



Κβαντική Θεωρία της Ύλης

Διδάσκων: Λευτέρης Λοιδωρικής
Π1, 7146, elidorik@cc.uoi.gr
cmsl.materials.uoi.gr/elidorik

Ύλικά κύματα

Τα όρια της θεωρίας Bohr

- Η θεωρία Bohr εξήγησε τα φάσματα των ατόμων, αλλά είχε περιορισμούς:
 - δεν προέβλεπε τις εντάσεις των φασματικών γραμμών
 - δεν προέβλεπε αρκετά καλά τα φάσματα πολυηλεκτρονικών ατόμων
 - δεν έδινε καμιά εξίσωση για χρονική εξέλιξη ατομικών συστημάτων
 - δεν έδινε ένα γενικό σχήμα «κβάντωσης» και για άλλα συστήματα
- Υπερτόνιζε την σωματιδιακή φύση της ύλης
 - δεν ερμήνευε τον κυματοσωματιδιακό διίσμο του φωτός
- Εάν το φως έχει δυτή φύση, μήπως έχει και η ύλη;

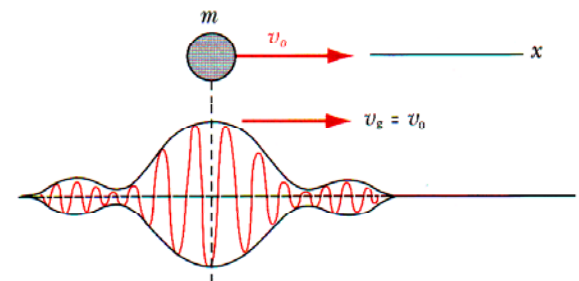
Οδηγούντα κύματα de Broglie

- Louis de Broglie (1923)
 - «όλες οι μορφές της ύλης έχουν και σωματιδιακές και κυματικές ιδιότητες»

- Δανειζόμενος σχέσεις απο τα φωτόνια

$$\left. \begin{aligned} hf &= E \\ E &= pc \end{aligned} \right\} \frac{hc}{\lambda} = pc \Rightarrow \lambda = \frac{h}{p} \quad \text{το μήκος κύματος του οδηγούμενου κύματος}$$

- όπου η ορμή του σωματιδίου: $p = m v$





Κβάντωση στροφορμής

- Στο μοντέλο Bohr η στροφορμή είναι κβαντισμένη

$$mvr = n\hbar$$

- Αυτό προκύπτει και από την θεωρία de Broglie:

- οι ατομικές τροχιές είναι κβαντισμένες έτσι ώστε τα οδηγούμενα κύματα των ηλεκτρονίων να σχηματίζουν στάσιμα κύματα

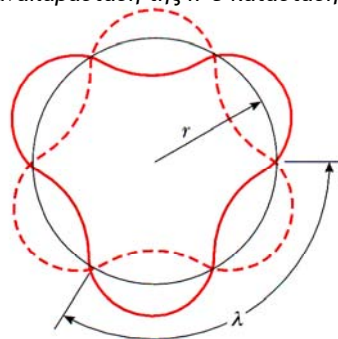
- στάσιμα κύματα \Rightarrow ακέραιος αριθμός μηκών κύματος de Broglie χωρούν στην τροχιά

$$2\pi r = n\lambda \Rightarrow 2\pi r = n \frac{h}{p} \Rightarrow mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

$$\Rightarrow mvr = n\hbar$$

- Η ιδέα της κβάντωσης τροχιών δεν είναι πολύ διαφορετική από αυτή μιας παλλόμενης χορδής

αναπαράσταση της n=3 κατάστασης



Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ύλικά Κύματα



Παράδειγμα 4.2

- Υπολογίστε το μήκος κύματος de Broglie για ηλεκτρόνιο που επιταχύνεται σε διαφορά δυναμικού 50 V.

