός της σταθεράς h μπορεί να γίνει μεταβάλλοντας τις τιμές της, έως ότου επιτευχθεί η βέλτιστη συμφωνία της κατανομής με την πειραματική καμπύλη.

Η κατανομή Planck διαφέρει από το νόμο Rayleigh-Jeans (Εξ. 13.3) μόνο κατά τον εκθετικό παράγοντα, ο οποίος όμως είναι πάρα πολύ σημαντικός. Για μικρά μήκη κύματος ο εκθέτης $hc/\lambda kT$ είναι μεγάλος και $e^{hc/\lambda kT} \to \infty$, συνεπώς

$$\rho \to 0 \quad \text{καθώς} \quad \lambda \to 0 \quad \text{και} \quad \nu \to \infty.$$

Έτσι, η ενεργειακή πυκνότητα στις υψηλές συχνότητες τείνει στο μηδέν, κάτι που βρίσκεται σε συμφωνία με τις παρατηρήσεις. Για μεγάλα μήκη κύματος $hc/\lambda kT << 1$ και ο παρονομαστής στην κατανομή Planck μπορεί να αντικατασταθεί ως εξής:

$$e^{hc/\lambda kT} - 1 = \left(1 + \frac{hc}{\lambda kT} + \ldots\right) - 1 \approx \frac{hc}{\lambda kT}.$$

Είναι, λοιπόν, εύκολο να δειχθεί (αντικαθιστώντας αυτή τη σχέση στην εξίσωση (13.5)) ότι ο τύπος του Planck ανάγεται στο νόμο Rayleigh-Jeans στην περίπτωση της ακτινοβολίας μεγάλου μήκους κύματος.

Η κατανομή Planck τεκμηριώνει επίσης τους νόμους των Stefan-Boltzmann και Wien. Ο πρώτος προκύπτει με ολοκλήρωση της ενεργειακής πυκνότητας σε όλα τα μήκη κύματος, από $\lambda = 0$ έως $\lambda = \infty$, η οποία δίνει:

$$\mathcal{E} = \int_0^\infty \rho d\lambda = aT^4, \qquad \text{με} \quad a = \frac{4\sigma}{c}, \quad \sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15c^2h^3}.$$

Αντικαθιστώντας τις τιμές των θεμελιωδών σταθερών παίρνουμε $\sigma = 5{,}67 \times 10^{-8}\,\mathrm{W\,m^{-2}\,K^{-4}}$, σε συμφωνία με την πειραματική τιμή. Ο νόμος του Wien προκύπτει από την εύρεση του μήκους κύματος για το οποίο $d\mathcal{E}/d\lambda = 0$, σχέση που εκφράζει τη συνθήκη μεγίστου της κατανομής. Σε υψηλές θερμοκρασίες η παράγωγος αυτή μηδενίζεται στο $\lambda_{\max}$, όπου:

$$T\lambda_{\max} = \frac{hc}{5k}.$$

Το αποτέλεσμα αυτό μας επιτρέπει να ταυτίσουμε τη δεύτερη σταθερά ακτινοβολίας ως $c_2 = \frac{hc}{k}$. Η τιμή τής c_2 προκύπτει $1{,}439\,\mathrm{cm\,K}$, σε καλή συμφωνία με το πείραμα.

Σε αυτό το στάδιο πρέπει να συμπεράνουμε ότι η ενέργεια των ταλαντωτών που συνθέτουν το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο είναι κβαντωμένη.

13.1(γ) Θερμοχωρητικότητες

Θα εξετάσουμε τώρα τα πειραματικά δεδομένα που αφορούν τις θερμοχωρητικότητες των στερεών, τα οποία επίσης οδήγησαν στην άποψη ότι η ενέργεια είναι κβαντωμένη. Αν ίσχυε η κλασική φυσική, από το θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας[1] θα συνεπαγόταν ότι η μέση ενέργεια ταλάντωσης κάθε ατόμου σε ένα στερεό είναι ίση με $3kT$. Για

[1] Βλέπε *Εισαγωγή* στον πρώτο τόμο. Η ενέργεια ενός μονοδιάστατου ταλαντωτή καθορίζεται από δύο τετραγωνικούς όρους, την κινητική ενέργεια, $p^2/2m$, και τη δυναμική ενέργεια, η οποία είναι ανάλογη του x^2. Σύμφωνα με το θεώρημα η μέση συνεισφορά κάθε όρου είναι $\frac{1}{2}kT$, έτσι ώστε μαζί να συνεισφέρουν kT. Για ένα άτομο ελεύθερο να ταλαντώνεται και στις τρεις διευθύνσεις υπάρχουν τρεις τέτοιες συνεισφορές, που δίνουν συνολική μέση ενέργεια $3kT$.

ένα στερεό αποτελούμενο από N άτομα η ολική ενέργεια ταλάντωσης αναμένεται να είναι $3NkT$. Η συνεισφορά της ενέργειας ταλάντωσης στη γραμμομοριακή εσωτερική ενέργεια είναι συνεπώς:

$$U_{\mathrm{m}} = 3N_{\mathrm{A}}kT = 3RT,$$

αφού $N_{\mathrm{A}}k = R$, η σταθερά των αερίων. Τότε η γραμμομοριακή θερμοχωρητικότητα υπό σταθερό όγκο (Εξ. (2.3.3)) αναμένεται να είναι:

$$C_{V,\mathrm{m}} = \left(\frac{\partial U_{\mathrm{m}}}{\partial T}\right)_V = 3R. \tag{13.6}$$

Το αποτέλεσμα αυτό είναι γνωστό ως **νόμος των Dulong και Petit**, επειδή είχε προταθεί από αυτούς στη βάση κάποιας μάλλον ισχνής πειραματικής επαλήθευσης.

Σημαντικές αποκλίσεις από το νόμο των Dulong και Petit παρατηρήθηκαν όταν η τεχνολογική πρόοδος κατέστησε δυνατή τη μέτρηση θερμοχωρητικοτήτων σε χαμηλές θερμοκρασίες. Βρέθηκε τότε ότι οι γραμμομοριακές θερμοχωρητικότητες όλων των μετάλλων είναι μικρότερες από $3R$ στις χαμηλές θερμοκρασίες και ότι τείνουν στο μηδέν καθώς $T \to 0$. Για να εξηγήσει αυτές τις παρατηρήσεις ο Einstein υπέθεσε (το 1905) ότι κάθε άτομο ταλαντώνεται γύρω από τη θέση ισορροπίας του με μία μόνο συχνότητα ν, κοινή για όλα τα άτομα. Στη συνέχεια, επικαλέστηκε την υπόθεση του Planck για να ισχυριστεί ότι η ενέργεια κάθε ταλαντωτή είναι $nh\nu$, όπου n ένας ακέραιος. Αρχικά υπολόγισε τη γραμμομοριακή ταλαντωτική ενέργεια του μετάλλου (με μια μέθοδο που περιγράφεται στην ενότητα 21.3) η οποία προέκυψε ίση με:

$$U_{\mathrm{m}} = \frac{3N_{\mathrm{A}}h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1},$$

αντί της κλασικής έκφρασης $3RT$. Έπειτα βρήκε τη θερμοχωρητικότητα παραγωγίζοντας το U_{m} ως προς T. Η έκφραση στην οποία κατέληξε είναι πλέον γνωστή ως **τύπος του Einstein**:

$$C_{V,\mathrm{m}} = 3Rf^2, \qquad \text{όπου} \quad f = \frac{h\nu}{kT}\left(\frac{e^{h\nu/2kT}}{e^{h\nu/kT} - 1}\right). \tag{13.7}$$

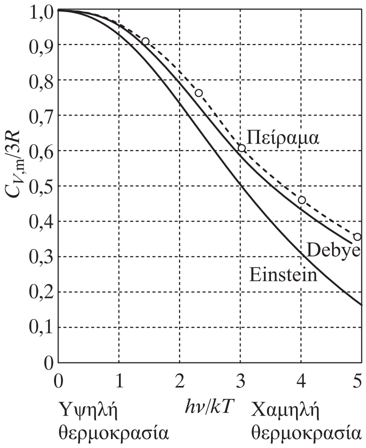
Σε υψηλές θερμοκρασίες (όταν $h\nu/kT << 1$) τα εκθετικά στην έκφραση του f μπορούν να αναπτυχθούν χρησιμοποιώντας τη σχέση $e^x = 1 + x + {} + \ldots$ αγνοώντας τους όρους μεγαλύτερης τάξης. Το αποτέλεσμα είναι:

$$f = \frac{h\nu}{kT} \times \frac{1 + \frac{h\nu}{2kT} + \ldots}{\left(1 + \frac{h\nu}{kT} + \ldots\right) - 1} = 1 + \frac{h\nu}{2kT} + \ldots \approx 1.$$

Επομένως, στις υψηλές θερμοκρασίες λαμβάνεται το κλασικό αποτέλεσμα ($C_{V,\mathrm{m}} = 3R$). Στις χαμηλές θερμοκρασίες, όταν $h\nu/kT >> 1$,

$$f \approx \frac{h\nu}{kT} \times \frac{e^{h\nu/2kT}}{e^{h\nu/kT}} = \frac{h\nu}{kT} \times e^{-h\nu/2kT},$$

και η ισχυρά φθίνουσα εκθετική συνάρτηση τείνει στο μηδέν πιο γρήγορα απ' ό,τι τείνει στο άπειρο ο άλλος παράγοντας του γινομένου,



Σχ. 13.4: Πειραματικές τιμές των θερμοχωρητικοτήτων σε χαμηλές θερμοκρασίες και θεωρητικές προβλέψεις. Ο νόμος των Dulong και Petit δεν προβλέπει ελάττωση στις χαμηλές θερμοκρασίες (στα δεξιά της γραφικής παράστασης): ο τύπος του Einstein (Εξ. (13.7)) προβλέπει τη γενική θερμοκρασιακή εξάρτηση αρκετά καλά, αλλά (η αντίστοιχη καμπύλη) βρίσκεται πολύ χαμηλά (σε σχέση με την πειραματική). Η τροποποίηση του Debye δίνει πολύ καλή συμφωνία με το πείραμα. Για το χαλκό το πηλίκο $h\nu/kT = 2$ αντιστοιχεί περίπου σε 170 K, έτσι η ανακάλυψη των αποκλίσεων από το νόμο των Dulong και Petit έπρεπε να περιμένει την πρόοδο (που συντελέστηκε) στον τομέα της φυσικής χαμηλών θερμοκρασιών.

έτσι ώστε $f \to 0$ καθώς $T \to 0$, και συνεπώς η θερμοχωρητικότητα τείνει επίσης στο μηδέν. Ο τύπος του Einstein, επομένως, προβλέπει τη μείωση της θερμοχωρητικότητας στις χαμηλές θερμοκρασίες. Η φυσική ερμηνεία αυτής της επιτυχίας συνίσταται στο ότι, όπως και στην περίπτωση των υπολογισμών του Planck, στις χαμηλές θερμοκρασίες μόνο λίγοι ταλαντωτές διαθέτουν αρκετή ενέργεια ώστε να ξεκινήσουν να ταλαντώνονται. Στις υψηλότερες θερμοκρασίες, υπάρχει αρκετή ενέργεια διαθέσιμη για τη διέγερση όλων των ταλαντωτών: συνεισφέρουν τότε και οι $3N$ ταλαντωτές και η θερμοχωρητικότητα προσεγγίζει την κλασική της τιμή.

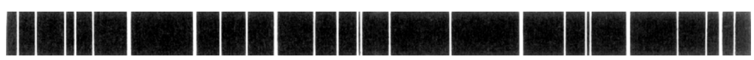
Η συνολική θερμοκρασιακή εξάρτηση που προβλέπει ο τύπος του Einstein παριστάνεται γραφικά στο σχήμα 13.4: η γενική μορφή της καμπύλης είναι ικανοποιητική, αλλά η ποσοτική συμφωνία είναι στην πραγματικότητα ανεπαρκής. Η ανεπαρκής αυτή συμφωνία απορρέει από την υπόθεση του Einstein ότι όλα τα άτομα ταλαντώνονται με την ίδια συχνότητα, ενώ στην πραγματικότητα οι ταλαντώσεις καλύπτουν ένα εύρος συχνοτήτων. Αυτή η περιπλοκή λαμβάνεται υπόψη αθροίζοντας πάνω σε όλες τις συχνότητες που εμφανίζονται, δίνοντας ως τελικό αποτέλεσμα τον **τύπο του Debye**. Οι λεπτομέρειες αυτής της τροποποίησης, η οποία, όπως φαίνεται στο σχήμα 13.4, βελτιώνει τη συμφωνία με το πείραμα, δεν πρέπει να μας περισπούν σε αυτό το στάδιο από το κύριο συμπέρασμα, ότι δηλαδή *πρέπει να επικαλεστούμε την κβάντωση προκειμένου να εξηγήσουμε τις θερμικές ιδιότητες των στερεών.*

Στο σημείο αυτό πρέπει να συμπεράνουμε ότι δεν είναι μόνο οι ηλεκτρομαγνητικοί ταλαντωτές κβαντωμένοι, αλλά επίσης και οι ταλαντώσεις των ατόμων της ύλης.

13.1(δ) Ατομικά και μοριακά φάσματα

Η μαρτυρία που με τον πλέον άμεσο τρόπο υποδεικνύει την κβάντωση της ενέργειας προέρχεται από την παρατήρηση των συχνοτήτων της ακτινοβολίας που απορροφάται και εκπέμπεται από τα άτομα και τα μόρια.

Δύο τυπικά φάσματα, ένα ατομικό και ένα μοριακό, παρατίθενται στα σχήματα 13.5 και 13.6, αντίστοιχα. Το προφανές χαρακτηριστικό και των δύο είναι ότι η ακτινοβολία εκπέμπεται ή απορροφάται σε μία σειρά διακριτών συχνοτήτων. Αυτό γίνεται κατανοητό αν θεωρηθεί ότι η ενέργεια των ατόμων ή μορίων περιορίζεται επίσης σε διακριτές τιμές, γιατί τότε η ακτινοβολία μπορεί να εκπεμφθεί ή να απορροφηθεί μόνο κατά διακριτά ενεργειακά ποσά (Σχ. 13.7). Συνεπώς, αν η ενέργεια ενός ατόμου μειώνεται κατά ΔE, το ποσό αυτό αποβάλλεται (εκπέμπεται) υπό μορφή ακτινοβολίας συχνότητας $\nu = \Delta E/h$ και μια γραμμή εμφανίζεται στο φάσμα.

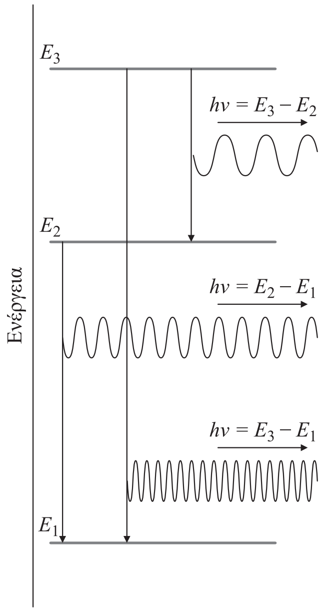


Σχ. 13.5: Το φάσμα εκπομπής διεγερμένων ατόμων υδραργύρου αποτελείται από ακτινοβολία που κατανέμεται σε μια σειρά διακριτών συχνοτήτων (όπου η συχνότητα αυξάνεται προς τα δεξιά). Η φωτογραφική καταγραφή των φασμάτων έχει αντικατασταθεί από την ηλεκτρονική ανίχνευση και τη γραφική απεικόνιση, αλλά αυτή η φωτογραφία και η επόμενη δείχνουν την προέλευση του όρου φασματική γραμμή για ένα φάσμα εκπομπής ή απορρόφησης.

Σχ. 13.6: Ένα μόριο αλλάζει κατάσταση απορροφώντας ακτινοβολία συγκεκριμένων συχνοτήτων. Το γεγονός αυτό δηλώνει ότι η ενέργεια του μορίου μπορεί να λαμβάνει μόνο διακριτές τιμές και όχι αυθαίρετες. Αυτή η φωτογραφία είναι ένα μέρος του φάσματος απορρόφησης του ScF στο υπεριώδες (πηγή: Dr. R.F. Barrow).

13.2 Κυματοσωματιδιακός δυϊσμός

Σε αυτήν την ενότητα θα δούμε τα εμπειρικά δεδομένα που οδήγησαν στη διατύπωση μιας εκ βάθρων αναθεώρησης δύο βασικών εννοιών που αφορούν τη φύση του κόσμου. Βάσει του φωτοηλεκτρικού φαινομένου βλέπουμε ότι η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία –την οποία η κλασική φυσική αντιμετωπίζει ως κύμα– στην πραγματικότητα παρουσιάζει επίσης σωματιδιακά χαρακτηριστικά. Κατόπιν, μέσω πειραμάτων περίθλασης ηλεκτρονίων, θα δούμε ότι τα ηλεκτρόνια –τα οποία η κλασική φυσική αντιμετωπίζει ως σωματίδια– παρουσιάζουν επίσης κυματικά χαρακτηριστικά.



