Θεωρία De Broglie [1923]

- **Αξίωμα De Broglie** : Αφού τα φωτόνια είναι και κύματα και σωματίδια γιατί να μην συμπεριφέρονται και τα σωματίδια ως κύματα ??

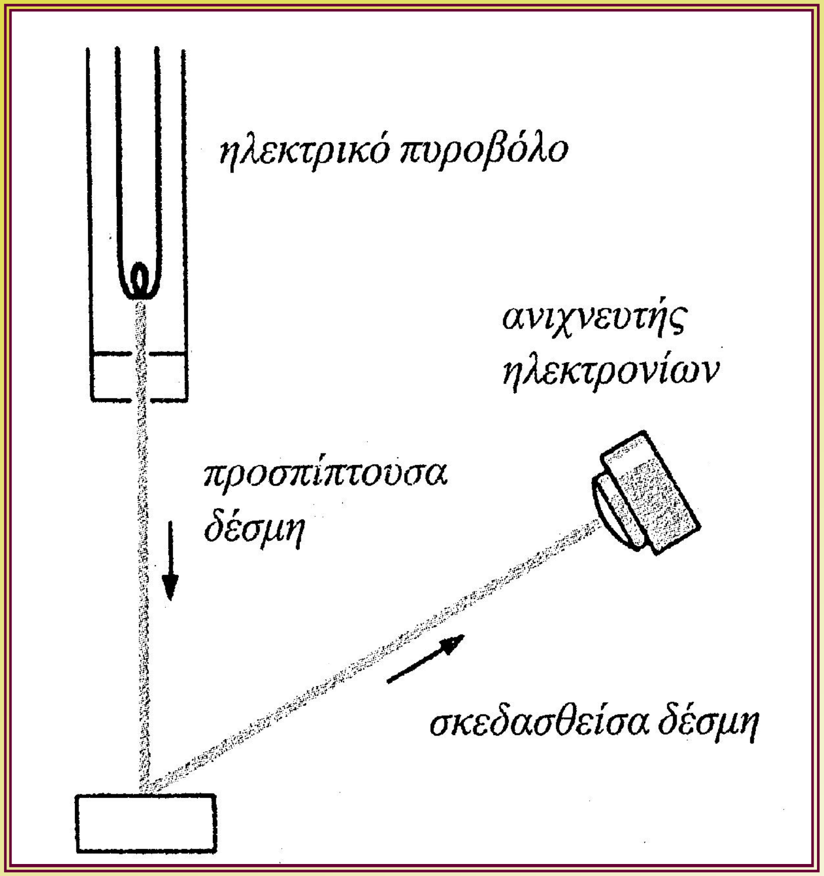
ΤΑ ΦΩΤΟΝΙΑ ενέργιας
E =h.ν ενέχουν ορμή :

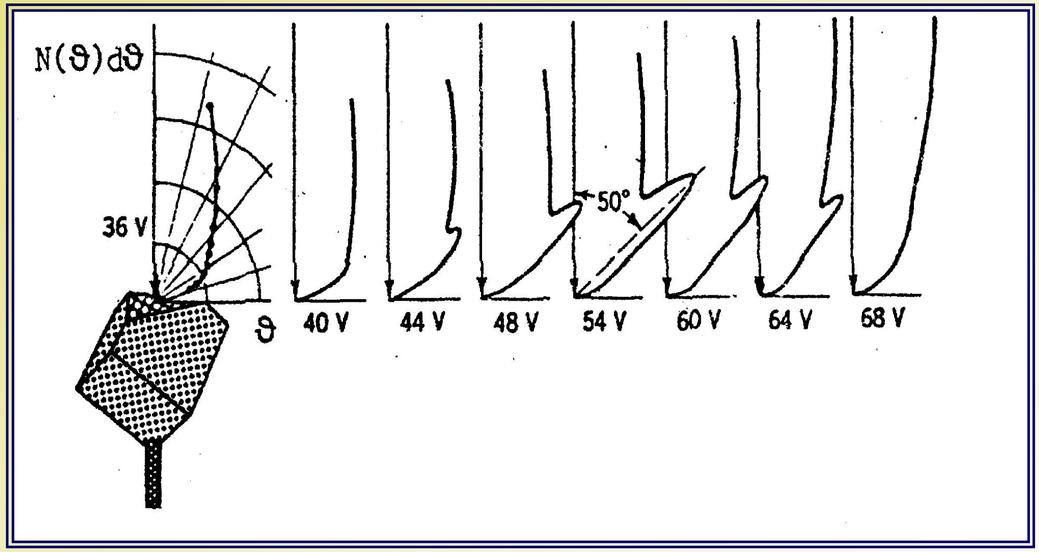
$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{hc}{c\lambda} = \frac{h}{\lambda}$$