- κινητική ενέργεια ηλεκτρονίου

$$\frac{1}{2}mv^2 = eV$$

- ορμή ηλεκτρονίου

$$mv = \sqrt{2meV}$$

- μήκος κύματος de Broglie

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meV}}$$

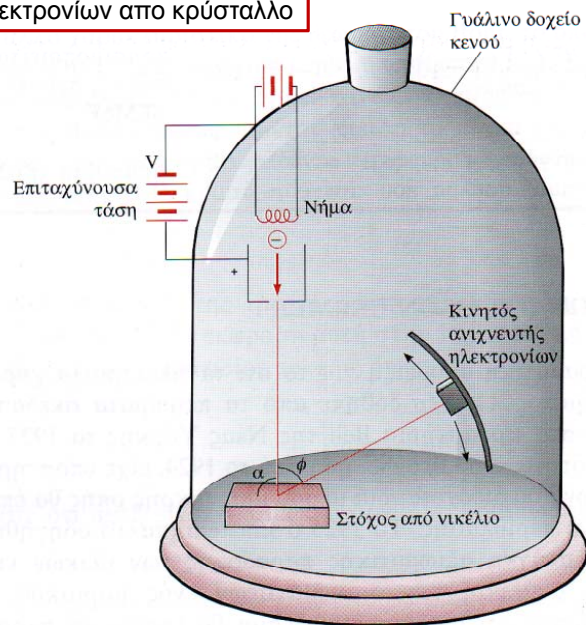
$$\lambda = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}}{\sqrt{2 \cdot (9.11 \times 10^{-31} \text{ kg})(1.602 \times 10^{-19} \text{ C})(50 \text{ V})}} = 0.174 \text{ nm}$$

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ύλικά Κύματα



Πείραμα Davisson-Germer:

περίθλαση ηλεκτρονίων από κρύσταλλο



Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ύλικά Κύματα



Πειραματική απόδειξη κυματικής υφής

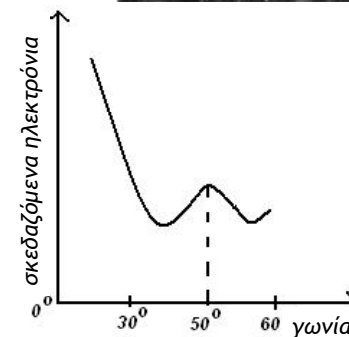
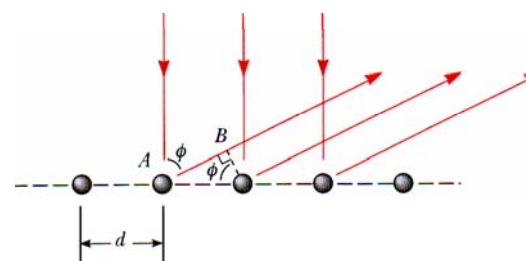
- Πείραμα Davisson-Germer (1927)

- σκέδαση ηλεκτρονίων χαμηλής ενέργειας (54 eV) από κρυσταλλικό νικέλιο ($d=0.215 \text{ nm}$)
- χαμηλή ενέργεια \rightarrow επιφανειακή σκέδαση

$$d \sin \phi = n\lambda$$

πειραματικό $\lambda = (0.215 \text{ nm})(\sin 50^\circ) = 0.165 \text{ nm}$

de Broglie $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meV}} = 0.167 \text{ nm}$



Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ύλικά Κύματα



Περίθλαση ενεργητικών ηλεκτρονίων

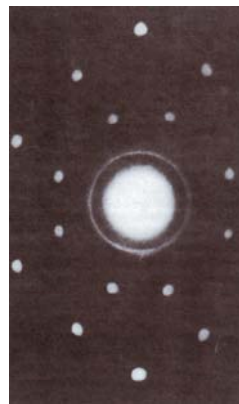
- Σε μεγάλες ενέργειες ηλεκτρονίων
 - εισχωρούν βαθιά στον κρύσταλλο → συνήθης σκέδαση Bragg

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

- πολύ πιο οξείες γραμμές περίθλασης



περίθλαση ηλεκτρονίων 50 keV από κράμα Cu_3Au



περίθλαση ηλεκτρονίων από μονοκρύσταλλο NaCl

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ύλικά Κύματα



Παράδειγμα 4.3

- Μπορούν θερμικά νετρόνια να υποστούν περίθλαση σε κρυστάλλους;
 - θερμικά σωματίδια είναι αυτά που έχουν ενέργεια $3kT/2$
 - τι μήκος κύματος de Broglie έχουν τα θερμικά νετρόνια;

$$\frac{1}{2} m_n v^2 = \frac{3}{2} kT \Rightarrow p_n = m_n v = \sqrt{3m_n kT} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{\sqrt{3m_n kT}}$$

$$\lambda = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}}{\sqrt{3 \cdot (1.675 \times 10^{-27} \text{ kg})(1.381 \times 10^{-23} \text{ J/K})(300 \text{ K})}} = 0.145 \text{ nm}$$