Σχ. 13.7: Οι φασματικές γραμμές μπορούν να εξηγηθούν, αν υποθέσουμε ότι ένα μόριο εκπέμπει ένα φωτόνιο, καθώς μεταπίπτει από ένα διακριτό ενεργειακό επίπεδο σε άλλο. Σημειώστε ότι ακτινοβολία υψηλής συχνότητας εκπέμπεται, όταν η ενεργειακή μεταβολή είναι μεγάλη.

13.2(α) Ο σωματιδιακός χαρακτήρας της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας

Οι πληροφορίες που έχουμε συναντήσει ως τώρα υποδεικνύουν σθεναρά ότι η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία έχει σωματιδιακό χαρακτήρα. Έτσι, επειδή η ενέργεια ενός ταλαντωτή συχνότητας ν μπορεί να λαμβάνει μόνο τις τιμές $0, h\nu, 2h\nu, \ldots$, η μελέτη του Planck υπαγορεύει ότι ακτινοβολία αυτής της συχνότητας μπορεί να θεωρηθεί ότι συνίσταται από $0, 1, 2, \ldots$ σωματίδια, με καθένα από αυτά να έχει ενέργεια $h\nu$. Αυτά τα σωματίδια της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας καλούνται πλέον *φωτόνια*. Η παρατήρηση διακριτών φασμάτων από τα άτομα και τα μόρια μπορεί να αναπαρασταθεί σαν το άτομο ή το μόριο να παράγει ένα φωτόνιο ενέργειας $h\nu$, όταν αποβάλλει ενέργεια ΔE, με $\Delta E = h\nu$.

Παράδειγμα 13.1

Υπολογισμός του αριθμού των φωτονίων

Υπολογίστε τον αριθμό των φωτονίων που εκπέμπονται από έναν κίτρινο λαμπτήρα 100 W σε 1 s. Θεωρήστε ότι το μήκος κύματος του κίτρινου χρώματος είναι 560 nm και υποθέστε 100% απόδοση.

- *Μέθοδος*. Κάθε φωτόνιο έχει ενέργεια $h\nu$, έτσι ο συνολικός αριθμός φωτονίων που απαιτούνται για την παραγωγή ενέργειας E είναι $E/h\nu$. Για να χρησιμοποιήσουμε αυτή τη σχέση, πρέπει να γνωρίζουμε τη συχνότητα της ακτινοβολίας (από τον τύπο $\nu = c/\lambda$) και την ολική ενέργεια που εκπέμπει ο λαμπτήρας. Η τελευταία δίνεται από το γινόμενο της ισχύος (σε watts) επί το χρόνο για τον οποίο η πηγή λειτουργεί ($E = Pt$).
- *Απάντηση*. Ο αριθμός των φωτονίων είναι

$$N = \frac{E}{h\nu} = \frac{Pt}{h \times \frac{c}{\lambda}} = \frac{\lambda P t}{hc}.$$

Η αντικατάσταση των δεδομένων δίνει

$$N = \frac{(5{,}60 \times 10^{-7}\,\mathrm{m}) \times (100\,\mathrm{W}) \times (1{,}0\,\mathrm{s})}{(6{,}626 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}) \times (2{,}998 \times 10^{8}\,\mathrm{m\,s^{-1}})} = 2{,}7 \times 10^{20}.$$

- *Άσκηση*. Πόσα φωτόνια μήκους κύματος 1000 nm εκπέμπει ένα τηλέμετρο μονοχρωματικής υπέρυθρης ακτινοβολίας και ισχύος 1 mW σε 0,1 s; $[5 \times 10^{14}]$

Μια επιπλέον απόδειξη του σωματιδιακού χαρακτήρα της ακτινοβολίας (και ιστορικά το κίνητρο του Einstein για να προτείνει την ύπαρξη σωματιδίων ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας) προέρχεται από τη μέτρηση των ενεργειών των ηλεκτρονίων που παράγονται κατά το **φωτοηλεκτρικό φαινόμενο**. Το φαινόμενο αυτό συνίσταται στην αποβολή ηλεκτρονίων από μέταλλα, όταν αυτά εκτίθενται σε υπεριώδη ακτινοβολία. Τα πειραματικά χαρακτηριστικά του φωτοηλεκτρικού φαινομένου είναι τα εξής:

(1) Δεν εκπέμπονται ηλεκτρόνια, ανεξάρτητα από την ένταση της ακτινοβολίας, παρά μόνο όταν η συχνότητα αυτής υπερβεί μια τιμή κατωφλίου, χαρακτηριστική για κάθε μέταλλο.
(2) Η κινητική ενέργεια των εκπεμπόμενων ηλεκτρονίων μεταβάλλεται γραμμικά με τη συχνότητα της προσπίπτουσας ακτινοβολίας, αλλά είναι ανεξάρτητη από την έντασή της.
(3) Ακόμα και για μικρές εντάσεις της ακτινοβολίας, η εκπομπή των ηλεκτρονίων είναι ακαριαία, αν η συχνότητα υπερβαίνει την τιμή κατωφλίου.

Οι παραπάνω παρατηρήσεις αποτελούν ισχυρές ενδείξεις ότι το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο βασίζεται στην εκπομπή ενός ηλεκτρονίου, όταν αυτό συγκρούεται με ένα βλήμα σωματιδιακού χαρακτήρα, που έχει αρκετή ενέργεια ώστε να προκαλέσει αποβολή του ηλεκτρονίου από το μέταλλο. Αν υποθέσουμε ότι το βλήμα είναι φωτόνιο ενέργειας $h\nu$, όπου ν η συχνότητα της ακτινοβολίας, τότε η διατήρηση της ενέργειας απαιτεί η κινητική ενέργεια του ηλεκτρονίου να υπακούει στη σχέση

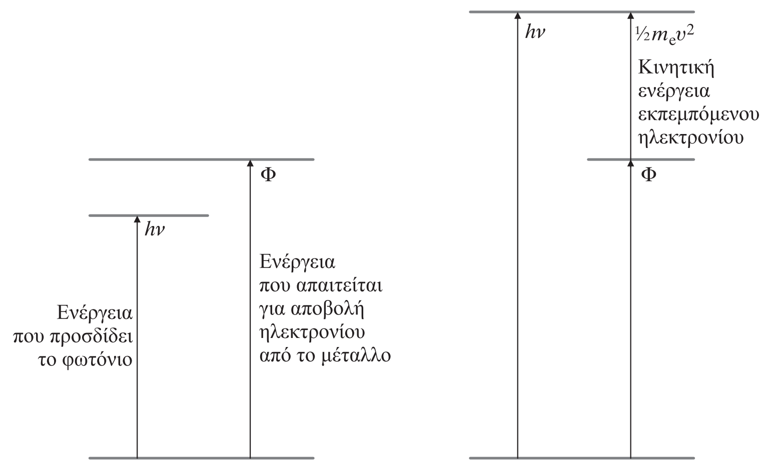
$$\frac{1}{2}m_{\mathrm{e}}v^2 = h\nu - \Phi. \tag{13.8}$$

Σε αυτή την εξίσωση το Φ είναι ένα χαρακτηριστικό του μετάλλου, που καλείται **έργο εξαγωγής** και εκφράζει την ενέργεια που απαιτείται για την απόσπαση ενός ηλεκτρονίου (το ανάλογο της ενέργειας ιονισμού των ατόμων, Σχ. 13.8). Αν $h\nu < \Phi$, τότε δεν λαμβάνει χώρα φωτοεκπομπή, αφού η ενέργεια που φέρει το φωτόνιο δεν είναι αρκετή: αυτό εξηγεί την παρατήρηση (1). Η εξίσωση (13.8) προβλέπει ότι η κινητική ενέργεια ενός εκπεμπόμενου ηλεκτρονίου θα μεταβάλλεται γραμμικά με τη συχνότητα, σε συμφωνία με την παρατήρηση (2). Όταν ένα φωτόνιο συγκρούεται με ένα ηλεκτρόνιο, τότε αποδίδει όλη του την ενέργεια, που σημαίνει ότι θα πρέπει να περιμένουμε την εμφάνιση ηλεκτρονίων αμέσως μόλις αρχίσουν οι συγκρούσεις, υπό τον όρο ότι η ενέργεια που διατίθεται είναι επαρκής: αυτό συμφωνεί με την παρατήρηση (3).

Σε αυτό το στάδιο πρέπει να συμπεράνουμε ότι η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία μαζί με τις κυματικές ιδιότητες, έχει επίσης ιδιότητες χαρακτηριστικές των σωματιδίων.

13.2(β) Ο κυματικός χαρακτήρας των σωματιδίων

Αν και αντίθετη στην από καιρό θεμελιωμένη κυματική θεωρία του φωτός, η άποψη ότι αυτό αποτελείται από σωματίδια είχε υποστηριχθεί



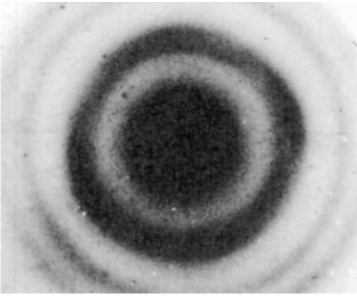
Σχ. 13.8: Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο μπορεί να εξηγηθεί, αν υποτεθεί ότι η προσπίπτουσα ακτινοβολία αποτελείται από φωτόνια, των οποίων η ενέργεια είναι ανάλογη με τη συχνότητα της ακτινοβολίας. (α) Η ενέργεια του φωτονίου δεν επαρκεί για να αποβάλει ένα ηλεκτρόνιο από το μέταλλο. (β) Η ενέργεια του φωτονίου είναι μεγαλύτερη από αυτή που απαιτείται για την απόσπαση ενός ηλεκτρονίου, και η πλεονάζουσα ενέργεια αποβάλλεται ως κινητική ενέργεια του φωτοηλεκτρονίου (του εκπεμπόμενου ηλεκτρονίου).

στο παρελθόν, αλλά απορρίφθηκε. Κανένας σημαντικός επιστήμονας, ωστόσο, δεν υιοθέτησε την άποψη ότι η ύλη έχει κυματικές ιδιότητες. Παρ' όλ' αυτά, πειράματα που διεξήχθησαν το 1925 οδήγησαν αναγκαστικά ακόμα και σε αυτό το συμπέρασμα. Το κρίσιμο πείραμα έγινε από τους αμερικανούς φυσικούς Clinton Davisson και Lester Germer, οι οποίοι παρατήρησαν την περίθλαση ηλεκτρονίων από έναν κρύσταλλο (Σχ. 13.9). Η περίθλαση είναι μια χαρακτηριστική ιδιότητα των κυμάτων, επειδή εμφανίζεται όταν συμβάλλουν τα μέγιστα και τα ελάχιστά τους. Ανάλογα με το αν η συμβολή είναι ενισχυτική ή αναιρετική οδηγεί σε περιοχές αυξημένης ή ελαττωμένης έντασης. Η επιτυχία των Davisson και Germer ήταν αποτέλεσμα ευτυχούς συγκυρίας, αφού μια τυχαία αύξηση της θερμοκρασίας προκάλεσε μια αναδόμηση του πολυκρυσταλλικού δείγματος μετά από την οποία τα διατεταγμένα επίπεδα ατόμων λειτούργησαν ως φράγμα περίθλασης. Την ίδια εποχή σχεδόν ο G.P. Thomson, που εργαζόταν στο Aberdeen, έδειξε ότι μια δέσμη ηλεκτρονίων υφίστατο περίθλαση, όταν διερχόταν από ένα λεπτό φύλλο χρυσού (Σχ. 13.10).

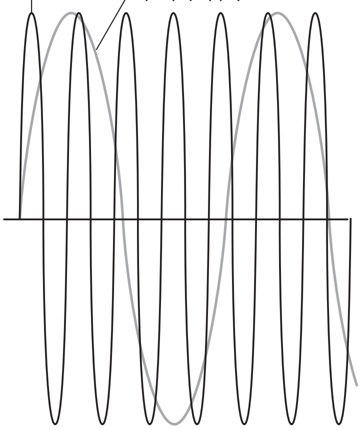
Σχ. 13.9: Το πείραμα των Davisson-Germer. Η σκέδαση μιας δέσμης ηλεκτρονίων από έναν κρύσταλλο νικελίου παρουσιάζει μια κατανομή εντάσεων χαρακτηριστική ενός πειράματος περίθλασης, στο οποίο κύματα συμβάλλουν ενισχυτικά ή αναιρετικά σε διαφορετικές διευθύνσεις.

Το πείραμα των Davisson-Germer, το οποίο από τότε επαναλήφθηκε με άλλα σωματίδια (συμπεριλαμβανομένου και μοριακού υδρογόνου), δείχνει ξεκάθαρα ότι τα σωματίδια έχουν κυματικές ιδιότητες. Έχουμε επίσης δει ότι τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα διαθέτουν σωματιδιακές ιδιότητες. Έτσι φτάνουμε στην καρδιά της σύγχρονης φυσικής. *Όταν εξετάζονται σε ατομική κλίμακα, οι έννοιες σωματίδιο και κύμα συγχωνεύονται, με τα σωματίδια να αποκτούν χαρακτηριστικά κυμάτων και τα κύματα χαρακτηριστικά σωματιδίων.*

Κάποια πρόοδος για τη συσχέτιση αυτών των ιδιοτήτων είχε ήδη γίνει από τον Louis de Broglie, όταν το 1924 πρότεινε για θεωρητικούς λόγους ότι όχι μόνο τα φωτόνια, αλλά και κάθε σωματίδιο που κινείται με ορμή p θα έπρεπε να έχει (υπό μια έννοια) μήκος κύματος που δίνεται από τη **σχέση de Broglie**:



Σχ. 13.10: Το πείραμα Thomson. Αυτή είναι η πραγματική φωτογραφία που πήρε ο G.P.Thomson όταν κατηύθυνε μια δέσμη ηλεκτρονίων μέσα από ένα λεπτό φύλλο χρυσού και ανίχνευσε δακτύλιους εναλλασσόμενης έντασης σε μια φωτογραφική πλάκα η οποία κατέγραψε την άφιξη των ταχέως κινούμενων ηλεκτρονίων.



Σχ. 13.11: Μια απεικόνιση της σχέσης de Broglie μεταξύ ορμής και μήκους κύματος. Ένα σωματίδιο με μεγάλη ορμή έχει κυματοσυνάρτηση μικρού μήκους κύματος και αντιστρόφως.

$$\lambda = \frac{h}{p}. \tag{13.9}$$

Δηλαδή, ένα σωματίδιο με μεγάλη (γραμμική) ορμή έχει μικρό μήκος κύματος (Σχ. 13.11). Αντιστρόφως, ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία μεγάλου μήκους κύματος έχει μικρή ορμή. Οι τιμές της ορμής των μακροσκοπικών σωμάτων είναι τόσο μεγάλες (ακόμα και όταν αυτά κινούνται με μικρή ταχύτητα), ώστε τα αντίστοιχα μήκη κύματος είναι πολύ μικρά για να μπορούν να ανιχνευθούν και έτσι είναι αδύνατον να παρατηρηθούν οι κυματικές ιδιότητες. Η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία στην περιοχή του ορατού και του υπεριώδους έχει τόσο μεγάλα μήκη κύματος, ώστε η ορμή των μεμονωμένων φωτονίων είναι πολύ μικρή και μη ανιχνεύσιμη, εκτός από ιδιάζουσες συνθήκες. Για το λόγο αυτό, οι σωματιδιακές ιδιότητες της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας παρέμειναν απαρατήρητες για μεγάλο χρονικό διάστημα.

Παράδειγμα 13.2

Υπολογισμός του μήκους κύματος de Broglie

Υπολογίστε το μήκος κύματος ηλεκτρονίων που έχουν επιταχυνθεί από την κατάσταση ηρεμίας μέσω μιας διαφοράς δυναμικού 1,00 kV.