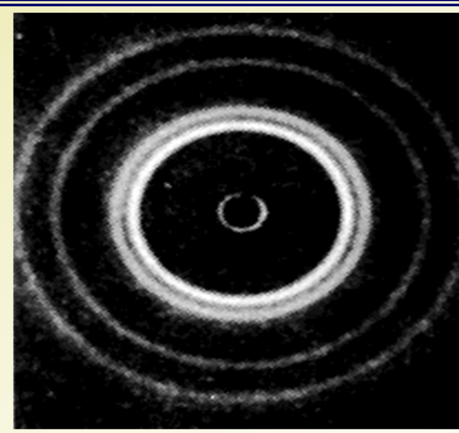
Ομοίως και σωματίδια ορμής $p = m.\upsilon$ συμπεριφέρονται ως κύματα που έχουν μήκος κύματος $\lambda = h/p$ *και συχνότητα* $f = E_\sigma / h$

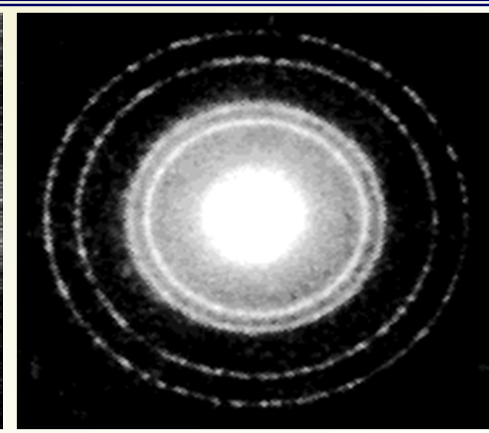
$$\lambda = \frac{h}{m \cdot \upsilon} = \frac{h}{\dfrac{m_0 \cdot \upsilon}{\sqrt{1 - \dfrac{\upsilon^2}{c^2}}}}$$

Πειραματική Επαλήθευσης της θεωρίας De Broglie
[Πείραμα Davisson-Germer και G.Tomson (1927)]