το μήκος κύματος de Broglie των θερμικών νετρονίων είναι της τάξης μεγέθους των κρυσταλλικών αποστάσεων. Άρα θα υποστούν περίθλαση

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ύλικά Κύματα



Παράδειγμα 4.3

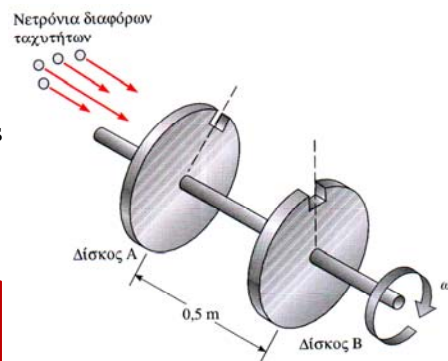
- Τα νετρόνια που δημιουργούνται σε πυρηνικούς αντιδραστήρες είναι μεγάλων ενεργειών και ακατάλληλα για πειράματα περίθλασης.
 - Συνήθως επιβραδύνονται από μια στήλη γραφίτη ώστε να καταλήξουν σε θερμικές ενέργειες
 - Για να καταφέρουμε μια «μονοχρωματική» δέση νετρονίων (όλα δηλαδή με το ίδιο μήκος κύματος de Broglie) χρησιμοποιείται η παρακάτω διάταξη (γωνία μεταξύ σχισμών 10°)
 - ποιά ταχύτητα περιστροφής της διάταξης απαιτείται ώστε να περνάνε μόνο νετρόνια με μήκος κύματος de Broglie 0.1 nm ;

$$\lambda = \frac{h}{m v}$$

$$\Rightarrow v = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}}{(1.675 \times 10^{-27} \text{ kg})(10^{-10} \text{ m})} = 3960 \text{ m/s}$$

$$\Delta t = \frac{0.5 \text{ m}}{3960 \text{ m/s}} = 0.000126 \text{ s}$$

$$T = \frac{360^\circ}{10^\circ} \Delta t = 0.004536 \text{ s} \quad f = \frac{1}{T} = 220 \text{ Hz}$$

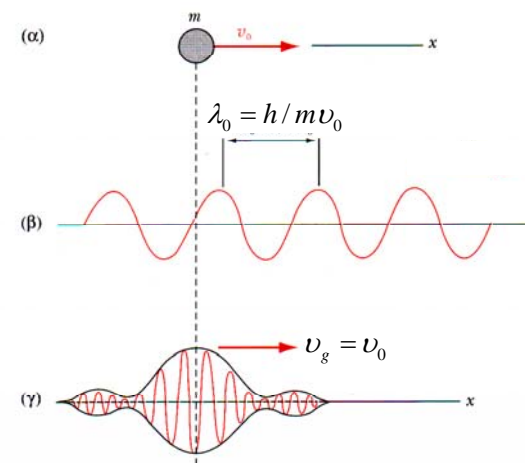


Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ύλικά Κύματα



Οδηγούντα κυματοπακέτα

- Ξαναγυρνάμε στα οδηγούντα κύματα de Broglie
 - περιγράφονται από κυματοσμάδες: πολλές συχνότητες μαζί ώστε να δημιουργείται περιορισμένο κύμα στον χώρο
 - αυτό το κύμα «οδηγεί» το σωματίδιο στον χώρο
 - ας δούμε πρώτα τις ιδιότητες ενός άπειρου εκτεταμένου κύματος: επίπεδα κύματα



Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ύλικά Κύματα



Επίπεδα κύματα

- Στην γενική του μορφή, ένα επίπεδο κύμα δίνεται

$$\Psi = A \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda} - \frac{2\pi t}{T}\right)$$