- *Μέθοδος*. Για να εφαρμόσουμε τη σχέση του de Broglie πρέπει να γνωρίζουμε την ορμή των ηλεκτρονίων. Για να την υπολογίσουμε, σημειώνουμε ότι η ενέργεια που αποκτά ένα ηλεκτρόνιο μέσω διαφοράς δυναμικού $\Delta\phi$ είναι $e \times \Delta\phi$, όπου e η απόλυτη τιμή του φορτίου του. Τη στιγμή που το ηλεκτρόνιο παύει να επιταχύνεται, όλη η ενέργεια που έχει αποκτήσει είναι υπό μορφή κινητικής ενέργειας $E_K = \frac{1}{2}m_e v^2$. Εκφράζοντας την κινητική ενέργεια συναρτήσει της ορμής $p = m_e v$, παίρνουμε $E_K = p^2/2m_e$. Στη συνέχεια εξισώνουμε την κινητική ενέργεια με την ενέργεια που το ηλεκτρόνιο απέκτησε λόγω επιτάχυνσης, από όπου βρίσκουμε την p και ακολούθως βάσει της εξίσωσης (13.9), το μήκος κύματος.
- *Απάντηση*. Μετά την επιτάχυνση του ηλεκτρονίου

$$\frac{p^2}{2m_e} = e\Delta\phi,$$

το οποίο συνεπάγεται κατ' αρχάς ότι

$$p = (2m_e e\Delta\phi)^{\frac{1}{2}}$$

και επομένως ότι το μήκος κύματος de Broglie είναι

$$\lambda = \frac{h}{(2m_e e\Delta\phi)^{\frac{1}{2}}}.$$

Η αντικατάσταση των δεδομένων και των τιμών των θεμελιωδών σταθερών (που παρατίθενται στο μπροστινό εσώφυλλο) δίνει

$$\lambda = \frac{6{,}626 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}}{\{2 \times (9{,}109 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg}) \times (1{,}602 \times 10^{-19}\,\mathrm{C}) \times (1{,}00 \times 10^{3}\,\mathrm{V})\}^{\frac{1}{2}}}$$
$$= 3{,}88 \times 10^{-11}\,\mathrm{m}.$$

- *Σχόλιο*. Χρησιμοποιήσαμε τις ισότητες $1\,\mathrm{C\,V} = 1\,\mathrm{J}$ και $1\,\mathrm{J} = 1\,\mathrm{kg\,m^2\,s^{-2}}$. Το μήκος κύματος των 38,8 pm είναι συγκρίσιμο με τα τυπικά μήκη των δεσμών σε ένα μόριο (περίπου 100 pm). Ηλεκτρόνια που επιταχύνονται με αυτό τον τρόπο χρησιμοποιούνται στην τεχνική της περίθλασης ηλεκτρονίων (Ενότητα 23.10) για τον καθορισμό της μοριακής δομής.

- *Άσκηση*. Υπολογίστε το μήκος κύματος ενός ηλεκτρονίου μέσα σε επιταχυντή σωματιδίων ενέργειας 10 MeV ($1\,\mathrm{MeV} = 10^6\,\mathrm{eV}$).

[0,39 pm]

Πρέπει τώρα να συμπεράνουμε ότι δεν έχει μόνο η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία σωματιδιακό χαρακτήρα, αλλά και τα ηλεκτρόνια (και άλλα σωματίδια) έχουν τα χαρακτηριστικά κυμάτων. Αυτός ο διττός σωματιδιακός και κυματικός χαρακτήρας της ύλης και της ακτινοβολίας καλείται **κυματοσωματιδιακός δυϊσμός**. Ο δυϊσμός αυτός καταφέρει καίριο πλήγμα στην καρδιά της κλασικής φυσικής, στα πλαίσια της οποίας τα σωματίδια και τα κύματα αντιμετωπίζονται ως εντελώς ανεξάρτητες οντότητες. Είδαμε, επίσης, ότι η ενέργεια της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας και της ύλης δεν μπορεί να παίρνει συνεχείς τιμές και ότι, για μικρά σωματίδια, ο διακριτός χαρακτήρας της είναι ιδιαίτερα σημαντικός. Στην κλασική μηχανική, αντίθετα, η ενέργεια μπορεί να λαμβάνει συνεχείς τιμές. Τέτοια ολοκληρωτική αποτυχία της κλασικής φυσικής για μικρά σωματίδια συνεπάγεται ότι, σε αυτές τις κλίμακες μεγέθους, οι βασικές της έννοιες είναι λανθασμένες. Μια νέα μηχανική έπρεπε να επινοηθεί για να πάρει τη θέση της.

Η ΔΥΝΑΜΙΚΗ ΤΩΝ ΜΙΚΡΟΣΚΟΠΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

Από εδώ και στο εξής θα συνδυάσουμε τα χαρακτηριστικά σωματιδίων και κυμάτων και θα υποθέσουμε ότι η θέση ενός σωματιδίου κατανέμεται στο χώρο όπως το πλάτος ενός κύματος. Αυτή η παρατήρηση και η συγχώνευση των σωματιδιακών και κυματικών ιδιοτήτων που συνεπάγεται, πιθανόν σε αυτό το στάδιο να φαίνεται αινιγματική, σύντομα όμως θα διασαφηνιστεί πληρέστερα. Το κύμα που στην κβαντική μηχανική αντικαθιστά την κλασική έννοια της τροχιάς καλείται **κυματοσυνάρτηση** και συμβολίζεται με ψ.

Στις επόμενες ενότητες θα αναπτυχθεί βαθμηδόν η κατανόηση της σημασίας που έχουν οι κυματοσυναρτήσεις των σωματιδίων. Κατ' αρχάς θα δούμε πώς να υπολογίζουμε τη μαθηματική μορφή της κυματοσυνάρτησης και έπειτα θα ασχοληθούμε με την ερμηνεία της. Τα χαρακτηριστικά που θα έχουν εν γένει οι κυματοσυναρτήσεις, τα οποία θα ήταν χρήσιμο να έχουμε κατά νου καθ' όλη τη διάρκεια της συζήτησης που ακολουθεί, έχουν ως εξής:

(1) Μια κυματοσυνάρτηση δεν είναι παρά μια μαθηματική συνάρτηση (όπως η $\sin x$ ή η e^{-x}), η οποία μπορεί να παίρνει μεγάλες τιμές σε μια περιοχή, μικρές σε άλλες, και αλλού να μηδενίζεται.

(2) Μια κυματοσυνάρτηση εμπεριέχει όλες τις πληροφορίες που είναι δυνατόν να αντλήσουμε σχετικά με τη θέση και την κίνηση του σωματιδίου που περιγράφει.

(3) Αν η τιμή μιας κυματοσυνάρτησης είναι μεγάλη σε ένα συγκεκριμένο σημείο, τότε η πιθανότητα να βρίσκεται το σωματίδιο σε αυτό το σημείο είναι επίσης μεγάλη· αν η κυματοσυνάρτηση μηδενίζεται σε ένα σημείο, τότε το σωματίδιο δεν πρόκειται να βρεθεί εκεί.

(4) Όσο πιο απότομα μεταβάλλεται μια κυματοσυνάρτηση στο χώρο, τόσο μεγαλύτερη είναι η κινητική ενέργεια του σωματιδίου που περιγράφει.

13.3 Η εξίσωση του Schrödinger

Το 1926 ο αυστριακός φυσικός Erwin Schrödinger υπέδειξε μια εξίσωση για την εύρεση της κυματοσυνάρτησης οποιουδήποτε φυσικού συστήματος. Η εξίσωση του Schrödinger για ένα σωματίδιο μάζας m, που κινείται με ενέργεια E σε μία διάσταση, είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi. \tag{13.10}$$

Ο όρος $V(x)$, ο οποίος γενικά εξαρτάται από τη θέση x παριστά τη δυναμική ενέργεια του σωματιδίου· το $\hbar$ (που διαβάζεται h-cross ή h-bar) είναι μια βολική τροποποίηση της σταθεράς του Planck:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}05457 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}.$$

Ποικίλοι τρόποι για να εκφράσουμε αυτή την εξίσωση, για να την επεκτείνουμε σε περισσότερες διαστάσεις καθώς και για να ενσωματώσουμε τη χρονική εξάρτηση της κυματοσυνάρτησης βρίσκονται συγκεντρωμένοι στο Πλαίσιο 13.1.

Πλαίσιο 13.1. *Η εξίσωση του Schrödinger*

Για μονοδιάστατα συστήματα:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi,$$

όπου $V(x)$ είναι η δυναμική ενέργεια του σωματιδίου και E η ενέργειά του.

Για τριδιάστατα συστήματα:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi,$$

όπου το V μπορεί να εξαρτάται από τη θέση και το ∇^2 (ανάδελτα τετράγωνο) είναι

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Σε συστήματα με σφαιρική συμμετρία:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\Lambda^2,$$

όπου

$$\Lambda^2 = \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}.$$

Στη γενική περίπτωση η εξίσωση του Schrödinger γράφεται

$$H\psi = E\psi,$$

όπου H είναι ο τελεστής της χαμιλτονιανής του συστήματος:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V.$$

Για τη μελέτη της χρονικής εξέλιξης ενός συστήματος, είναι απαραίτητο να λυθεί η χρονοεξαρτημένη εξίσωση του Schrödinger:

$$H\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

ΑΙΤΙΟΛΟΓΗΣΗ

Αν και η εξίσωση του Schrödinger πρέπει να θεωρηθεί ως ένα αξίωμα, όπως οι εξισώσεις του Νεύτωνα για την κίνηση, μπορεί να φανεί εύλογη αν σημειώσουμε ότι συνεπάγεται τη σχέση του de Broglie για ένα ελεύθερα κινούμενο σωματίδιο. Αρχικά η Εξ. (13.10), με αναδιάταξη των όρων της, μπορεί να γραφεί

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\{E - V(x)\}\psi.$$

Αν το δυναμικό έχει σταθερή τιμή V, μια λύση αυτής της εξίσωσης είναι η

$$\psi = e^{ikx} = \cos kx + i\sin kx, \quad \text{όπου} \quad k = \left(\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Το $\cos kx$ (ή το $\sin kx$) παριστάνει ένα κύμα μήκους κύματος $\lambda = 2\pi/k$, όπως μπορεί να δει κανείς συγκρίνοντας το $\cos kx$ με τη συνήθη μορφή ενός αρμονικού κύματος, $\cos(2\pi x/\lambda)$. Η ποσότητα $E - V$ ισούται με την κινητική ενέργεια E_K του σωματιδίου, έτσι $k = (2mE_K/\hbar^2)^{\frac{1}{2}}$, το οποίο συνεπάγεται ότι $E_K = k^2\hbar^2/2m$. Επειδή $E_K = p^2/2m$, έπεται ότι

$$p = k\hbar.$$

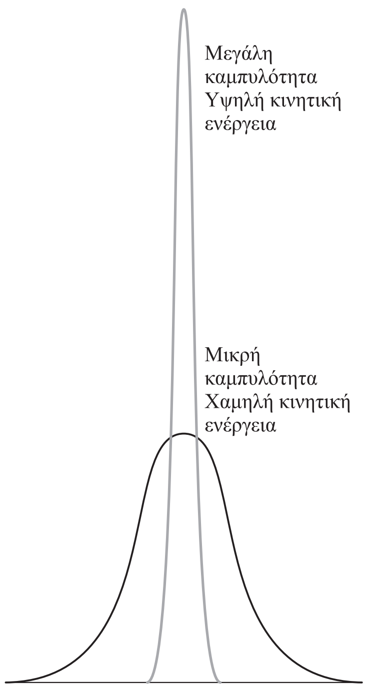
Συνεπώς, η ορμή και το μήκος κύματος της κυματοσυνάρτησης συνδέονται με τη σχέση

$$p = \frac{2\pi}{\lambda} \times \frac{h}{2\pi} = \frac{h}{\lambda},$$

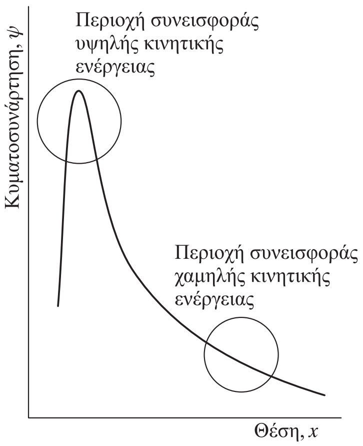
η οποία είναι η σχέση de Broglie.

Θα αρχίσουμε τώρα να εδραιώνουμε την ερμηνεία μιας κυματοσυνάρτησης. Για το σκοπό αυτό, θα χρησιμοποιήσουμε τη σχέση του de Broglie (ή κατ' ισοδυναμία τη λύση που αποδείξαμε στην Αιτιολόγηση) δηλαδή

$$\lambda = \frac{h}{\{2m(E-V)\}^{\frac{1}{2}}}. \tag{13.11}$$



Σχ. 13.12: Η μέση κινητική ενέργεια ενός σωματιδίου προκύπτει από την καμπυλότητα της κυματοσυνάρτησης: η έντονα καμπυλωμένη συνάρτηση αντιστοιχεί σε μεγαλύτερη κινητική ενέργεια απ' ό,τι εκείνη με τη μικρότερη καμπυλότητα.



Σχ. 13.13: Η παρατηρούμενη κινητική ενέργεια ενός σωματιδίου είναι μια μέση τιμή των συνεισφορών από όλο το χώρο που καλύπτει η κυματοσυνάρτηση. Περιοχές μεγάλης καμπυλότητας συνιστούν συνεισφορές υψηλής κινητικής ενέργειας στη μέση τιμή, περιοχές μικρής καμπυλότητας συνεισφέρουν μικρά ποσά κινητικής ενέργειας.

Η παραπάνω εξίσωση δείχνει ότι *όσο μεγαλύτερη είναι η διαφορά μεταξύ της ολικής και της δυναμικής ενέργειας, τόσο μικρότερο είναι το μήκος κύματος της κυματοσυνάρτησης*. Με άλλα λόγια, *όσο μεγαλύτερη είναι η κινητική ενέργεια, τόσο μικρότερο είναι το μήκος κύματος*. Ένα ακίνητο σωματίδιο, δηλαδή ένα σωματίδιο με μηδενική κινητική ενέργεια (και συνεπώς $E = V$), έχει άπειρο μήκος κύματος, πράγμα που σημαίνει ότι η κυματοσυνάρτησή του έχει παντού την ίδια τιμή. Δηλαδή, για ένα σωματίδιο σε κατάσταση ηρεμίας, $\psi =$ σταθερά.

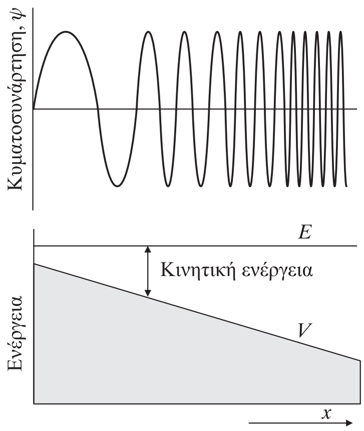
Οι μόνες κυματοσυναρτήσεις που έχουμε δει μέχρι στιγμής είναι πραγματικά κύματα (όπως στο Σχ. 13.11). Ωστόσο, εν ευθέτω χρόνω θα συναντήσουμε κυματοσυναρτήσεις που δεν εκτείνονται αρμονικά στο χώρο και πιθανόν να μοιάζουν με αυτές που απεικονίζονται στο Σχ. 13.12. Τέτοιες κυματοσυναρτήσεις δεν έχουν "μήκος κύματος" και έτσι για να τις ερμηνεύσουμε συναρτήσει της κινητικής ενέργειας στην οποία αντιστοιχούν, χρειαζόμαστε ένα πιο γενικό γνώρισμα του σχήματός τους. Αυτό το γενικό γνώρισμα είναι η *καμπυλότητα* της κυματοσυνάρτησης, την οποία για τους σκοπούς μας θα θεωρήσουμε ως τη δεύτερη παράγωγο, $d^2\psi/dx^2$. Η καμπυλότητα μιας κυματοσυνάρτησης γενικά ποικίλλει από σημείο σε σημείο, έτσι η κινητική ενέργεια του σωματιδίου μεταβάλλεται με τον ίδιο τρόπο. Εκεί όπου η κυματοσυνάρτηση παρουσιάζει μεγάλη καμπυλότητα (δηλαδή μικρή ακτίνα καμπυλότητας, ή με απλούστερη γλώσσα, απότομη χωρική μεταβολή), η συνεισφορά της στην ολική κινητική ενέργεια είναι μεγάλη (Σχ. 13.13). Εκεί όπου η κυματοσυνάρτηση παρουσιάζει μικρή καμπυλότητα (έχει δηλαδή μεγάλη ακτίνα καμπυλότητας), η συνεισφορά της στην ολική κινητική ενέργεια είναι μικρή. Η *παρατηρούμενη* κινητική ενέργεια του σωματιδίου είναι το ολοκλήρωμα όλων των επιμέρους, από κάθε περιοχή, συνεισφορών κινητικής ενέργειας. Ως εκ τούτου, είναι αναμενόμενο ότι το σωματίδιο θα έχει μεγάλη κινητική ενέργεια αν η μέση καμπυλότητα της κυματοσυνάρτησης είναι μεγάλη. Έτσι, μια κυματοσυνάρτηση με μικρό μήκος κύματος (και συνεπώς, κατά μέσο όρο, με μεγάλη καμπυλότητα) έχει μεγάλη κινητική ενέργεια και μια κυματοσυνάρτηση με μεγάλο μήκος κύματος (άρα με μικρή μέση καμπυλότητα) έχει μικρή κινητική ενέργεια.

Ο συσχετισμός της μεγάλης καμπυλότητας με τη μεγάλη κινητική ενέργεια θα αποβεί πολύτιμος οδηγός για την ερμηνεία των κυματοσυναρτήσεων και την πρόβλεψη του σχήματός τους. Για παράδειγμα, ας υποθέσουμε ότι αναζητούμε την κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου δεδομένης ολικής ενέργειας και με δυναμική ενέργεια που μειώνεται καθώς το x αυξάνει, όπως στο κάτω μέρος του Σχ. 13.14. Επειδή η διαφορά $E - V = E_K$ αυξάνει από τα αριστερά προς τα δεξιά, η κυματοσυνάρτηση πρέπει να καμπυλώνεται όλο και πιο έντονα καθώς το x αυξάνει: το μήκος κύματός της ελαττώνεται καθώς μεγαλώνει η τοπική συνεισφορά της στην κινητική ενέργεια. Μπορούμε, επομένως, να υποθέσουμε ότι η κυματοσυνάρτηση θα μοιάζει με τη συνάρτηση που είναι σχεδιασμένη στο πάνω μέρος του Σχ. 13.14, κάτι που επιβεβαιώνεται και από λεπτομερέστερο υπολογισμό.