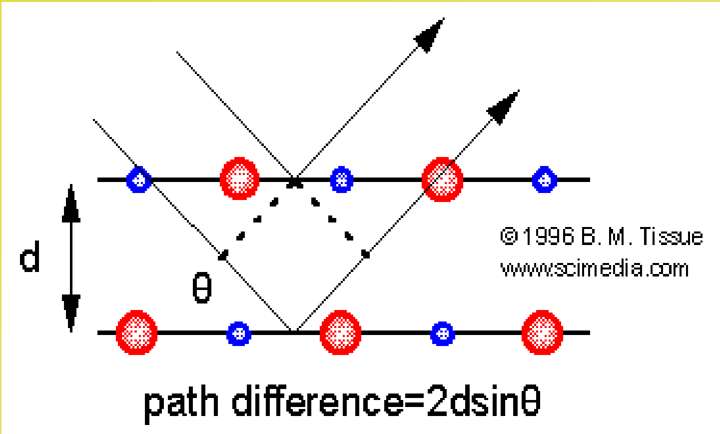






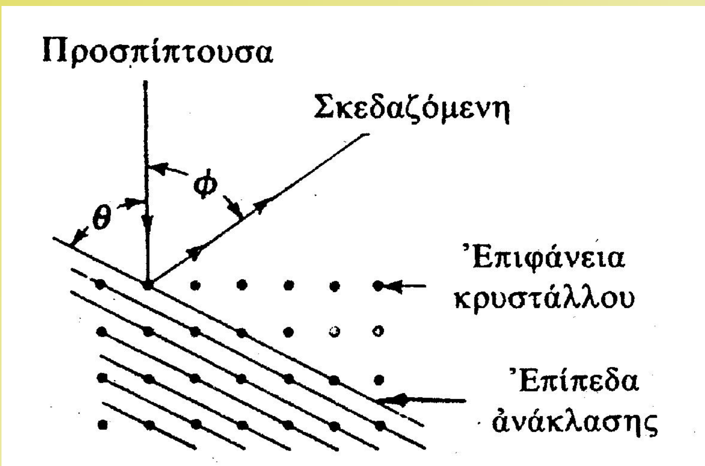
Τα κύματα De Broglie των e⁻ περιθλώνται από τον στόχο όπως οι ακτίνες χ περιθλώνται από τα επίπεδα ατόμων ενός κρυστάλου

Ανάλυση Πειραμάτων



Συνθήκη της εποικοδομητικής συμβολής των σκεδαζόμενων κυμάτων – ακτίνων χ από μία τέλεια περιοδική διάταξη ατόμων είναι η ακόλουθη Σχέση του Bragg

$$2 \cdot d \cdot \sin(\vartheta) = n \cdot \lambda$$



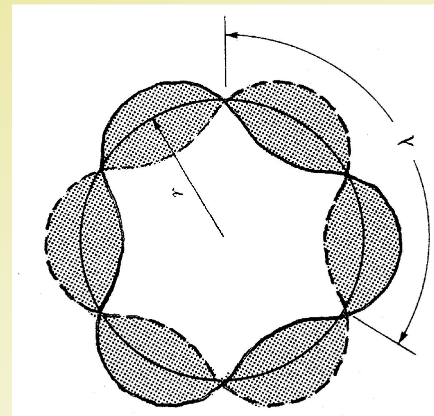
Για κύματα-e^- που έχουν E = 54eV και περιθλώνται από ένα μονοκρύσταλλο Ni εμφανίζουν μέγιστο στην κατανομή τους σε γωνία φ = 50°

Επομένως για γωνίας πρόσπτωσης θ=(π-φ)/2=65° και για d=0.091 nm (μέτρηση με χρήση ακτίνων χ) το μήκος κύματος των e^- πρέπει να είναι

λ = 0.165 nm

$$\lambda_e = \frac{h}{m \cdot \upsilon} = \frac{h}{\sqrt{2m_0 \cdot T}} = 0.166\, nm$$