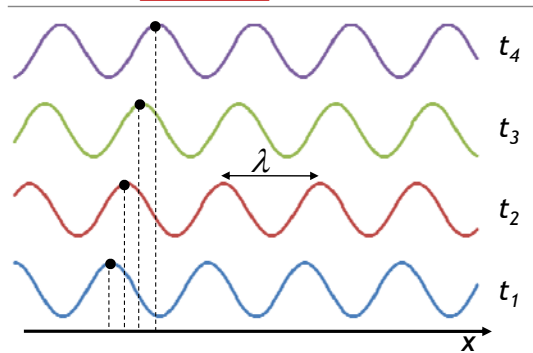
λ : χωρική περίοδος
 T : χρονική περίοδος

$$f = T^{-1}$$

- Η ταχύτητα διάδοσης της φάσης
 - για σημείο σταθερής φάσης

$$\frac{2\pi(x + \Delta x)}{\lambda} - \frac{2\pi(t + \Delta t)}{T} = \frac{2\pi x}{\lambda} - \frac{2\pi t}{T}$$

$$\Rightarrow \frac{\Delta x}{\lambda} - \frac{\Delta t}{T} = 0 \Rightarrow v_p = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\lambda}{T}$$



$$k = 2\pi / \lambda$$

$$\omega = 2\pi / T$$

$$\Psi = A \cos(kx - \omega t) \quad v_p = \lambda \cdot f = \omega / k$$

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ύλικά Κύματα



Πρόσθεση δύο επίπεδων κυμάτων

- Δύο κύματα με μικρή διαφορά στο μήκος κύματος: διακρότημα

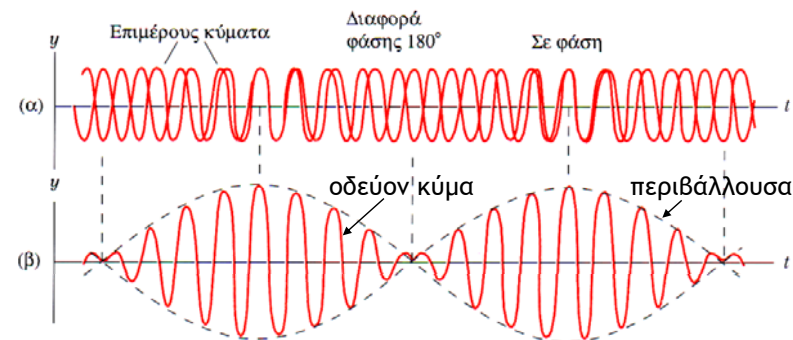
$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 = A \cos(k_1 x - \omega_1 t) + A \cos(k_2 x - \omega_2 t)$$

$$\cos a + \cos b = 2 \cos\left(\frac{a-b}{2}\right) \cdot \cos\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

ταχύτητα φάσης: $v_p = \bar{\omega} / \bar{k}$

ταχύτητα ομάδας: $v_g = \Delta\omega / \Delta k$

$$\Psi = 2A \cos\left(\frac{\Delta k}{2} x - \frac{\Delta\omega}{2} t\right) \cos(\bar{k}x - \bar{\omega}t)$$



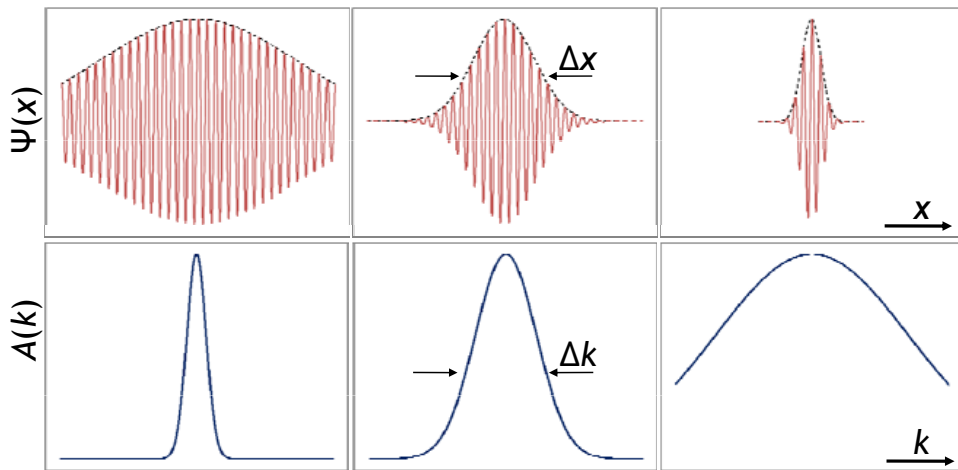
Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ύλικά Κύματα