13.4 Η ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης από τον Born

Η ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης συναρτήσει της θέσης του σωματιδίου που αυτή περιγράφει βασίζεται σε μια υπόθεση που έκανε ο Max

Born. Χρησιμοποίησε μια αναλογία με την κυματική θεωρία του φωτός, σύμφωνα με την οποία το τετράγωνο του πλάτους ενός ηλεκτρομαγνητικού κύματος σε μια περιοχή ερμηνεύεται ως ένταση του κύματος και συνεπώς (στη γλώσσα της κβαντικής μηχανικής) ως ένα μέτρο της πιθανότητας να βρεθεί ένα φωτόνιο σε αυτή την περιοχή. Η κατά Born ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης συνίσταται στο ότι το τετράγωνο της κυματοσυνάρτησης (ή το γινόμενο $\psi^*\psi$ αν η ψ είναι μιγαδική) σε ένα δεδομένο σημείο είναι ανάλογο με την πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στο σημείο αυτό. Συγκεκριμένα, για ένα μονοδιάστατο σύστημα (Σχ. 13.15):



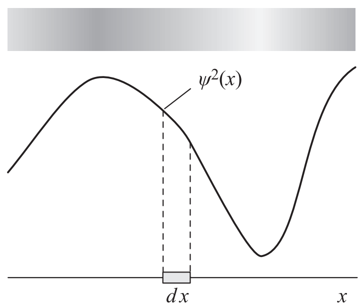
Σχ. 13.14: Η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου που βρίσκεται σε δυναμικό που ελαττώνεται με σταθερό ρυθμό προς τα δεξιά, άρα υπόκειται σε μια σταθερή δύναμη προς τα δεξιά. Απεικονίζεται μόνο το πραγματικό μέρος της κυματοσυνάρτησης: το φανταστικό μέρος της είναι παρόμοιο, αλλά μετατοπισμένο προς τα δεξιά.

Αν το πλάτος της κυματοσυνάρτησης ενός σωματιδίου σε κάποιο σημείο x είναι ψ, τότε η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο μεταξύ x και $x + dx$ είναι ανάλογη του $\psi^*\psi dx$.

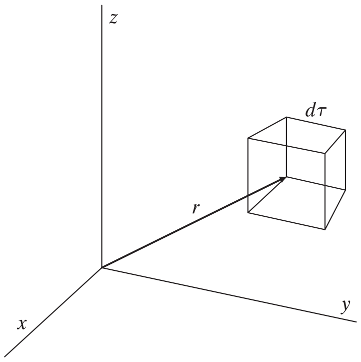
Έτσι το γινόμενο $\psi^*\psi$ αποτελεί μια **πυκνότητα πιθανότητας** (επειδή πρέπει να πολλαπλασιαστεί με το μήκος dx του απειροστού διαστήματος για να προκύψει η πιθανότητα). Η κυματοσυνάρτηση ψ καθ' εαυτή καλείται **πλάτος πιθανότητας**. Για ένα σωματίδιο, ελεύθερο να κινείται στις τρεις διαστάσεις (π.χ. ένα ηλεκτρόνιο κοντά στον πυρήνα σε ένα άτομο), η κυματοσυνάρτηση εξαρτάται από το σημείο $\boldsymbol{r}$ με συντεταγμένες x, y, z και η ερμηνεία της $\psi(\boldsymbol{r})$ είναι τότε (Σχ. 13.16):

Αν το πλάτος της κυματοσυνάρτησης ενός σωματιδίου σε κάποιο σημείο $\boldsymbol{r}$ είναι ψ, τότε η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο μέσα σε έναν απειροστό όγκο $d\tau = dxdydz$ περί το σημείο $\boldsymbol{r}$ είναι ανάλογη του $\psi^*\psi d\tau$.

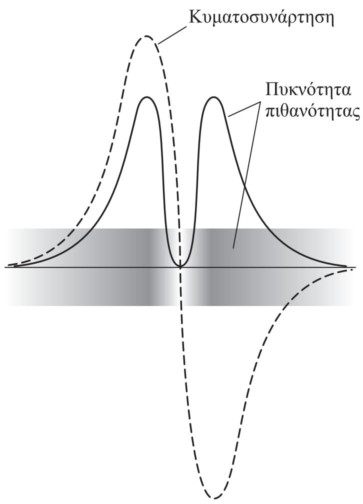
Η ερμηνεία του Born μάς απαλλάσσει από κάθε δυσκολία απόδοσης νοήματος σε μια *αρνητική* (και γενικά μιγαδική) τιμή της ψ: η τιμή του γινομένου $\psi^*\psi$, το οποίο συχνά γράφεται $|\psi|^2$ και καλείται *τετράγωνο του μέτρου* της ψ, είναι πραγματική και ποτέ αρνητική. Η αρνητική τιμή μιας κυματοσυνάρτησης δεν έχει κανένα άμεσο νόημα. Για παράδειγμα, το πρόσημο της κυματοσυνάρτησης δεν έχει καμία απολύτως σχέση με το ηλεκτρικό φορτίο του σωματιδίου. Ομοίως, μια αρνητική τιμή της κυματοσυνάρτησης δεν υποδηλώνει καθ' οιονδήποτε τρόπο ότι ένα σωματίδιο απουσιάζει από μια περιοχή: μόνο το τετράγωνο του μέτρου της ψ, που είναι πάντα μια θετική ποσότητα, έχει άμεσο φυσικό νόημα. Μια κυματοσυνάρτηση είναι, συνεπώς, τελείως διαφορετική από ένα υδάτινο κύμα, όπου η αρνητική απομάκρυνση αντιστοιχεί σε πτώση της στάθμης του νερού και η θετική απομάκρυνση σε ανύψωση της στάθμης του νερού: τόσο περιοχές αρνητικού όσο και περιοχές θετικού προσήμου μιας κυματοσυνάρτησης μπορεί να αντιστοιχούν σε μεγάλη πιθανότητα εύρεσης ενός σωματιδίου εκεί (Σχ. 13.17), αφού μόνο το τετράγωνο του μέτρου της ψ έχει φυσικό νόημα. Ωστόσο, αργότερα θα δούμε ότι η παρουσία περιοχών θετικού και αρνητικού προσήμου μιας κυματοσυνάρτησης έχει *εμμέσως* μεγάλη σπουδαιότητα, γιατί δίνει τη δυνατότητα ενισχυτικής και αναιρετικής συμβολής μεταξύ κυματοσυναρτήσεων που ανήκουν σε διαφορετικά άτομα.



Σχ. 13.15: Η ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης. Η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο σε σημεία πάνω στον άξονα x παριστάνεται από την πυκνότητα σκίασης στο πάνω μισό του διαγράμματος. Αυτή η πυκνότητα καθορίζεται από το τετράγωνο της κυματοσυνάρτησης σε κάθε σημείο.



Σχ. 13.16: Στον τριδιάστατο χώρο, η ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης από τον Born συνεπάγεται ότι η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο μέσα στο στοιχείο όγκου $d\tau = dx\,dy\,dz$ σε κάποια θέση $\boldsymbol{r}$ είναι ανάλογη με το γινόμενο του $d\tau$ και της τιμής του $\psi^*\psi$ σε αυτή τη θέση.



Σχ. 13.17: Το πρόσημο της κυματοσυνάρτησης δεν έχει κανένα άμεσο φυσικό νόημα: τόσο περιοχές θετικού όσο και αρνητικού προσήμου αντιστοιχούν στην ίδια κατανομή πιθανότητας (όπως αυτή δίνεται από το τετράγωνο της ψ και απεικονίζεται από την σκίαση).

Παράδειγμα 13.3

Ερμηνεία μιας κυματοσυνάρτησης

Η κυματοσυνάρτηση ενός ηλεκτρονίου που βρίσκεται στη χαμηλότερη ενεργειακή στάθμη ενός ατόμου υδρογόνου είναι $\psi = Ne^{-r/a_0}$, όπου N μια σταθερά, $a_0 = 52{,}9\,\text{pm}$, και r η απόσταση από τον πυρήνα. (Παρατηρήστε ότι αυτή η κυματοσυνάρτηση εξαρτάται μόνο από αυτή την απόσταση, όχι από τη γωνιακή θέση.) Υπολογίστε τις σχετικές πιθανότητες να εντοπιστεί το ηλεκτρόνιο μέσα σε μικρό όγκο μεγέθους $1{,}0\,\text{pm}^3$ ο οποίος βρίσκεται (α) στον πυρήνα, (β) σε απόσταση a_0 από τον πυρήνα. Ο συνολικός όγκος ενός ατόμου υδρογόνου είναι της τάξης των $10^7\,\text{pm}^3$.

- *Μέθοδος.* Η πιθανότητα ισούται με το γινόμενο $\psi^2 d\tau$, υπολογισμένο στην εν λόγω θέση. Ο όγκος $1{,}0\,\text{pm}^3$ είναι τόσο μικρός (ακόμα και σε ατομική κλίμακα), που μπορούμε να αγνοήσουμε τη μεταβολή της ψ μέσα σε αυτόν και να γράψουμε ότι η πιθανότητα ισούται με το γινόμενο της πυκνότητας πιθανότητας (ψ^2), υπολογισμένης στο σημείο που μας ενδιαφέρει, και του συγκεκριμένου όγκου V. Δηλαδή, κάνουμε την εξής προσέγγιση

$$\text{Πιθανότητα} = \int_{\text{Όγκος}} \psi^2 d\tau \approx \psi^2 \int_{\text{Όγκος}} d\tau = \psi^2 V.$$

- *Απάντηση.* Και στις δύο περιπτώσεις $V = 1{,}0\,\text{pm}^3$. (α) Στον πυρήνα $r = 0$, έτσι εκεί $\psi^2 = 1{,}0 \times N^2$ και

$$\text{Πιθανότητα} = (1{,}0 \times N^2) \times 1{,}0\,\text{pm}^3.$$

(β) Σε απόσταση $r = a_0$ και σε τυχαία κατεύθυνση

$$\psi^2 = N^2 e^{-2} = 0{,}14 \times N^2$$

και

$$\text{Πιθανότητα} = (0{,}14 \times N^2) \times 1{,}0\,\text{pm}^3.$$

Επομένως, ο λόγος των δύο πιθανοτήτων είναι $1{,}0/0{,}14 = 7{,}4$.

- *Σχόλιο.* Σημειώστε ότι είναι πιθανότερο (κατά έναν παράγοντα 7,4) να εντοπιστεί το ηλεκτρόνιο σε στοιχείο όγκου που βρίσκεται στον πυρήνα, παρά στο ίδιο στοιχείο όγκου όταν αυτό βρίσκεται σε απόσταση a_0 από τον πυρήνα.
- *Άσκηση.* Η κυματοσυνάρτηση που αντιστοιχεί στο τροχιακό χαμηλότερης ενέργειας του ιόντος He^+ είναι $\psi = Ne^{-2r/a_0}$. Επαναλάβετε τον προηγούμενο υπολογισμό για αυτό το ιόν. Σχολιάστε το αποτέλεσμα.

[55, η κυματοσυνάρτηση είναι πιο έντονα εντοπισμένη γύρω από τον πυρήνα]

13.4(α) Κανονικοποίηση

Μία μαθηματική ιδιότητα της εξίσωσης του Schrödinger είναι ότι, αν η ψ αποτελεί μια λύση της, ισχύει το ίδιο και για τη $N\psi$, όπου N μια οποιαδήποτε σταθερά. Αυτή η ιδιότητα επιβεβαιώνεται από την παρατήρηση ότι η ψ εμφανίζεται σε κάθε όρο της Εξ. (13.10), έτσι ώστε οποιοσδήποτε σταθερός παράγοντας να μπορεί να απαλειφθεί. Αυτή η ελευθερία να μεταβάλλουμε την κυματοσυνάρτηση κατά έναν σταθερό παράγοντα δηλώνει ότι είναι πάντοτε δυνατόν να βρούμε μια *σταθερά κανονικοποίησης*, τέτοια ώστε η αναλογία που αναφέρει η ερμηνεία του Born να μετατρέπεται σε ισότητα.

Βρίσκουμε τη σταθερά κανονικοποίησης σημειώνοντας ότι, για μια κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση $N\psi$, η πιθανότητα ένα σωματίδιο να βρίσκεται στο διάστημα dx είναι ίση με $(N\psi^*)(N\psi)dx$. Επιπλέον, το άθροισμα αυτών των επιμέρους πιθανοτήτων πάνω σε όλο το χώρο πρέπει να ισούται με 1 (η πιθανότητα το σωματίδιο να βρίσκεται κάπου μέσα στο σύστημα είναι 1). Η παραπάνω απαίτηση εκφράζεται μαθηματικά ως εξής:

$$N^2 \int \psi^* \psi dx = 1, \tag{13.12}$$

όπου η ολοκλήρωση γίνεται πάνω σε όλο το χώρο που είναι διαθέσιμος στο σωματίδιο. Έπεται ότι η σταθερά που κανονικοποιεί μια οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση ψ είναι

$$N = \frac{1}{\left(\int \psi^* \psi dx\right)^{\frac{1}{2}}}. \tag{13.13}$$

Επομένως, υπολογίζοντας το ολοκλήρωμα, μπορούμε να βρούμε την τιμή τής N. Από εδώ και στο εξής, εκτός και αν δηλώνεται κάτι διαφορετικό, θα χρησιμοποιούμε πάντοτε κυματοσυναρτήσεις που έχουν κανονικοποιηθεί στο 1, θα θεωρούμε δηλαδή ότι η ψ εμπεριέχει ήδη έναν παράγοντα που διασφαλίζει ότι

$$\int \psi^* \psi dx = 1.$$

Στις τρεις διαστάσεις, η κυματοσυνάρτηση κανονικοποιείται αν

$$\int \psi^* \psi dx\, dy\, dz = 1$$

ή πιο περιληπτικά, αν

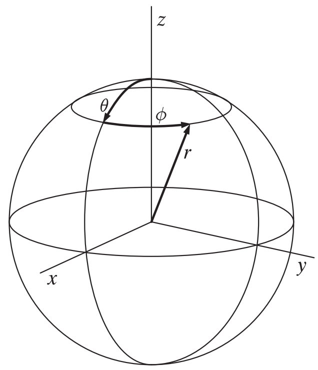
$$\int \psi^* \psi d\tau = 1 \tag{13.14}$$

όπου $d\tau = dx\, dy\, dz$. Για κάθε τέτοιο ολοκλήρωμα, η ολοκλήρωση γίνεται πάνω σε όλο το χώρο. Για συστήματα με σφαιρική συμμετρία, καλύτερο είναι να δουλεύουμε σε σφαιρικές συντεταγμένες (Σχ. 13.18). Σε αυτές τις συντεταγμένες,

$$x = r\sin\theta\cos\phi \quad \psi = r\sin\theta\sin\phi \quad z = r\cos\theta, \tag{13.15}$$

$$d\tau = r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi. \tag{13.16}$$

Για να καλύψουμε όλο το χώρο, η ακτίνα r κυμαίνεται από 0 έως ∞, η πολική γωνία θ από 0 έως π, και η αζιμούθια γωνία ϕ από 0 έως 2π.



Σχ. 13.18: Σφαιρικές συντεταγμένες. Η ακτίνα r κυμαίνεται από 0 έως ∞, η πολική γωνία θ από 0 (βόρειος πόλος) έως π (νότιος πόλος) και η αζιμούθια γωνία ϕ κυμαίνεται από 0 έως 2π.

Παράδειγμα 13.4

Κανονικοποίηση μιας κυματοσυνάρτησης

Κανονικοποιήστε την κυματοσυνάρτηση που χρησιμοποιήθηκε για το άτομο του υδρογόνου στο Παράδειγμα 13.3.

- *Μέθοδος*. Πρέπει να βρούμε τον παράγοντα N που εγγυάται ότι το ολοκλήρωμα στην Εξ. (13.14) είναι ίσο με 1. Επειδή η κυματοσυνάρτηση είναι σφαιρικά συμμετρική, είναι λογικό να δουλέψουμε σε σφαιρικές συντεταγμένες.
- *Απάντηση*. Η ολοκλήρωση που απαιτείται είναι

$$\int \psi^* \psi \, d\tau = N^2 \left(\int_0^\infty r^2 e^{-2r/a_0} dr \right) \left(\int_0^\pi \sin\theta d\theta \right) \left(\int_0^{2\pi} d\phi \right)$$
$$= N^2 \times \frac{a_0^3}{4} \times 2 \times 2\pi = \pi a_0^3 N^2.$$

Συνεπώς, προκειμένου το ολοκλήρωμα να είναι ίσο με 1,

$$N = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{\frac{1}{2}},$$

και η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση είναι

$$\psi = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-r/a_0}.$$

- *Σχόλιο*. Εάν τώρα επαναλάβουμε το Παράδειγμα 13.3, είμαστε σε θέση να υπολογίσουμε τις πραγματικές πιθανότητες να εντοπιστεί το ηλεκτρόνιο μέσα στο στοιχείο όγκου, σε καθεμιά από τις δύο θέσεις και όχι μόνο τις σχετικές τους τιμές. Τα αποτελέσματα είναι (α) $2{,}2 \times 10^{-6}$, που αντιστοιχεί σε 1 επιτυχία στις 500.000 περίπου δοκιμές εύρεσης του ηλεκτρονίου στον όγκο που εξετάζεται, και (β) $3{,}1 \times 10^{-7}$, που αντιστοιχεί σε 1 επιτυχία στις 3 εκατομμύρια δοκιμές.
- *Άσκηση*. Κανονικοποιήστε την κυματοσυνάρτηση που δίνεται στην Άσκηση του Παραδείγματος 13.3.