Ερμηνεία κβαντικών συνθηκών του Bohr βάσει της θεωρίας του De Broglie

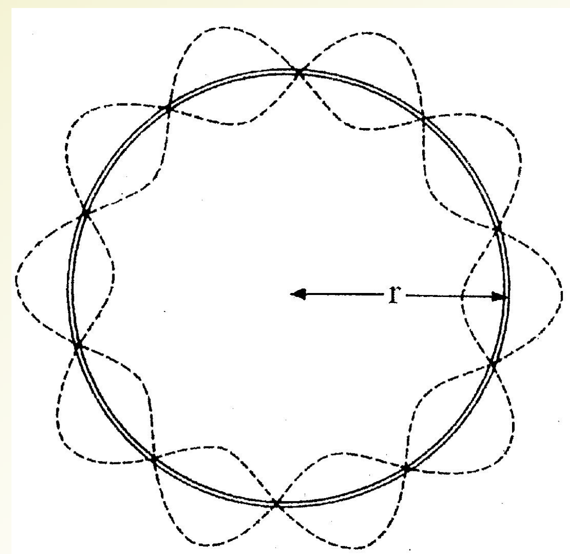


Αρχή διατήρησης της στροφορμής κατά BOHR

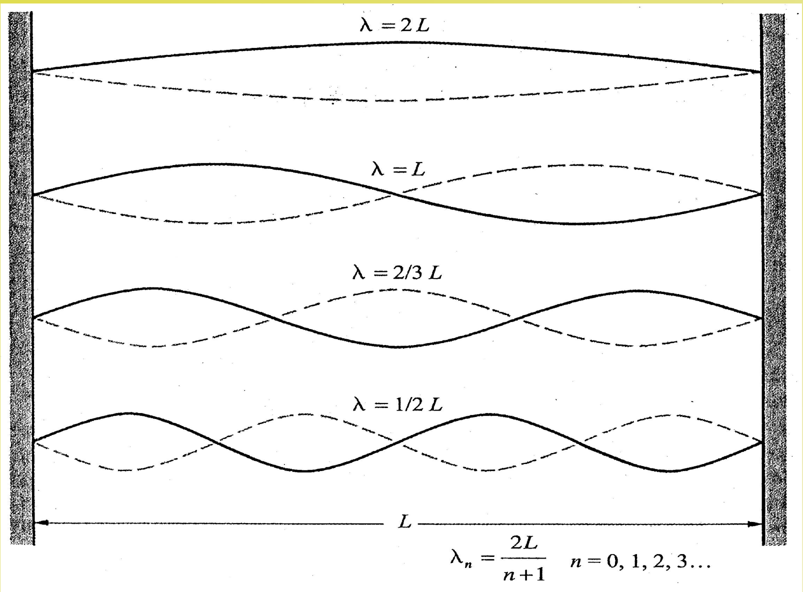
$$m \cdot \upsilon \cdot r = n \cdot \hbar$$

Οι μόνες παρατηρούμενες – επιτρεπτές τροχίες ενός e$^-$ στο άτομο είναι αυτές όπου το κατά De Broglie κύμα που συνοδεύει το e$^-$ είναι στάσιμο επί κυκλικής τροχίας 2πr δηλαδή:

$$n \cdot \lambda = 2\pi \cdot r \rightarrow n \cdot \frac{h}{m \cdot \upsilon} = 2\pi \cdot r \rightarrow m \cdot \upsilon \cdot r = n \cdot \hbar$$



Τα e⁻ κινούνται σε επιτρεπτές κβαντισμένες τροχίες χωρίς να εκπέμπούν Η/Μ ακτινοβολία

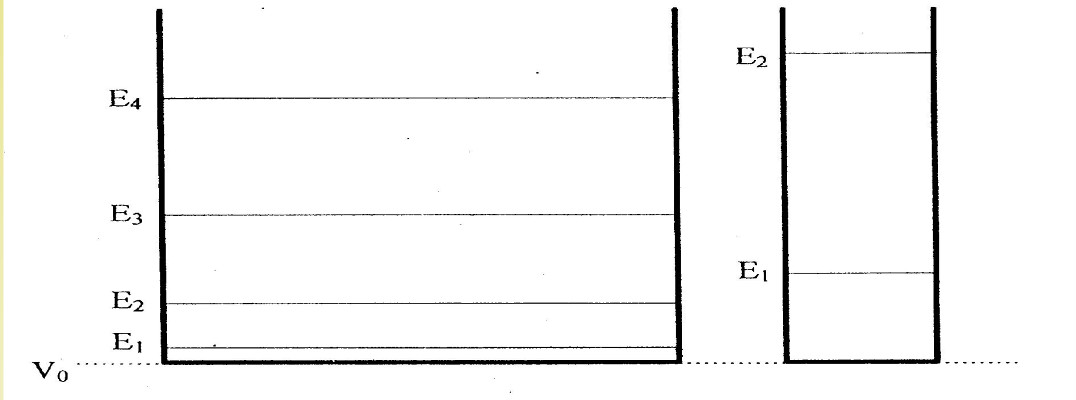


Σε μια χορδή μήκους L το μήκος κύματος των στασίμων κυμάτων παίρνει διακριτές τιμές λ