Κυματοομάδες

Ένα κυματοπακέτο περιλαμβάνει πολλά μήκη κύματος

$$\Psi(x) = \sum_{-\infty}^{+\infty} A(k) \cos(kx) dk$$



$$\text{γενικός κανόνας: } \Delta k \cdot \Delta x \approx 1$$

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ύλικά Κύματα



Παράδειγμα με δύο κύματα

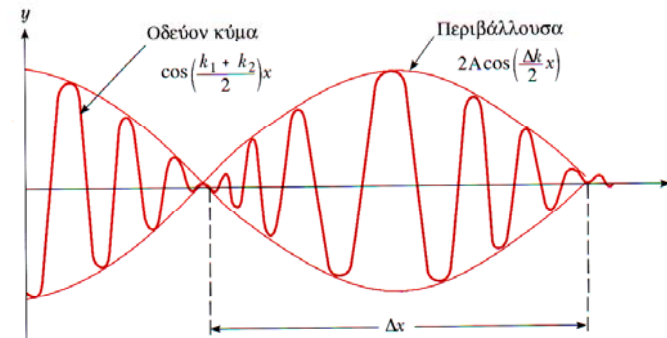
- Εάν θεωρήσουμε Δx το εύρος ενός διακροτήματος τότε

$$\cos\left(\frac{\Delta k}{2}(x + \Delta x)\right) = \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x\right)$$

το ίδιο ισχύει μεταξύ συχνότητας και χρόνου

$$\frac{\Delta k}{2} \Delta x = \pi \Rightarrow \Delta k \cdot \Delta x = 2\pi$$

$$\Delta\omega \cdot \Delta t = 2\pi$$



Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ύλικά Κύματα



Αρχή της απροσδιοριστίας

Werner Heisenberg (1927)

- σε μια μέτρηση, η αβεβαιότητα στην θέση Δx και η αβεβαιότητα στην ορμή Δp του σωματιδίου δεν μπορούν να ελατωθούν ανεξάρτητα η μια από την άλλη. Το γινόμενο τους είναι πάντα:

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar$$

$$\left. \begin{array}{l} \Delta k \cdot \Delta x \geq 1 \\ p = \hbar k \end{array} \right\} \Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar$$



Ένα παράδειγμα απροσδιοριστίας

- ένα φωτόνιο σκεδάζεται προς τον φακό
 - μέγιστη επιτρεπτή γωνία $\pm\theta$
 - ορμή $p = h/\lambda$
 - λόγω διατήρησης ορμής στον x άξονα, η απροσδιοριστία στην ορμή του ηλεκτρονίου

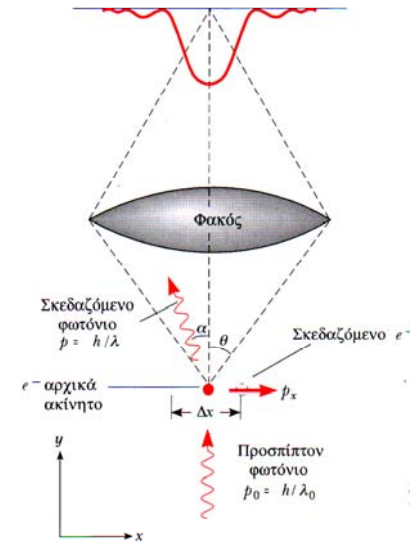
$$\Delta p = 2 \frac{h}{\lambda} \sin \theta$$

- το φωτόνιο συλλέγεται από τον φακό
 - διακριτική ικανότητα φακού (και άρα διακριτική ικανότητα θέσης ηλεκτρονίου)

$$\Delta x = \frac{\lambda}{2 \sin \theta}$$

- γινόμενο αβεβαιοτήτων

$$\Delta p \cdot \Delta x = \left(2 \frac{h}{\lambda} \sin \theta \right) \left(\frac{\lambda}{2 \sin \theta} \right) = h$$



Αρχή της απροσδιοριστίας

Δύο σχέσεις απροσδιοριστίας

- θέσης - ορμής

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar$$

- ενέργειας-χρόνου

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$$



Παράδειγμα 4.6

- Η ταχύτητα ενός ηλεκτρονίου βρέθηκε ίση με 5000 m/s, με περιθώριο σφάλματος 0.003%.
 - ποιά η αβεβαιότητα στον προσδιορισμό της θέσης;

- ορμή ηλεκτρονίου

$$p = mv = (9.11 \times 10^{-31} \text{ kg})(5000 \text{ m/s}) = 4.56 \times 10^{-27} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$$

- αβεβαιότητα στην ορμή

$$\Delta p = p \cdot 0.00003 = 1.37 \times 10^{-31} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$$