[$N = (8/\pi a_0^3)^{\frac{1}{2}}$]

Πρέπει τέλος να σημειωθεί ότι οι διαστάσεις μιας κανονικοποιημένης κυματοσυνάρτησης είναι $1/(\text{μήκος})^{n/2}$, όπου n ο αριθμός των φυσικών διαστάσεων. Έτσι, σε μία διάσταση, $n = 1$ και μια κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση έχει διαστάσεις $1/(\text{μήκος})^{\frac{1}{2}}$. Για ένα τριδιάστατο σύστημα οι διαστάσεις της είναι $1/(\text{μήκος})^{\frac{3}{2}}$.

13.4(β) Κβάντωση

Η ερμηνεία του Born θέτει αυστηρούς περιορισμούς για το ποιες κυματοσυναρτήσεις μπορούν να γίνουν αποδεκτές. Η κύρια δέσμευση είναι ότι η ψ δεν πρέπει να απειρίζεται πουθενά.[2] Αν απειριζόταν, τότε το ολοκλήρωμα στην Εξ. (13.14) θα ήταν άπειρο και η σταθερά κανονικοποίησης μηδέν. Η κανονικοποιημένη συνάρτηση θα ήταν μηδέν παντού, εκτός από εκεί όπου απειρίζεται, πράγμα απορριπτέο. Η απαίτηση η ψ να είναι πεπερασμένη παντού αποκλείει πολλές δυνατές λύσεις της εξίσωσης του Schrödinger, επειδή αρκετές μαθηματικά αποδεκτές λύσεις απειρίζονται. Σύντομα θα δούμε παραδείγματα.

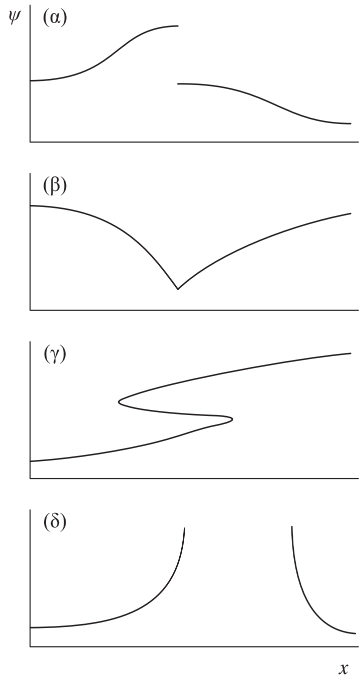
Η απαίτηση η ψ να είναι πεπερασμένη παντού δεν είναι ο μόνος περιορισμός που συνεπάγεται από την ερμηνεία του Born. Θα μπορούσαμε να φανταστούμε (και σύντομα θα συναντήσουμε) μια συνάρτηση

[2] Απείρως οξείες κορυφές είναι αποδεκτές, υπό τον όρο ότι έχουν μηδενικό εύρος. Η πραγματική δέσμευση είναι ότι η κυματοσυνάρτηση δεν πρέπει να απειρίζεται σε οποιοδήποτε πεπερασμένο διάστημα. Σε επίπεδο στοιχειώδους κβαντικής μηχανικής ο απλούστερος περιορισμός, η ψ να είναι πεπερασμένη, είναι επαρκής.

που να επιτρέπει στο $\psi^*\psi$ να λαμβάνει παραπάνω από μία τιμές σε ένα σημείο. Η ερμηνεία του Born συνεπάγεται ότι τέτοιες συναρτήσεις δεν μπορούν να γίνουν αποδεκτές, γιατί θα ήταν παράλογο να έχουμε σε κάποιο σημείο περισσότερες από μία πιθανότητες εύρεσης ενός σωματιδίου. Αυτός ο περιορισμός εκφράζεται με το να δηλώσουμε ότι η κυματοσυνάρτηση πρέπει να είναι **μονότιμη**, δηλαδή να λαμβάνει μία μόνο τιμή σε κάθε σημείο του χώρου.

Η εξίσωση του Schrödinger καθ' εαυτή συνεπάγεται επίσης κάποιους μαθηματικούς περιορισμούς για τον τύπο των συναρτήσεων που θα προκύψουν. Επειδή είναι μια δεύτερης τάξης διαφορική εξίσωση, η δεύτερη παράγωγος της ψ πρέπει να είναι καλά ορισμένη, προκειμένου η εξίσωση να εφαρμόζεται παντού. Μπορούμε να εξαγάγουμε τη δεύτερη παράγωγο μιας συνάρτησης μόνο αν αυτή είναι συνεχής (έτσι δεν μεταβάλλεται κατά απότομα βήματα, Σχ. 13.19) και αν η πρώτη παράγωγός της, η κλίση της, είναι συνεχής (δεν υπάρχουν δηλαδή αιχμές).[3] Συνεπώς, οι κυματοσυναρτήσεις πρέπει (α) να είναι συνεχείς, (β) να έχουν συνεχείς πρώτες παραγώγους.

Βλέπουμε λοιπόν ότι η ψ πρέπει να είναι συνεχής, να έχει συνεχή κλίση, να είναι μονότιμη και πεπερασμένη παντού. Μια αποδεκτή κυματοσυνάρτηση δεν μπορεί να είναι παντού μηδέν, αφού το σωματίδιο που περιγράφει πρέπει κάπου να βρίσκεται. Αυτοί οι περιορισμοί είναι τόσο αυστηροί ώστε γενικά να μην υπάρχουν αποδεκτές λύσεις της εξίσωσης του Schrödinger για αυθαίρετες τιμές της ενέργειας E. Με άλλα λόγια, *η ενέργεια ενός σωματιδίου μπορεί να λαμβάνει μόνο συγκεκριμένες τιμές*, διότι διαφορετικά η κυματοσυνάρτησή του δεν θα ήταν φυσικά αποδεκτή. Δηλαδή, *η ενέργεια ενός σωματιδίου είναι κβαντωμένη*. Μπορούμε να βρούμε τις αποδεκτές τιμές ενέργειας λύνοντας την εξίσωση του Schrödinger για διάφορα είδη κινήσεων, και επιλέγοντας τις λύσεις που συνάδουν με τους περιορισμούς που παραθέσαμε παραπάνω. Αυτό ακριβώς θα κάνουμε στο επόμενο κεφάλαιο.



Σχ. 13.19: Η κυματοσυνάρτηση πρέπει να πληροί αυστηρούς όρους για να είναι αποδεκτή. (α) Μη αποδεκτή επειδή είναι ασυνεχής, (β) μη αποδεκτή επειδή η κλίση της είναι ασυνεχής, (γ) μη αποδεκτή επειδή δεν είναι μονότιμη, (δ) μη αποδεκτή επειδή απειρίζεται μέσα σε μια πεπερασμένη περιοχή.

13.4(γ) Περίληψη

Είναι μάλλον χρήσιμο να έχουμε την ακόλουθη περίληψη αυτών στα οποία έχουμε μέχρι στιγμής καταλήξει. Κατ' αρχάς, η κλασική μηχανική, στην οποία η κεντρική έννοια είναι η τροχιά του σωματιδίου, αποτυγχάνει παταγωδώς όταν εφαρμόζεται σε σώματα τόσο μικρά όσο τα άτομα και τα υποατομικά σωματίδια. Πρέπει επομένως να αντικατασταθεί από την κβαντική μηχανική, στην οποία η κεντρική έννοια είναι η κυματοσυνάρτηση. Η κυματοσυνάρτηση εμπεριέχει όλες τις πληροφορίες που αφορούν το σύστημα και μας επιτρέπει να προβλέψουμε την πιθανότητα να βρεθεί ένα σωματίδιο σε κάποια θέση. Ενώ οι εξισώσεις του Νεύτωνα για την κίνηση αποτελούν τη βάση της κλασικής μηχανικής και χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της τροχιάς ενός σωματιδίου, η κβαντική μηχανική βασίζεται στην εξίσωση του Schrödinger, που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της κυματοσυνάρτησης. Αν και οι μαθηματικά αποδεκτές λύσεις της εξίσωσης του Schrödinger είναι άπειρες το πλήθος, η ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης από τον Born συνεπάγεται ότι φυσικά αποδεκτές λύσεις της εξίσωσης

[3] Υπάρχουν περιπτώσεις, τις οποίες και θα συναντήσουμε, όπου αποδεκτές κυματοσυναρτήσεις έχουν αιχμές. Αυτές οι περιπτώσεις εμφανίζονται όταν η δυναμική ενέργεια έχει ασυνήθιστες ιδιότητες, όπως το να απειρίζεται απότομα. Όταν η δυναμική ενέργεια συμπεριφέρεται ομαλά και είναι πεπερασμένη, η κλίση της κυματοσυνάρτησης πρέπει να είναι συνεχής (αν η δυναμική ενέργεια απειρίζεται, τότε η κλίση της κυματοσυνάρτησης δεν είναι απαραίτητο να είναι συνεχής).

υφίστανται μόνο για συγκεκριμένες τιμές της ενέργειας. Δηλαδή, οι περιορισμοί που επιβάλλονται στην κυματοσυνάρτηση οδηγούν αυτομάτως στην κβάντωση της ενέργειας.

ΑΡΧΕΣ ΤΗΣ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ

Μπορούμε τώρα να εισαγάγουμε κάποιες από τις κύριες έννοιες της κβαντικής μηχανικής εξετάζοντας ένα ελεύθερο σωματίδιο σε μία διάσταση. Για ένα σωματίδιο μάζας m, ελεύθερο να κινείται παράλληλα προς τον άξονα x, με δυναμική ενέργεια μηδέν ($V = 0$ παντού, έτσι η ενέργεια του σωματιδίου είναι ανεξάρτητη της θέσης του) η εξίσωση του Schrödinger είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi.$$

Οι λύσεις της εξίσωσης αυτής έχουν τη μορφή

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \qquad E = \frac{k^2\hbar^2}{2m}, \tag{13.17}$$

όπου τα A και B είναι σταθερές.[4] Επειδή η ολική ενέργεια του σωματιδίου ταυτίζεται με την κινητική του ενέργεια, $p^2/2m$, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι η σταθερά k μας δίνει επίσης το μέτρο της ορμής μέσω της σχέσης

$$p = k\hbar. \tag{13.18}$$

Ένα από τα ερωτήματα που πρέπει τώρα να μας απασχολήσει είναι τι σημαίνουν οι συντελεστές A και B. Στην απάντηση αυτού του ερωτήματος θα οδηγηθούμε διατυπώνοντας την κβαντική μηχανική με έναν πιο γενικό τρόπο απ' ό,τι την έχουμε παρουσιάσει ως τώρα, έναν τρόπο που μας παρέχει επιπλέον τη δυνατότητα υπολογισμού φυσικών μεγεθών στα πλαίσια της κβαντικής μηχανικής.

13.5 Τελεστές και παρατηρήσιμα μεγέθη

Η εξίσωση του Schrödinger (Εξ. 13.10) μπορεί να ξαναγραφεί στη συνοπτική μορφή

$$H\psi = E\psi, \tag{13.19α}$$

με

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x). \tag{13.19β}$$

[4] Μια χρήσιμη μαθηματική σχέση είναι η

$$e^{ikx} = \cos kx + i\sin kx.$$

Έπεται ότι ένας εναλλακτικός τρόπος γραφής των λύσεων στην Εξ. (13.17) είναι

$$\psi = C\cos kx + D\sin kx,$$

όπου C και D σταθερές.

Η ποσότητα H είναι ένας *τελεστής*, ένα αντικείμενο δηλαδή που εκτελεί μια πράξη πάνω στη συνάρτηση ψ. Σε αυτή την περίπτωση η πράξη συνίσταται στο να πάρουμε τη δεύτερη παράγωγο της ψ και (μετά από πολλαπλασιασμό με $-\hbar^2/2m$) να προσθέσουμε το αποτέλεσμα στο γινόμενο που προκύπτει από τον πολλαπλασιασμό τής ψ με το V. Ο τελεστής H παίζει έναν ιδιαίτερο ρόλο στην κβαντική μηχανική και καλείται **τελεστής της χαμιλτονιανής** προς τιμήν του μαθηματικού William Hamilton, που έζησε τον 19ο αιώνα. Ο Hamilton ανέπτυξε έναν εναλλακτικό φορμαλισμό της κλασικής μηχανικής, ο οποίος, όπως αποδείχθηκε μεταγενέστερα, θα μπορούσε εύκολα να μετατραπεί σε φορμαλισμό της κβαντικής μηχανικής, γεγονός που δείχνει πολύ καθαρά τη σχέση μεταξύ των δύο θεωριών.

13.5(α) Ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις

Όταν η εξίσωση του Schrödinger γράφεται όπως στην Εξ. (13.19α), δείχνει να έχει τη μορφή μιας **εξίσωσης ιδιοτιμών**, μιας εξίσωσης δηλαδή της μορφής

(Τελεστής)(συνάρτηση) = (σταθερός παράγοντας) × (ίδια συνάρτηση)

Συμβολίζοντας τη συνάρτηση με f, τον τελεστή με $\widehat{\Omega}$ και τον σταθερό παράγοντα με ω έχουμε

$$\widehat{\Omega} f = \omega f. \tag{13.20}$$

Ο παράγοντας ω ονομάζεται **ιδιοτιμή** του τελεστή $\widehat{\Omega}$. Στην Εξ. (13.19α) η ιδιοτιμή είναι η ενέργεια. Η συνάρτηση f (η οποία πρέπει να είναι η ίδια και στα δύο μέλη της εξίσωσης ιδιοτιμών) καλείται **ιδιοσυνάρτηση** και είναι διαφορετική για κάθε ιδιοτιμή. Στην Εξ. (13.19α), η ιδιοσυνάρτηση είναι η κυματοσυνάρτηση που αντιστοιχεί στην ενέργεια E.

Παράδειγμα 13.5

Αναγνώριση μιας ιδιοσυνάρτησης

Δείξτε ότι η e^{ax} είναι μια ιδιοσυνάρτηση του τελεστή d/dx και βρείτε την αντίστοιχη ιδιοτιμή. Δείξτε ότι η e^{ax^2} δεν είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή d/dx.

- *Μέθοδος.* Πρέπει να δράσουμε πάνω στη συνάρτηση με τον τελεστή και να ελέγξουμε εάν το αποτέλεσμα είναι ένας σταθερός παράγοντας επί την αρχική συνάρτηση.
- *Απάντηση.* Για $\widehat{\Omega} = d/dx$ και $f = e^{ax}$ είναι:

  $$\widehat{\Omega} f = \frac{de^{ax}}{dx} = ae^{ax} = af.$$

  Επομένως, η e^{ax} είναι μια ιδιοσυνάρτηση του d/dx και η ιδιοτιμή του είναι a. Για $f = e^{ax^2}$,

  $$\widehat{\Omega} f = \frac{d}{dx} e^{ax^2} = 2ax \times f,$$

  η οποία δεν είναι μια εξίσωση ιδιοτιμών παρόλο που στο αποτέλεσμα εμφανίζεται η ίδια συνάρτηση f, επειδή η f πολλαπλασιάζεται με έναν μεταβλητό και όχι σταθερό παράγοντα (τον $2ax$).
- *Σχόλιο.* Η κβαντική μηχανική, κατά ένα μεγάλο μέρος της, ασχολείται με την αναζήτηση ιδιοσυναρτήσεων ενός δεδομένου κάθε φορά τελεστή, ειδικά του τελεστή της χαμιλτονιανής που αντιστοιχεί στην ενέργεια.

- *Άσκηση*. Αποτελεί η συνάρτηση $\cos ax$ ιδιοσυνάρτηση του (α) d/dx, (β) d^2/dx^2;

[(α) Όχι, (β) Ναι]

Η σπουδαιότητα των εξισώσεων ιδιοτιμών έγκειται στο ότι το πρότυπο

(Τελεστής της ενέργειας)(κυματοσυνάρτηση) =
(ενέργεια) × (κυματοσυνάρτηση),

το οποίο ουσιαστικά παριστά την εξίσωση του Schrödinger, επαναλαμβάνεται και για άλλα *παρατηρήσιμα μεγέθη* ή μετρήσιμες ιδιότητες ενός συστήματος. Έτσι, αρκετές είναι οι περιπτώσεις που μπορούμε να γράψουμε

(Τελεστής ενός παρατηρήσιμου μεγέθους)(κυματοσυνάρτηση) =
(τιμή του μεγέθους)×(κυματοσυνάρτηση).