- αβεβαιότητα στην θέση

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{\Delta p} = \frac{1.055 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{1.37 \times 10^{-31} \text{ kg} \cdot \text{m/s}} = 0.77 \times 10^{-3} \text{ m}$$



Παράδειγμα 4.7

- Ένα διεγερμένο άτομο μπορεί οποιαδήποτε στιγμή να εκπέμψει ένα φωτόνιο και να γυρίσει στην θεμελιώδη κατάσταση
 - κατά μέσο όρο το κάνει μετά απο χρόνο τ , χαρακτηριστικό για κάθε διαφορετικό άτομο και στάθμη.
 - τι διεύρυνση προκαλείται στην συχνότητα εκπομπής λόγω αυτού όταν $\tau=10^{-8}$ s;

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar$$

$$h\Delta f \cdot \tau \approx \hbar \Rightarrow \Delta f = \frac{1}{2 \cdot 3.14159 \cdot 10^{-8} \text{ s}} = 1.6 \times 10^7 \text{ Hz}$$



Τι είναι η κυματοσυνάρτηση;

- Το κύμα που περιγράφει το σωματίδιο
 - κυματοσυνάρτηση $\Psi(x)$
- Δεν είναι μετρήσιμη
- Είναι εν γένει μιγαδική
- Το τετράγωνο του μέτρου της αντιπροσωπεύει πιθανότητα
 - πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στην θέση x είναι ανάλογη του: $|\Psi(x)|^2 = \Psi^*(x) \cdot \Psi(x)$
 - είχε υπάρξει μεγάλη διαμάχη μεταξύ των φυσικών στα πρώτα χρόνια ως προς τι ακριβώς αντιπροσωπεύει
- Το ηλεκτρόνιο (και κάθε μικρό σωματίδιο) συμπεριφέρεται είτε ως σωματίδια είτε ως κύματα, ανάλογα με το είδος του πειράματος.

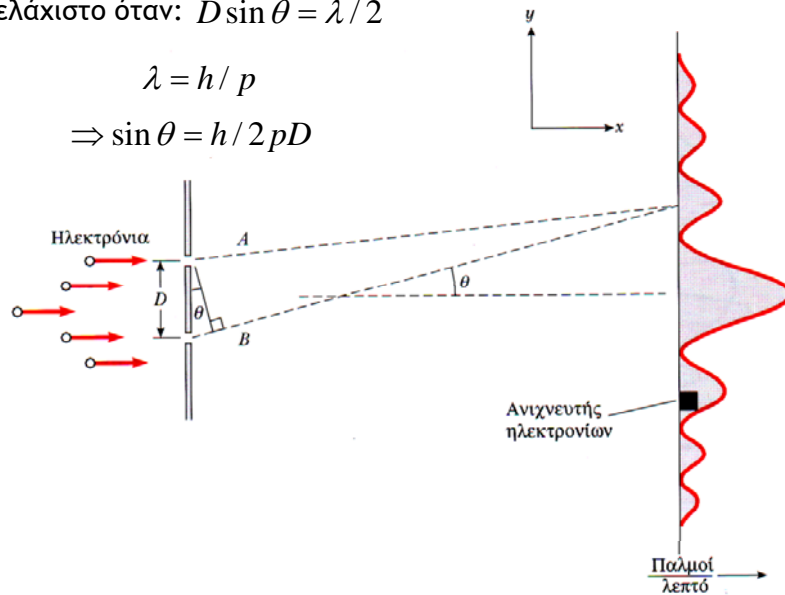


Περίθλαση από δύο σχισμές

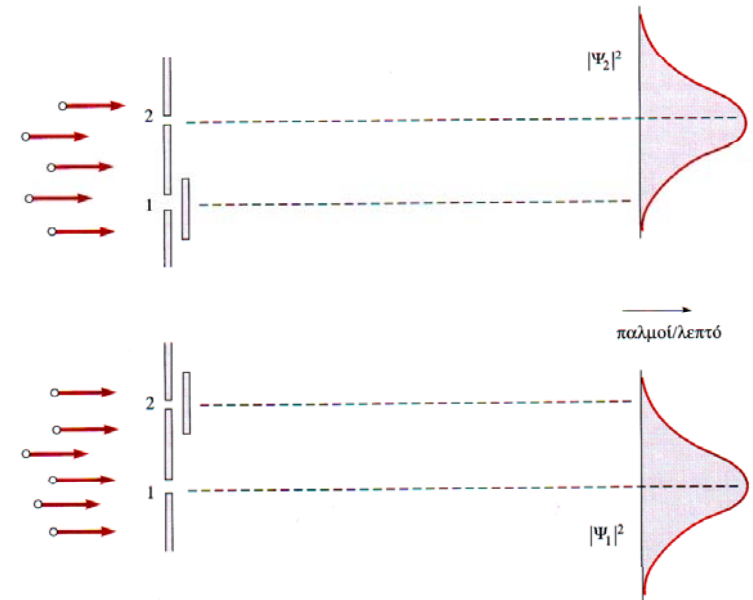
ελάχιστο όταν: $D \sin \theta = \lambda / 2$

$$\lambda = h / p$$

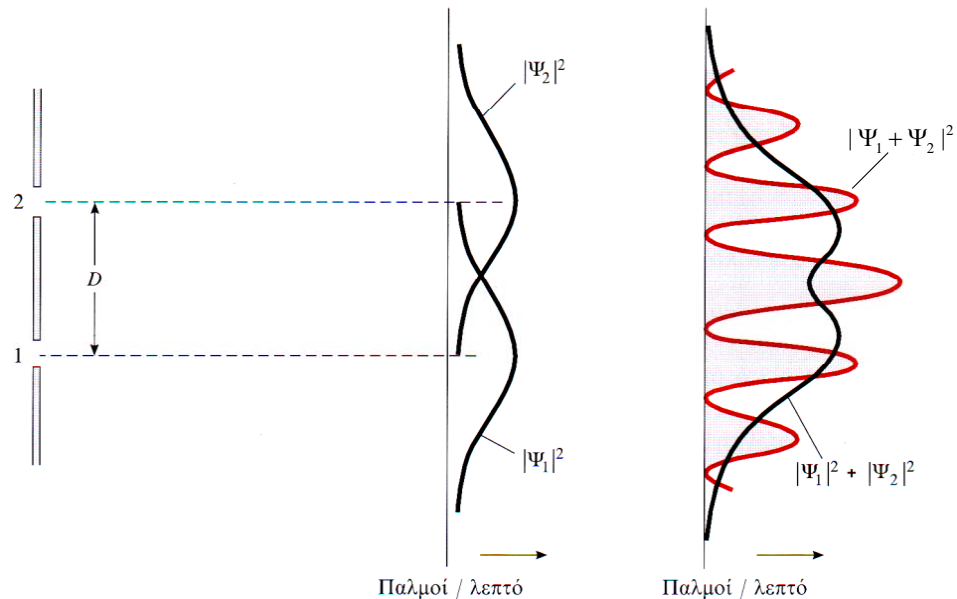
$$\Rightarrow \sin \theta = h / 2 p D$$



Περίθλαση από δύο σχισμές



Περίθλαση από δύο σχισμές



Περίθλαση από δύο σχισμές

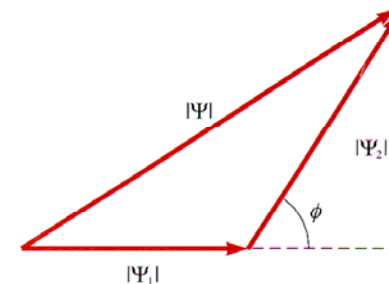
- Το ηλεκτρόνιο βρίσκεται σε μια κατάσταση υπέρθεσης, ασχέτως από ποιά σχισμή περνάει

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$$

- Η πιθανότητα ανίχνευσης στην οθόνη είναι

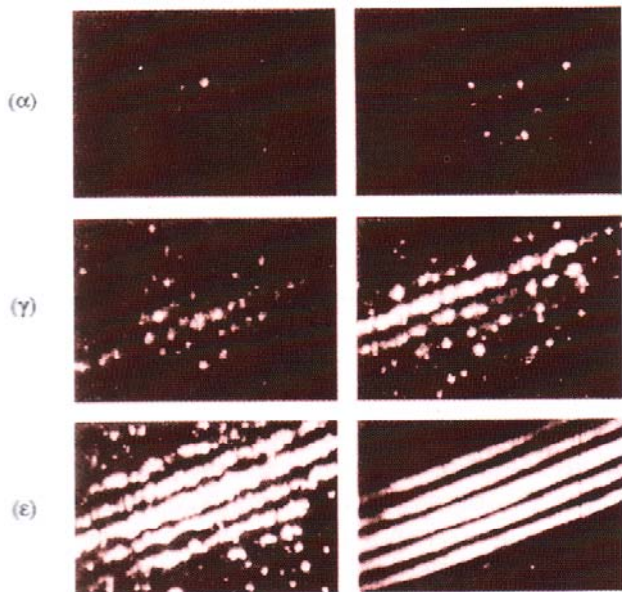
$$|\Psi|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2$$

$$|\Psi|^2 = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + 2|\Psi_1| \cdot |\Psi_2| \cos \phi$$