Το σύμβολο $\widehat{\Omega}$ στην Εξ. (13.20) ερμηνεύεται τότε ως ένας τελεστής (π.χ. αυτός της χαμιλτονιανής), που αντιστοιχεί σε ένα παρατηρήσιμο μέγεθος (π.χ. στην ενέργεια) και η ιδιοτιμή ω είναι η τιμή αυτού του μεγέθους (π.χ. η τιμή της ενέργειας E). Έστω, λοιπόν, ότι γνωρίζουμε τόσο την κυματοσυνάρτηση ψ όσο και τον τελεστή $\widehat{\Omega}$, που αντιστοιχεί στο παρατηρήσιμο μέγεθος Ω το οποίο μας ενδιαφέρει, και η κυματοσυνάρτηση είναι μια ιδιοσυνάρτηση του τελεστή $\widehat{\Omega}$. Τότε μπορούμε να προβλέψουμε το αποτέλεσμα μιας μέτρησης του φυσικού μεγέθους Ω (π.χ. της ενέργειας ενός ατόμου) απομονώνοντας τον παράγοντα ω από την εξίσωση ιδιοτιμών

$$\widehat{\Omega}\psi = \omega\psi.$$

Σύντομα θα δούμε σε ποιο βαθμό μπορεί να προβλεφθεί η τιμή ενός παρατηρήσιμου μεγέθους, όταν η κυματοσυνάρτηση του συστήματος δεν είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή $\widehat{\Omega}$.

13.5(β) Τελεστές

Το πρώτο βήμα, ωστόσο, είναι να συγκεκριμενοποιήσουμε τη διαδικασία εύρεσης ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων, εισάγοντας και κάνοντας χρήση του τελεστή που αντιστοιχεί σε ένα δεδομένο παρατηρήσιμο μέγεθος. Σύμφωνα με τα βασικά αξιώματα της κβαντικής μηχανικής (Παράρτημα Β), η μορφή του τελεστή της ορμής στη διεύθυνση x είναι

$$\widehat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}. \qquad (13.21)$$

Δηλαδή, για να βρούμε την ορμή ενός σωματιδίου στη διεύθυνση x από την εξίσωση ιδιοτιμών

$$\widehat{p}\psi = p\psi,$$

παραγωγίζουμε την κυματοσυνάρτηση ως προς x και μετά απομονώνουμε την ορμή p από την εξίσωση ιδιοτιμών

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx} = p\psi.$$

Ομοίως, ο τελεστής της θέσης κατά μήκος του άξονα x συνίσταται στον πολλαπλασιασμό με τη συντεταγμένη x:

$$\widehat{x} = x\times. \tag{13.22}$$

Αυτή η έκφραση δικαιολογείται επίσης στο Παράρτημα Β.

Ας υποθέσουμε τώρα ότι $B = 0$ στην κυματοσυνάρτηση ενός ελεύθερου σωματιδίου, Εξ. (13.17). Τότε

$$\psi = Ae^{ikx}.$$

Η εξίσωση για την εύρεση της γραμμικής ορμής ενός σωματιδίου με αυτή την κυματοσυνάρτηση είναι

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx} = \frac{\hbar}{i}A\frac{de^{ikx}}{dx} = \frac{\hbar}{i}A \times ike^{ikx} = \hbar kAe^{ikx} = k\hbar\psi.$$

Έτσι, $p = k\hbar$, όπως ήδη γνωρίζαμε. Ωστόσο τώρα, ας υποθέσουμε ότι αντί για το B μηδενίζεται το A στην κυματοσυνάρτηση, έτσι ώστε

$$\psi = Be^{-ikx}.$$

Τότε, με την ίδια συλλογιστική, $p = -k\hbar$. Κατά συνέπεια, ένα σωματίδιο που περιγράφεται από τη δεύτερη κυματοσυνάρτηση έχει το ίδιο μέτρο ορμής (και την ίδια κινητική ενέργεια) με αυτή της προηγούμενης περίπτωσης, αλλά κινείται προς την κατεύθυνση $-x$.

Σε αυτό το στάδιο μπορούμε να συνοψίσουμε τα κύρια χαρακτηριστικά, στα οποία έχουμε καταλήξει, ως εξής:

(1) Για να εξαγάγετε από μια κυματοσυνάρτηση την τιμή ενός παρατηρήσιμου μεγέθους, δράστε πάνω στην κυματοσυνάρτηση με τον τελεστή που αντιστοιχεί στο εν λόγω μέγεθος. Αν το αποτέλεσμα επαληθεύει μια εξίσωση ιδιοτιμών, τότε η ζητούμενη τιμή είναι η ιδιοτιμή του τελεστή.

(2) Η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου που κινείται προς την κατεύθυνση $+x$ είναι ανάλογη του e^{ikx} και η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου που κινείται προς την κατεύθυνση $-x$ είναι ανάλογη του e^{-ikx}. Και στις δύο περιπτώσεις το μέτρο της ορμής του σωματιδίου είναι $k\hbar$.

13.6 Υπέρθεση και αναμενόμενες τιμές

Ας υποθέσουμε τώρα ότι $A = B$ στην κυματοσυνάρτηση της Εξ. (13.17). Ποια είναι η ορμή του σωματιδίου που αυτή περιγράφει; Εάν χρησιμοποιήσουμε την τεχνική των τελεστών, γρήγορα θα αντιμετωπίσουμε δυσκολίες. Η κυματοσυνάρτηση είναι

$$\psi = A(e^{ikx} + e^{-ikx}) = 2A\cos kx,$$

(βλ. υποσημ. 4) η οποία είναι μια καθ' όλα αποδεκτή κυματοσυνάρτηση τύπου κύματος. Εντούτοις, όταν δράσουμε με τον τελεστή p, βρίσκουμε

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx} = \frac{2A\hbar}{i}\frac{d(\cos kx)}{dx} = -\frac{2kA\hbar}{i}\sin kx,$$

η οποία δεν είναι μια εξίσωση ιδιοτιμών, επειδή η συνάρτηση στο δεξιό μέλος της εξίσωσης είναι διαφορετική από την αρχική. Στην ερμηνεία που δόθηκε παραπάνω είναι αναγκαίο να προσθέσουμε μια παρατήρηση σχετικά με το πώς ερμηνεύεται μια κυματοσυνάρτηση που δεν είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή που μας ενδιαφέρει.

13.6(α) Γραμμική υπέρθεση κυματοσυναρτήσεων

Όταν η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου δεν είναι ιδιοσυνάρτηση ενός τελεστή, το φυσικό μέγεθος στο οποίο αντιστοιχεί ο τελεστής δεν έχει μια καθορισμένη τιμή. Ωστόσο, στο τελευταίο παράδειγμα η ορμή δεν είναι εντελώς απροσδιόριστη, αφού η συνημιτονοειδής κυματοσυνάρτηση είναι μια **γραμμική υπέρθεση**, ή άθροισμα, των e^{ikx} και e^{-ikx}, και καθεμιά από αυτές, όπως έχουμε δει, αντιστοιχεί σε κατάσταση καθορισμένης ορμής. Μπορούμε να διατυπώσουμε συμβολικά τη γραμμική υπέρθεση ως εξής

$$\begin{array}{ccccc} \psi & = & \psi_{\rightarrow} & + & \psi_{\leftarrow} \\ & & \text{σωματίδιο με} & & \text{σωματίδιο με} \\ & & \text{γραμμική ορμή} & & \text{γραμμική ορμή} \\ & & +k\hbar & & -k\hbar \end{array}$$

Η ερμηνεία αυτής της σύνθετης κυματοσυνάρτησης συνίσταται στο ότι, αν η ορμή του σωματιδίου μετρηθεί επανειλημμένα μέσω μιας μακράς σειράς παρατηρήσεων, τότε το *μέτρο* της θα βρεθεί ότι είναι $k\hbar$ σε όλες τις μετρήσεις (διότι αυτή είναι η τιμή για κάθε συνιστώσα της κυματοσυνάρτησης). Ωστόσο, επειδή οι δύο συνιστώσες κυματοσυναρτήσεις συμμετέχουν εξίσου (κατά το ίδιο δηλαδή ποσοστό) στην υπέρθεση, *μισές* από τις μετρήσεις θα δείξουν ότι το σωματίδιο κινείται προς τα δεξιά και *μισές* ότι κινείται προς τα αριστερά. Σύμφωνα με την κβαντική μηχανική, δεν μπορούμε να προβλέψουμε προς ποια κατεύθυνση θα βρεθεί στην πραγματικότητα να κινείται το σωματίδιο· το μόνο που μπορούμε να πούμε είναι ότι, σε μια μακρά σειρά παρατηρήσεων, οι αντίστοιχες πιθανότητες να βρούμε το σωματίδιο να κινείται προς τα δεξιά και προς τα αριστερά είναι ίσες.

Η ίδια ερμηνεία εφαρμόζεται σε οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση γράφεται ως μια γραμμική υπέρθεση ιδιοσυναρτήσεων ενός τελεστή. Ας υποθέσουμε ότι γνωρίζουμε πως η κυματοσυνάρτηση είναι μια υπέρθεση πολλών διαφορετικών ιδιοσυναρτήσεων της ορμής και γράφεται στη μορφή

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \ldots = \sum_k c_k\psi_k, \tag{13.23}$$

όπου τα c_k είναι αριθμητικοί συντελεστές και οι ψ_k αντιστοιχούν σε διαφορετικές καταστάσεις ορμής. Τότε σύμφωνα με την κβαντική μηχανική,

(1) Όταν μετράμε την ορμή, σε κάθε παρατήρηση θα βρίσκουμε μία από τις τιμές που αντιστοιχούν στις ψ_k, οι οποίες συνεισφέρουν στην υπέρθεση.

(2) Δεν μπορούμε να προβλέψουμε ποια από αυτές τις πιθανές τιμές θα βρεθεί σε μια μέτρηση. Ωστόσο, η πιθανότητα να μετρηθεί μια συγκεκριμένη τιμή σε μια σειρά παρατηρήσεων είναι ανάλογη με το τετράγωνο του μέτρου του συντελεστή της στην υπέρθεση, $|c_k|^2$.

(3) Η μέση τιμή για μεγάλο αριθμό παρατηρήσεων δίνεται από την αναμενόμενη τιμή $\langle \Omega \rangle$ του τελεστή $\widehat{\Omega}$.

Η **αναμενόμενη τιμή** (ή μέση τιμή) ενός τελεστή $\widehat{\Omega}$ ορίζεται ως

$$\langle \Omega \rangle = \int \psi^* \widehat{\Omega} \psi d\tau, \tag{13.24}$$

Ο τύπος αυτός ισχύει μόνο για κανονικοποιημένες κυματοσυναρτήσεις.

ΑΙΤΙΟΛΟΓΗΣΗ

Αν ψ είναι μια ιδιοσυνάρτηση του τελεστή $\widehat{\Omega}$ με ιδιοτιμή ω, η αναμενόμενη τιμή είναι

$$\langle \Omega \rangle = \int \psi^* \widehat{\Omega} \psi d\tau = \int \psi^* \omega \psi d\tau = \omega \int \psi^* \psi d\tau = \omega,$$

αφού το ω είναι μια σταθερά που μπορεί να βγει έξω από το ολοκλήρωμα το οποίο με τη σειρά του είναι ίσο με 1 για μια κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση. Η ερμηνεία αυτής της έκφρασης συνίσταται στο ότι, επειδή από κάθε παρατήρηση του φυσικού μεγέθους Ω προκύπτει ως αποτέλεσμα η τιμή ω (αφού η κυματοσυνάρτηση είναι μια ιδιοσυνάρτηση του τελεστή $\widehat{\Omega}$), η μέση τιμή όλων των παρατηρήσεων είναι επίσης ω.

Αν η ψ δεν είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή που μας ενδιαφέρει, θα μπορεί να γραφτεί ως μια γραμμική υπέρθεση ιδιοσυναρτήσεων του εν λόγω τελεστή. Χάριν απλότητας, ας υποθέσουμε ότι η ψ είναι το άθροισμα δύο ιδιοσυναρτήσεων (η γενική περίπτωση, Εξ. (13.23), μπορεί εύκολα να αναπτυχθεί). Τότε

$$\begin{aligned}
\langle \Omega \rangle &= \int (c_1\psi_1 + c_2\psi_2)^* \widehat{\Omega} (c_1\psi_1 + c_2\psi_2) d\tau \\
&= \int (c_1\psi_1 + c_2\psi_2)^* (c_1\omega_1\psi_1 + c_2\omega_2\psi_2) d\tau \\
&= c_1^* c_1 \omega_1 \int \psi_1^* \psi_1 d\tau + c_2^* c_2 \omega_2 \int \psi_2^* \psi_2 d\tau \\
&\quad + c_1^* c_2 \omega_2 \int \psi_1^* \psi_2 d\tau + c_2^* c_1 \omega_1 \int \psi_2^* \psi_1 d\tau \\
&= |c_1|^2 \omega_1 + |c_2|^2 \omega_2.
\end{aligned}$$

Στο τελευταίο βήμα κάναμε χρήση του γεγονότος ότι καθεμιά από τις κυματοσυναρτήσεις είναι κανονικοποιημένη (έτσι τα ολοκληρώματα των τετραγώνων τους είναι το καθένα ίσο με 1) και ότι το ολοκλήρωμα του γινομένου κυματοσυναρτήσεων που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές είναι μηδέν. Το τελευταίο γενικό αποτέλεσμα αποδεικνύεται στο Παράρτημα Β. Η έκφραση στην οποία έχουμε καταλήξει, δηλαδή ότι

$$\langle \Omega \rangle = |c_1|^2 \omega_1 + |c_2|^2 \omega_2,$$

δείχνει ότι η αναμενόμενη τιμή είναι το άθροισμα των δύο ιδιοτιμών με συντελεστή βάρους για καθεμιά την πιθανότητα να βρεθεί αυτή η ιδιοτιμή σε μια σειρά μετρήσεων. Έτσι, η αναμενόμενη τιμή είναι η μέση τιμή μιας σειράς παρατηρήσεων.

Παράδειγμα 13.6

Υπολογισμός μιας αναμενόμενης τιμής

Υπολογίστε τη μέση τιμή της απόστασης ενός ηλεκτρονίου από τον πυρήνα, στο άτομο του υδρογόνου, όταν το άτομο βρίσκεται στην κατάσταση χαμηλότερης ενέργειας.

- *Μέθοδος*. Η μέση ακτίνα ταυτίζεται με την αναμενόμενη τιμή του τελεστή που αντιστοιχεί στην απόσταση από τον πυρήνα, η δράση του οποίου συνίσταται στον πολλαπλασιασμό με r. Για να βρούμε το $\langle r \rangle$, πρέπει να γνωρίζουμε την κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση (από το Παράδειγμα 13.4) και έπειτα να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα της Εξ. (13.24). Ένα ολοκλήρωμα χρήσιμο στην περίπτωση που στους υπολογισμούς υπεισέρχονται κυματοσυναρτήσεις ατόμων είναι το

$$\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}},$$

όπου το $n!$ δηλώνει το παραγοντικό του n: $n! = n(n-1)(n-2)\ldots 1$.

- *Απάντηση*. Η μέση τιμή δίνεται από την αναμενόμενη τιμή

$$\langle r \rangle = \int \psi^* r \psi d\tau,$$

την οποία υπολογίζουμε κάνοντας χρήση σφαιρικών συντεταγμένων. Χρησιμοποιώντας την κανονικοποιημένη συνάρτηση από το Παράδειγμα 13.4 παίρνουμε

$$\begin{aligned}\langle r \rangle &= \frac{1}{\pi a_0^3} \left(\int_0^\infty r^3 e^{-2r/a_0} dr \right) \left(\int_0^\pi \sin\theta d\theta \right) \left(\int_0^{2\pi} d\phi \right) \\ &= \frac{1}{\pi a_0^3} \times \frac{3! a_0^4}{2^4} \times 2 \times 2\pi = \frac{3}{2} a_0.\end{aligned}$$

Επειδή $a_0 = 52{,}9\,\text{pm}$ (Παράδειγμα 13.3), $\langle r \rangle = 79\,\text{pm}$.

- *Σχόλιο*. Το παραπάνω αποτέλεσμα $\langle r \rangle = 79\,\text{pm}$ δηλώνει ότι, αν διεξαγάγουμε έναν πολύ μεγάλο αριθμό μετρήσεων της απόστασης του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα, τότε η μέση τιμή τους θα είναι 79 pm. Ωστόσο, κάθε διαφορετική μέτρηση θα δίνει και ένα αποτέλεσμα ανεξάρτητο από τη συγκεκριμένη σειρά των προηγούμενων αποτελεσμάτων, αφού η κυματοσυνάρτηση δεν είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή που αντιστοιχεί στο r.

- *Άσκηση*. Υπολογίστε την τετραγωνική ρίζα της μέσης τιμής του τετραγώνου της απόστασης, $\langle r^2 \rangle^{\frac{1}{2}}$, του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα, στο άτομο του υδρογόνου.

[$\sqrt{3} a_0$]

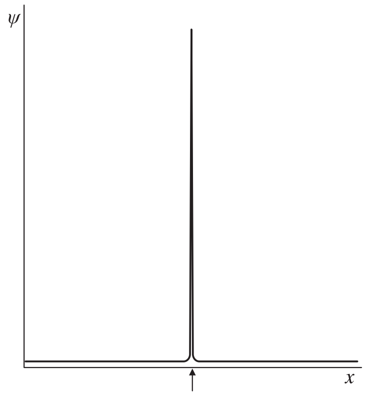
13.6(β) Η αρχή της αβεβαιότητας

Έχουμε δει ότι, αν η κυματοσυνάρτηση είναι Ae^{ikx}, τότε το σωματίδιο που περιγράφει βρίσκεται σε μια καθορισμένη κατάσταση ορμής, δηλαδή κινείται προς τα δεξιά (στον θετικό ημιάξονα x) με ορμή $k\hbar$. Θα μπορούσαμε όμως επίσης να αναζητήσουμε τη θέση του σωματιδίου, όταν αυτό βρίσκεται σε αυτή την κατάσταση. Η ερμηνεία του Born μάς υποδεικνύει να απαντήσουμε σε αυτή την ερώτηση σχηματίζοντας την πυκνότητα πιθανότητας $\psi^*\psi$. Σε αυτή την περίπτωση:

$$\psi^*\psi = (Ae^{ikx})^*(Ae^{ikx}) = A^2(e^{-ikx})(e^{ikx}) = A^2.$$

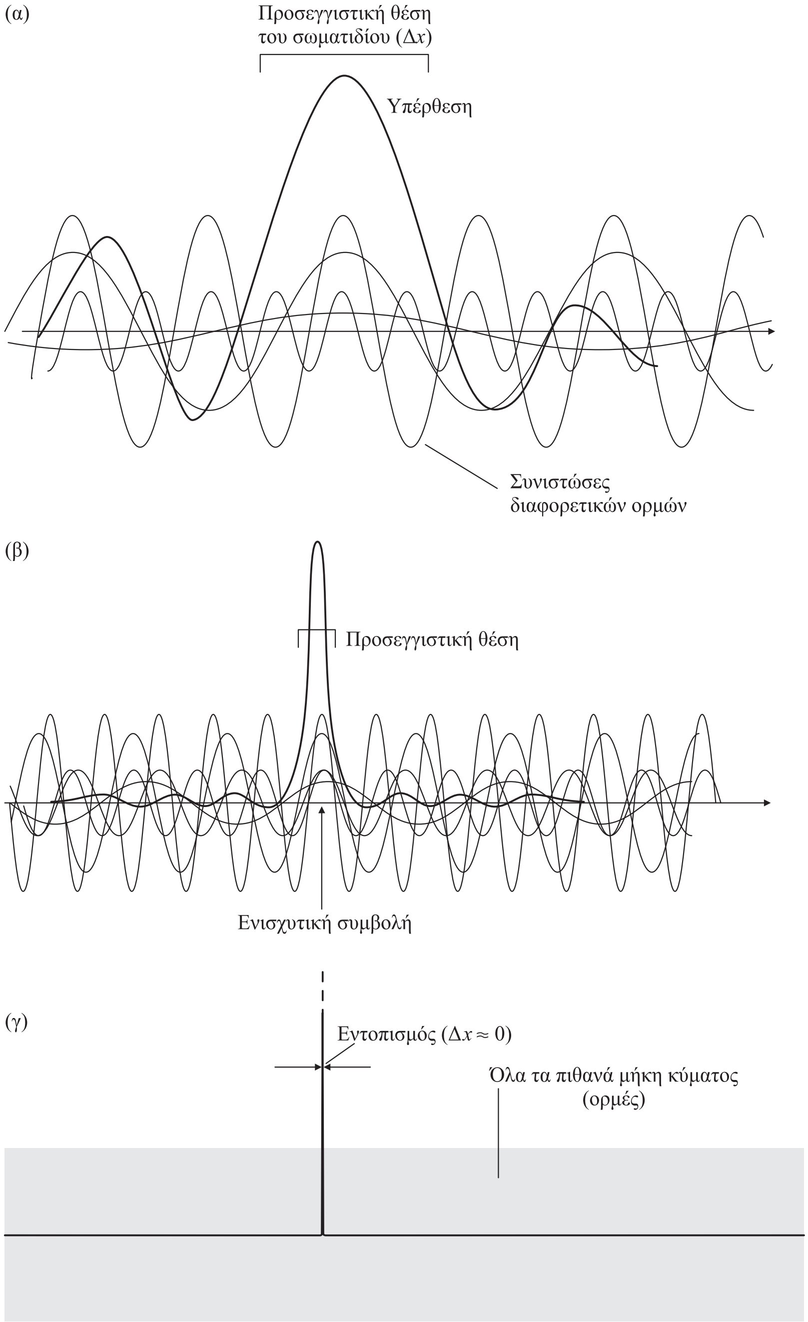
Αυτή η πυκνότητα πιθανότητας ισούται με μια σταθερά A^2, που είναι ανεξάρτητη του x. Επομένως, η πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου είναι παντού η ίδια. Με άλλα λόγια, *αν η ορμή είναι προσδιορισμένη με απόλυτη ακρίβεια, τότε είναι αδύνατον να προβλέψουμε τη θέση του σωματιδίου*. Αυτός ο ισχυρισμός αποτελεί το ένα σκέλος της **αρχής της αβεβαιότητας του Heisenberg**, ενός από τα πλέον ονομαστά πορίσματα της κβαντικής μηχανικής:

Είναι αδύνατον να προσδιορίσουμε ταυτόχρονα, με αυθαίρετη ακρίβεια, και την ορμή και τη θέση ενός σωματιδίου.



Σχ. 13.20: Η κυματοσυνάρτηση για ένα σωματίδιο που βρίσκεται σε μια απολύτως καθορισμένη θέση είναι μια έντονα αιχμηρή συνάρτηση που έχει μηδενικό πλάτος παντού εκτός από εκεί όπου βρίσκεται το σωματίδιο.

Προτού εξετάσουμε περαιτέρω την αρχή της αβεβαιότητας, πρέπει να τεκμηριώσουμε το δεύτερο σκέλος της: ότι αν η θέση ενός σωματιδίου είναι επακριβώς προσδιορισμένη, τότε δεν μπορούμε να πούμε τίποτα για την ορμή του. Το επιχείρημα αντλείται από την ιδέα τού να εκφραστεί μια κυματοσυνάρτηση ως υπέρθεση ιδοσυναρτήσεων και έχει ως εξής. Αν γνωρίζουμε ότι το σωματίδιο βρίσκεται σε μια καθορισμένη θέση, τότε η τιμή της κυματοσυνάρτησής του πρέπει να είναι μεγάλη σε αυτή τη θέση και μηδέν οπουδήποτε αλλού (Σχ. 13.20). Μια τέτοια κυματοσυνάρτηση μπορεί να παραχθεί από την πρόσθεση ενός μεγάλου αριθμού αρμονικών (ημιτονοειδών και συνημιτονοειδών) συναρτήσεων ή, πράγμα ισοδύναμο, ενός αριθμού συναρτήσεων της μορφής e^{ikx}. Με άλλα λόγια, μπορούμε να κατασκευάσουμε μια έντονα εντοπισμένη κυματοσυνάρτηση φτιάχνοντας μια γραμμική υπέρθεση κυματοσυναρτήσεων που αντιστοιχούν σε πολλές διαφορετικές τιμές της ορμής. Η υπέρθεση μερικών αρμονικών συναρτήσεων δίνει μια πλατιά, απεντοπισμένη κυματοσυνάρτηση (Σχ. 13.21α). Ωστόσο, καθώς αυξάνει ο αριθμός των κυματοσυναρτήσεων που συμμετέχουν στην υπέρθεση, η κυματοσυνάρτηση γίνεται όλο και πιο οξεία, εξ αιτίας της πληρέστερης αναιρετικής συμβολής μεταξύ των θετικών και αρνητικών περιοχών των επιμέρους κυμάτων καθώς απομακρυνόμαστε από τη θέση του μεγίστου (Σχ.13.21β). Όταν χρησιμοποιηθεί άπειρο πλήθος συνιστωσών, η κυματοσυνάρτηση γίνεται μια οξεία, απειροστού εύρους αιχμή (Σχ. 13.21γ), που αντιστοιχεί σε απόλυτο εντοπισμό του σωματιδίου. Σε αυτή την περίπτωση το σωματίδιο είναι πλήρως εντοπισμένο, με κόστος όμως την απώλεια κάθε πληροφορίας σχετικά με την ορμή του. Αυτό συμβαίνει γιατί, όπως είδαμε παραπάνω, μια μέτρηση της ορμής θα δώσει ένα αποτέλεσμα το οποίο θα αντιστοιχεί σε κάποιο από τα άπειρου πλήθους κύματα της υπέρθεσης και το ποιο θα είναι αυτό το αποτέλεσμα δεν είναι δυνατόν να προβλεφθεί. Έτσι, αν γνωρίζουμε τη θέση του σωματιδίου με απόλυτη ακρίβεια, τότε η ορμή του είναι απολύτως μη προβλέψιμη.



Σχ. 13.21: (α) Η κυματοσυνάρτηση για ένα ασθενώς εντοπισμένο σωματίδιο μπορεί να θεωρηθεί ως το άθροισμα (υπέρθεση) αρκετών κυματοσυναρτήσεων καθορισμένου μήκους κύματος που συμβάλλουν ενισχυτικά σε κάποια περιοχή, αλλά αναιρετικά οπουδήποτε αλλού. (β) Όσο περισσότερα κύματα χρησιμοποιούνται στην υπέρθεση, ο εντοπισμός γίνεται ακριβέστερος με κόστος την αύξηση της αβεβαιότητας ορμής του σωματιδίου. (γ) Άπειρο πλήθος κυμάτων απαιτείται για την κατασκευή της κυματοσυνάρτησης ενός απόλυτα εντοπισμένου σωματιδίου.

Μπορούμε να έχουμε μια ποσοτική διατύπωση αυτού του αποτελέσματος, λαμβάνοντας υπ' όψιν τις αναμενόμενες τιμές της θέσης και της ορμής:

$$\Delta p \Delta q \geq \frac{1}{2}\hbar. \tag{13.25}$$

Σε αυτή την έκφραση το Δp είναι η αβεβαιότητα της ορμής (αυστηρά μιλώντας, είναι η τυπική απόκλιση της ορμής από τη μέση τιμή της) παράλληλα στον άξονα q, και Δq είναι η αβεβαιότητα θέσης κατά μήκος αυτού του άξονα (η τυπική απόκλιση της θέσης από τη μέση τιμή της, ουσιαστικά το εύρος της υπέρθεσης στο Σχ. 13.21). Αν υπάρχει απόλυτη βεβαιότητα για τη θέση του σωματιδίου ($\Delta q = 0$), τότε η Εξ. (13.25) μπορεί να ικανοποιείται μόνο στην περίπτωση όπου $\Delta p = \infty$, το οποίο συνεπάγεται πλήρη αβεβαιότητα ορμής. Αντίστροφα, αν η ορμή είναι γνωστή με απόλυτη ακρίβεια ($\Delta p = 0$), τότε η αβεβαιότητα θέσης πρέπει να είναι πλήρης ($\Delta q = \infty$).

Τα p και q που εμφανίζονται στην Εξ. (13.25) αναφέρονται στην ίδια διεύθυνση στο χώρο. Επομένως, ενώ η θέση στον άξονα x και η ορμή που είναι παράλληλη προς τον ίδιο άξονα δεσμεύονται από την αρχή της αβεβαιότητας, αυτή δεν αποκλείει τον ταυτόχρονο προσδιορισμό της θέσης στον x και της συνιστώσας της ορμής στον άξονα y ή z.

Παράδειγμα 13.7

Χρήση της αρχής της αβεβαιότητας

Η ταχύτητα ενός βλήματος μάζας 1,0 g είναι γνωστή με ακρίβεια $1\times10^{-6}\,\mathrm{m\,s^{-1}}$. Υπολογίστε την ελάχιστη αβεβαιότητα της θέσης του.

- *Μέθοδος*. Υπολογίστε το Δp από το γινόμενο $m\Delta v$, όπου Δv η αβεβαιότητα ταχύτητας· χρησιμοποιήστε μετά την Εξ. (13.25) για να υπολογίσετε την ελάχιστη αβεβαιότητα θέσης Δq.
- *Απάντηση*. Η ελάχιστη αβεβαιότητα θέσης είναι

$$\begin{aligned}\Delta q &= \frac{\hbar}{2m\Delta v}\\ &= \frac{1{,}055\times10^{-34}\,\mathrm{J\,s}}{2\times(1{,}0\times10^{-3}\,\mathrm{kg})\times(1\times10^{-6}\,\mathrm{m\,s^{-1}})}\\ &= 5\times10^{-26}\,\mathrm{m}.\end{aligned}$$

- *Σχόλιο*. Η αβεβαιότητα μπορεί στην πράξη να αγνοηθεί εντελώς σε ό,τι αφορά μακροσκοπικά αντικείμενα. Εντούτοις, αν η μάζα ισούται με αυτή του ηλεκτρονίου, τότε η ίδια αβεβαιότητα ταχύτητας συνεπάγεται μια αβεβαιότητα θέσης μεγαλύτερη κατά πολύ από τη διάμετρο ενός ατόμου (έτσι η έννοια της τροχιάς, το να έχει δηλαδή ένα σωματίδιο ταυτόχρονα μια συγκεκριμένη θέση και ορμή, είναι αβάσιμη).
- *Άσκηση*. Υπολογίστε την ελάχιστη αβεβαιότητα ταχύτητας για ένα ηλεκτρόνιο στο άτομο του υδρογόνου (θεωρώντας τη διάμετρο του ατόμου ίση με $2a_0$).

[$500\,\mathrm{km\,s^{-1}}$]

Η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg εφαρμόζεται σε έναν αριθμό από ζεύγη παρατηρήσιμων μεγεθών τα οποία καλούνται **συμπληρωματικά μεγέθη** και προσδιορίζονται συναρτήσει των ιδιοτήτων

των τελεστών τους.[5] Εκτός από τη θέση και την ορμή κατά μήκος του ίδιου άξονα, συμπληρωματικά μεγέθη είναι επίσης εκείνα που σχετίζονται με τη στροφορμή (την οποία θα συναντήσουμε στο επόμενο κεφάλαιο). Ανακαλύπτοντας ότι κάποια ζεύγη παρατηρήσιμων μεγεθών είναι συμπληρωματικά βρισκόμαστε στο καίριο σημείο όπου διαφοροποιούνται η κλασική και η κβαντική μηχανική. Η κλασική μηχανική υπέθετε, λανθασμένα όπως πλέον γνωρίζουμε, ότι η θέση και η ορμή ενός σωματιδίου μπορούν να προσδιοριστούν ταυτόχρονα με αυθαίρετη ακρίβεια. Αντίθετα, η κβαντική μηχανική δείχνει ότι θέση και ορμή συνιστούν συμπληρωματικά μεγέθη και ότι πρέπει να επιλέξουμε: μπορούμε να προσδιορίσουμε τη θέση εις βάρος της ορμής ή την ορμή εις βάρος της θέσης.

Η διαπίστωση ότι κάποια παρατηρήσιμα μεγέθη είναι συμπληρωματικά μάς επιτρέπει να σημειώσουμε σημαντική πρόοδο στον υπολογισμό ατομικών και μοριακών ιδιοτήτων (αλλά καταργεί κάποιες από τις πιο αγαπητές έννοιες της κλασικής φυσικής).

Για περαιτέρω μελέτη

Συγγράμματα και πηγές δεδομένων

Quanta: a handbook of concepts. P.W. Atkins, Oxford University Press, 1991.

Molecular quantum mechanics. P.W. Atkins, Oxford University Press, 1983.

Modern atomic physics: fundamental principles. B. Cagnac and J.C. Pebay-Peyroula, MacMillan, London, 1975.

Black-body theory and the quantum discontinuity 1894-1912. T.S. Kuhn, Oxford University Press, 1978.

The conceptual development of quantum mechanics. M. Jammer, McGraw-Hill, New York, 1966.

The history of quantum theory. F. Hund, Harrap & Co, London, 1974.

Uncertainty: The life and science of Werner Heisenberg. D.C. Cassidy, W.H. Freeman & Co, New York, 1992.

Niels Bohr's times: in physics, philosophy, and polity. A. Pais, Clarendon Press, Oxford, 1991.

Schrödinger: life and thought. W.J. Moore, Cambridge University Press, 1989.