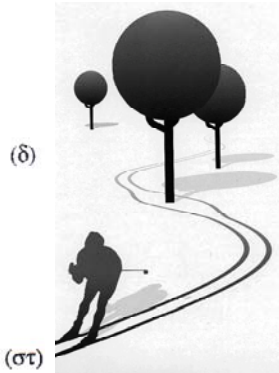


Περίθλαση από δύο σχισμές

- Μέτρηση σε διαφορετικές χρονικές στιγμές



(β) Η κυματοσυνάρτηση του ηλεκτρονίου περνάει και από τις δύο σχισμές!!



Κατάσταση υπέρθεσης: η περίφημη «γάτα του Schrödinger»

Schrodinger's Cat

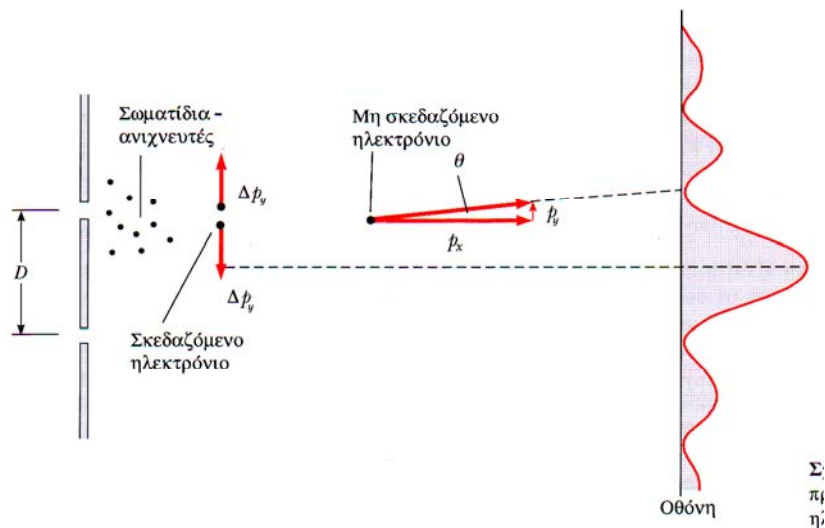
(1) Radioactive material has a 50:50 chance of triggering geiger counter

(2) If geiger counter is triggered, hammer falls

(3) Hammer breaks poison bottle

(4) Cat dies if poison bottle breaks

(5) Cat lives, if Geiger counter does not trigger hammer and releases the poison



Προβλήματα

$$\lambda = h/p \quad \Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar$$

- 4.5: Ένα ηλεκτρόνιο και ένα πρωτόνιο έχουν το καθένα ενέργεια ίση με 50 keV. Ποιά είναι τα μήκη κύματος de Broglie; Για ένα φωτόνιο πόσο είναι;
- 4.8: Βρείτε το μήκος κύματος de Broglie μιας μπάλας μάζας 0.2 kg η οποία έχει ριχθεί απο κτήριο ύψους 50 m, λίγο πριν αυτή χτυπήσει στην γή.

δείτε αυτό: <http://htwins.net/scale/index.html>
- 4.11: Από ποιά διαφορά δυναμικού θα πρέπει να επιταχυνθεί ένα ηλεκτρόνιο ώστε να αποκτήσει μήκος κύματος de Broglie 10^{-10} m;
- 4.14: Μια μπάλα μάζας 50 g κινείται με ταχύτητα 30 m/s. Αν η ταχύτητά της μετριέται με περιθώριο σφάλματος 0.1%, πόση είναι η ελάχιστη αβεβαιότητα για την θέση της μπάλα;
- 4.15: Ένα πρωτόνιο έχει κινητική ενέργεια 1 MeV. Αν η ορμή του μετριέται με αβεβαιότητα 5%, πόση είναι η ελάχιστη αβεβαιότητα της θέσης του;