[5] Συγκεκριμένα, δύο παρατηρήσιμα μεγέθη Ω_1 και Ω_2 είναι συμπληρωματικά αν οι τελεστές τους ικανοποιούν τη σχέση

$$\widehat{\Omega}_1\widehat{\Omega}_2 \neq \widehat{\Omega}_2\widehat{\Omega}_1$$

Έτσι, η θέση x και η ορμή στον άξονα x είναι συμπληρωματικά μεγέθη επειδή (σημειώνοντας ότι οι τελεστές δρουν πάντοτε πάνω σε μια κυματοσυνάρτηση)

$$\widehat{xp}\psi = x \times \frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx}$$

ενώ

$$\widehat{px}\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{d(x\psi)}{dx} = \frac{\hbar}{i}\psi + x \times \frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx}$$

που δεν ταυτίζεται με το παραπάνω.

Εισαγωγικά προβλήματα

A13.1. Υπολογίστε την ισχύ που ακτινοβολείται από ένα τμήμα, διαστάσεων 2,0 m × 3,0 m, της επιφάνειας ενός σώματος που βρίσκεται σε θερμοκρασία 1500 K.

A13.2. Η ισχύς που αποδίδεται σε έναν φωτοανιχνευτή, που συλλέγει $8{,}0 \times 10^7$ φωτόνια μονοχρωματικής ακτινοβολίας σε 3,8 ms, είναι 0,72 μW. Ποια είναι η συχνότητα αυτής της ακτινοβολίας;

A13.3. Καθορίστε το μήκος κύματος που αντιστοιχεί στο μέγιστο της έντασης της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας που εκπέμπεται από την επιφάνεια του αστέρα Σείριου, με θερμοκρασία επιφάνειας 11000 K.

A13.4. Υπολογίστε την ταχύτητα ενός ηλεκτρονίου μήκους κύματος 3,0 cm.

A13.5. Η σταθερά της λεπτής υφής α παίζει ιδιαίτερο ρόλο στη μελέτη της δομής της ύλης· η τιμή της είναι κατά προσέγγιση 1/137. Ποια είναι η ταχύτητα ενός ηλεκτρονίου που κινείται με ταχύτητα αc, όπου c η ταχύτητα του φωτός; (Σημειώστε ότι η περίμετρος της πρώτης τροχιάς του Bohr στο άτομο του υδρογόνου είναι 332 pm).

A13.6. Σε ένα συγκεκριμένο πείραμα περίθλασης απαιτείται η χρήση ηλεκτρονίων μήκους κύματος 0,45 nm. Υπολογίστε την ταχύτητα των ηλεκτρονίων.

A13.7. Υπολογίστε την ορμή φωτονίων μήκους κύματος 750 nm. Ποια πρέπει να είναι η ταχύτητα ενός ηλεκτρονίου ώστε να έχει την ίδια ορμή με τα παραπάνω φωτόνια;

A13.8. Η ενέργεια που απαιτείται για τον ιονισμό ενός συγκεκριμένου ατόμου είναι $3{,}44 \times 10^{-18}$ J. Με απορρόφηση ενός φωτονίου αγνώστου μήκους κύματος, το άτομο ιονίζεται και αποβάλλει ένα ηλεκτρόνιο με ταχύτητα $1{,}03 \times 10^6$ m s^{-1}. Υπολογίστε το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας.

A13.9. Η ταχύτητα ενός πρωτονίου είναι $4{,}5 \times 10^5$ m s^{-1}. Αν η αβεβαιότητα ορμής του πρόκειται να περιοριστεί στο 0,0100 τοις εκατό της ορμής του, ποια η ελάχιστη δυνατή αβεβαιότητα θέσης του;

A13.10. Υπολογίστε την ενέργεια ανά φωτόνιο και την ενέργεια ανά mol φωτονίων για ακτινοβολία μήκους κύματος (α) 600 nm (κόκκινο), (β) 550 nm (κίτρινο), (γ) 400 nm (μπλε), (δ) 200 nm (υπεριώδες), (ε) 150 pm (ακτίνες X), (στ) 1 cm (μικροκύματα).

A13.11. Υπολογίστε την ταχύτητα μέχρι την οποία θα επιταχυνόταν ένα ακίνητο άτομο H, αν απορροφούσε καθένα από τα φωτόνια του προβλήματος A13.10.

A13.12. Μια πυγολαμπίδα μάζας 5,0 g εκπέμπει κόκκινο φως (650 nm) με ισχύ 0,10 W, με κατεύθυνση αποκλειστικά προς τα πίσω. Μέχρι ποια ταχύτητα θα έχει επιταχυνθεί μετά από 10 χρόνια, αν κινείται ελεύθερα στο χώρο και υποτεθεί ότι ζει μέχρι τότε;

A13.13. Μια λυχνία νατρίου εκπέμπει κίτρινο φως (550 nm). Πόσα φωτόνια εκπέμπει κάθε δευτερόλεπτο, αν η ισχύς της είναι (α) 1,0 W, (β) 100 W;

A13.14. Το μέγιστο της ενεργειακής κατανομής της ακτινοβολίας του ήλιου εμφανίζεται περίπου στα 480 nm· εκτιμήστε τη θερμοκρασία της επιφάνειάς του.

A13.15. Το έργο εξαγωγής για το μεταλλικό καίσιο είναι 2,14 eV. Υπολογίστε την κινητική ενέργεια και την ταχύτητα των ηλεκτρονίων που αποσπώνται ως αποτέλεσμα της πρόσπτωσης φωτεινής ακτινοβολίας μήκους κύματος (α) 700 nm, (β) 300 nm.

A13.16. Υπολογίστε το μέγεθος του κβάντου ενέργειας που σχετίζεται με τη διέγερση (α) ενός ηλεκτρονίου σε κίνηση με περίοδο 10^{-15} s, (β) ενός μορίου σε ταλάντωση με περίοδο 10^{-14} s, (γ) ενός εκκρεμούς σε ταλάντωση με περίοδο 1 s. Εκφράστε τα αποτελέσματα σε J και σε kJ mol^{-1}.

A13.17. Υπολογίστε το μήκος κύματος de Broglie (α) μιας μάζας 1,0 g που κινείται με ταχύτητα 1,0 cm s^{-1}, (β) της ίδιας μάζας όταν αυτή κινείται με ταχύτητα 100 km s^{-1}, (γ) ενός ατόμου He που κινείται με ταχύτητα 1000 m s^{-1} (μια τυπική ταχύτητα σε θερμοκρασία δωματίου).

A13.18. Υπολογίστε το μήκος κύματος de Broglie ενός ηλεκτρονίου που επιταχύνεται από την κατάσταση ηρεμίας μέσω μιας διαφοράς δυναμικού (α) 100 V, (β) 100 kV.

A13.19. Υπολογίστε την ελάχιστη αβεβαιότητα ταχύτητας μιας μπάλας μάζας 500 g, για την οποία γνωρίζουμε ότι βρίσκεται εντός 1,0 μm από ένα συγκεκριμένο σημείο ενός ροπάλου. Ποια είναι η ελάχιστη αβεβαιότητα θέσης μιας σφαίρας 5,0 g για την οποία γνωρίζουμε ότι έχει ταχύτητα μεταξύ των 350,00001 και 350,00000 m s^{-1};

A13.20. Ένα ηλεκτρόνιο περιορίζεται σε μια μονοδιάστατη περιοχή με μήκος της ίδιας τάξης μεγέθους με τη διάμετρο ενός ατόμου (δηλαδή 100 pm). Υπολογίστε τις ελάχιστες αβεβαιότητες ορμής και ταχύτητάς του.

A13.21. Σε ένα πείραμα φωτοηλεκτρονίων με ακτίνες X, ένα φωτόνιο μήκους κύματος 150 pm αποσπά από τους εσώτερους φλοιούς ενός ατόμου ένα ηλεκτρόνιο, το οποίο εμφανίζεται με ταχύτητα $2{,}14 \times 10^7$ m s^{-1}. Υπολογίστε την ενέργεια σύνδεσης του ηλεκτρονίου.

Προβλήματα

Αριθμητικά προβλήματα

13.1. Η κατανομή του Planck δίνει την ενέργεια για μήκη κύματος μεταξύ λ και $\lambda + d\lambda$. Υπολογίστε την ενεργειακή πυκνότητα στο εσωτερικό μιας κοιλότητας όγκου 100 cm^3 για περιοχή μήκους κύματος 650 – 655 nm, όταν η θερμοκρασία της κοιλότητας είναι (α) 25 °C, (β) 3000 °C.

13.2. Το μήκος κύματος μέγιστης εκπομπής από μια μικρή οπή ενός ηλεκτρικά θερμαινόμενου δοχείου προσδιορίστηκε για μια σειρά θερμοκρασιών και τα αποτελέσματα δίνονται παρακάτω. Να εξαγάγετε μια τιμή για τη σταθερά του Planck.

$\theta/°C$	1000	1500	2000	2500	3000	3500
λ_{max}/nm	2181	1600	1240	1035	878	763

13.3. Γράψτε ένα πρόγραμμα για ηλεκτρονικό υπολογιστή που να υπολογίζει την τιμή της κατανομής του

Planck σε κάθε θερμοκρασία και για κάθε μήκος κύματος ή συχνότητα. Προσθέστε σε αυτό μια ρουτίνα για τον υπολογισμό των ολοκληρωμάτων της ενεργειακής πυκνότητας ακτινοβολίας μεταξύ δύο οποιωνδήποτε τιμών μήκους κύματος. Χρησιμοποιήστε την για να υπολογίσετε την πυκνότητα ολικής ενέργειας στην περιοχή του ορατού (600 nm έως 350 nm) για ένα μέλαν σώμα στους (α) 100 °C, (β) 500 °C, (γ) 700 K. Ποιες είναι οι τιμές που προβλέπει η κλασική φυσική για αυτές τις θερμοκρασίες;

13.4. Η συχνότητα Einstein εκφράζεται συχνά συναρτήσει μιας ισοδύναμης θερμοκρασίας θ_E, όπου $\theta_\mathrm{E} = h\nu/k$. Επιβεβαιώστε ότι η θ_E έχει διαστάσεις θερμοκρασίας και εκφράστε συναρτήσει της θ_E το κριτήριο που αν ικανοποιείται ισχύει η μορφή που παίρνει ο τύπος του Einstein για υψηλές θερμοκρασίες. Υπολογίστε τη θ_E για (α) το διαμάντι, για το οποίο $\nu = 4{,}56 \times 10^{13}$ Hz και (β) για το χαλκό, για τον οποίο $\nu = 7{,}15 \times 10^{12}$ Hz. Ποιο είναι το κλάσμα της τιμής της θερμοχωρητικότητας στους 25 °C προς την αντίστοιχη τιμή που προβλέπει ο νόμος των Dulong και Petit για καθεμιά ουσία;

13.5. Η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους κατάστασης ενός σωματιδίου που είναι περιορισμένο σε ένα μονοδιάστατο κουτί μήκους L είναι

$$\psi = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right).$$

Υποθέστε ότι το μήκος του κουτιού είναι 10,0 nm. Υπολογίστε την πιθανότητα το σωματίδιο να βρίσκεται (α) μεταξύ $x = 4{,}95$ nm και 5,05 nm, (β) μεταξύ $x = 1{,}95$ nm και 2,05 nm, (γ) μεταξύ $x = 9{,}90$ nm και 10,00 nm, (δ) στο δεξί μισό του κουτιού, (ε) στο μεσαίο από τα τρία ίσα μέρη στα οποία μπορεί να διαιρεθεί το κουτί.

13.6. Η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους κατάστασης ενός ατόμου του υδρογόνου είναι

$$\psi = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} e^{-r/a_0},$$

όπου $a_0 = 53$ pm (η ακτίνα του Bohr). Υπολογίστε την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο μέσα σε μια μικρή σφαίρα με ακτίνα 1,0 pm και κέντρο τον πυρήνα. Υποθέστε τώρα ότι η ίδια σφαίρα μεταφέρεται σε απόσταση $r = a_0$. Ποια είναι η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο εντός της σφαίρας;

13.7. Γράψτε ένα πρόγραμμα για ηλεκτρονικό υπολογιστή που να κατασκευάζει υπερθέσεις συνημιτονοειδών συναρτήσεων, όπως αυτές του Σχ. 13.21, και διερευνήστε με ποιο τρόπο η κυματοσυνάρτηση που περιγράφεται από μια τέτοια υπέρθεση γίνεται περισσότερο εντοπισμένη, όσο περισσότερες είναι οι συναρτήσεις που λαμβάνονται υπ' όψιν. Συμπεριλάβετε ρουτίνες που να προσδιορίζουν την πιθανότητα να παρατηρηθεί μια δεδομένη ορμή. Αν σχεδιάσετε την υπέρθεση (όπως και θα έπρεπε), τοποθετήστε το σημείο $x = 0$ στο κέντρο της οθόνης και κατασκευάστε εκεί την υπέρθεση. Συμπεριλάβετε μια ρουτίνα που να υπολογίζει την τυπική απόκλιση της θέσης του κυματοπακέτου, $\langle x^2\rangle^{1/2}$.

Θεωρητικά Προβλήματα

13.8. Να συναγάγετε το νόμο του Wien, ότι το γινόμενο $\lambda_{\max}T$ ισούται με μια σταθερά, από την κατανομή του Planck και να δώσετε μια έκφραση για αυτή τη σταθερά.

13.9. Κανονικοποιήστε τις ακόλουθες κυματοσυναρτήσεις: (α) $\sin(n\pi x/L)$, στην περιοχή $0 \le x \le L$, (β) σταθερή, στην περιοχή $-L \le x \le L$, (γ) $e^{-r/a}$ στον τριδιάστατο χώρο, (δ) $xe^{-r/2a}$ στον τριδιάστατο χώρο. *Υπόδειξη*: Το στοιχείο όγκου στις τρεις διαστάσεις είναι $d\tau = r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\phi$, με $0 \le r \le \infty$, $0 \le \theta \le \pi$, $0 \le \phi \le 2\pi$. Ένα χρήσιμο ολοκλήρωμα δίνεται στο Παράδειγμα 13.6.

13.10. Δύο κυματοσυναρτήσεις (μη κανονικοποιημένες) διεγερμένων καταστάσεων του ατόμου H είναι

$$(\alpha)\ \psi = \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$

$$(\beta)\ \psi = r \sin\theta \cos\theta\, e^{-r/2a_0}$$

Κανονικοποιήστε τις δύο συναρτήσεις στο 1.

13.11. Αναγνωρίστε ποιες από τις ακόλουθες συναρτήσεις είναι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή d/dx: (α) e^{ikx}, (β) $\cos kx$, (γ) k, (δ) kx, (ε) e^{-ax^2}. Δώστε την αντίστοιχη ιδιοτιμή εκεί όπου αρμόζει.

13.12. Καθορίστε ποιες από τις ακόλουθες συναρτήσεις είναι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή αντιστροφής $\hat{\imath}$ (του οποίου η δράση έχει ως αποτέλεσμα την αντικατάσταση $x \to -x$): (α) $x^3 - kx$, (β) $\cos kx$, (γ) $x^2 + 3x - 1$. Δηλώστε την ιδιοτιμή του $\hat{\imath}$ στην περίπτωση ιδιοσυνάρτησης.

13.13. Ποιες από τις συναρτήσεις του Προβλήματος 13.11 είναι (α) επίσης ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή d^2/dx^2 και (β) ιδιοσυναρτήσεις μόνο του d^2/dx^2; Δώστε τις ιδιοτιμές εκεί όπου αρμόζει.

13.14. Ένα σωματίδιο βρίσκεται σε μια κατάσταση που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση

$$\psi = (\cos\chi)e^{ikx} + (\sin\chi)e^{-ikx}$$

όπου χ είναι μια παράμετρος. Ποια η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο με (γραμμική) ορμή (α) $+k\hbar$, (β) $-k\hbar$; Ποια μορφή θα είχε η κυματοσυνάρτηση αν ήταν κατά 90 τοις εκατό βέβαιο ότι το σωματίδιο θα είχε ορμή $+k\hbar$;

13.15. Υπολογίστε την κινητική ενέργεια του σωματιδίου με κυματοσυνάρτηση αυτή που δίνεται στο Πρόβλημα 13.14.

13.16. Υπολογίστε τη μέση ορμή ενός σωματιδίου που περιγράφεται από τις ακόλουθες κυματοσυναρτήσεις: (α) e^{ikx}, (β) $\cos kx$, (γ) $e^{-\alpha x^2}$, όπου για καθεμιά το x κυμαίνεται από $-\infty$ έως $+\infty$.

13.17. Υπολογίστε τις αναμενόμενες τιμές των r και r^2 σε ένα άτομο υδρογόνου για καθεμιά από τις κυματοσυναρτήσεις που δίνονται στο Πρόβλημα 13.10.

13.18. Υπολογίστε (α) τη μέση δυναμική ενέργεια και (β) τη μέση κινητική ενέργεια ενός ηλεκτρονίου που βρίσκεται στη θεμελιώδη κατάσταση ενός υδρογονοειδούς ατόμου.

13.19. Προσδιορίστε την τιμή του $\widehat{\Omega}_1\widehat{\Omega}_2 - \widehat{\Omega}_2\widehat{\Omega}_1$ για τους τελεστές (α) d/dx και x, (β) d/dx και x^2, (γ) a και $a^\dagger$ όπου $a = (\widehat{x} + i\widehat{p})/\sqrt{2}$ και $a^\dagger = (\widehat{x} - i\widehat{p})/\sqrt{2}$.