$$\lambda = \frac{2L}{n} \qquad n = 1,2,3,.....$$

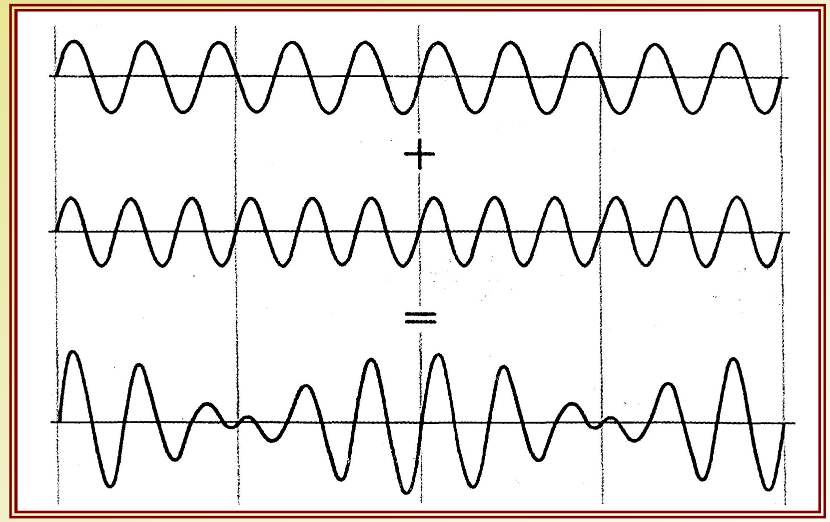
Ένα e⁻ εγκλωβισμένο σε ένα κιβώτιο μήκους L είτε σε ένα φρέαρ δυναμικού εύρους L θα βρίσκεται σε ενεργειακές καταστάσεις E

$$E = \frac{1}{2} \cdot m \cdot \upsilon^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{h^2}{2m\frac{(2L)^2}{n^2}} = \frac{h^2}{8mL^2} n^2$$



Τι είδους κύματα συνοδεύουν τα σωματίδια

$$\Psi(x,t) = A\cos 2\pi\nu t = A\cos(\omega t - kx)$$

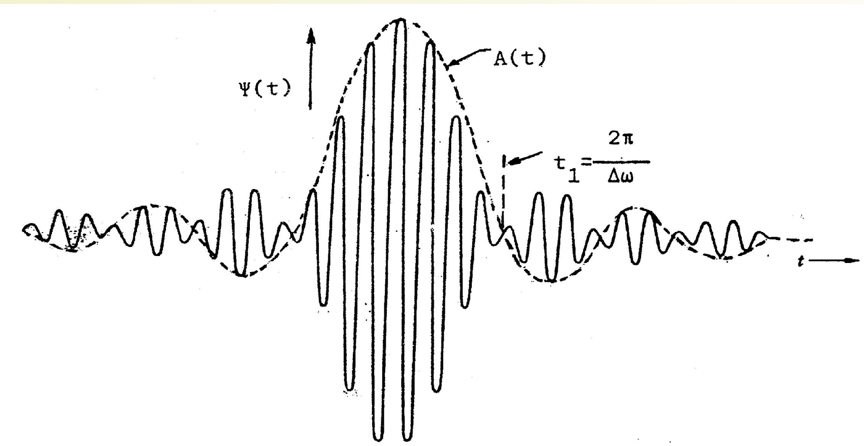


Γωνιακή ταχύτητα $\qquad \omega = 2\pi\nu$

Κυματάριθμος $\qquad k = \dfrac{2\pi}{\lambda} = \dfrac{\omega}{\nu\lambda} = \dfrac{\omega}{w}$

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 = A\cos(\omega t - kx) + A\cos[(\omega + d\omega)t - (k + dk)x]$$

$$\Psi = 2A\cos(\omega t - kx)\cos\left(\frac{d\omega}{2}t - \frac{dk}{2}x\right)$$



Ταχύτητα φάσης $\qquad w = \dfrac{\omega}{k} = \dfrac{c^2}{\upsilon}$

Ταχύτητα ομάδας $\qquad u = \dfrac{d\omega}{dk} = \upsilon$

ΚΥΜΑΤΟΣΥΝΑΡΤΗΣΗ Ψ(x,t)

Η κυματοσυνάρτηση Ψ ικανοποιεί τη κυματική εξίσωση που περιγράφει την κίνηση κύματος που οδεύει με ταχύτητα υ στην κατεύθυνση x

$$\boxed{\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{1}{\upsilon^2}\frac{d^2\Psi}{dt^2}}$$

Η γενική λύση για αρμονικά κύματα με σταθερό πλάτος και γωνιακή συχνότητα που διαδίδονται προς +x δίνεται ως:

$$\Psi(x,t) = A\cos 2\pi\nu t = A\cos(\omega t - kx) = F(\omega t - kx)$$

$$\Psi = F(\omega t - kx) = Ae^{-i(\omega t - kx)}$$

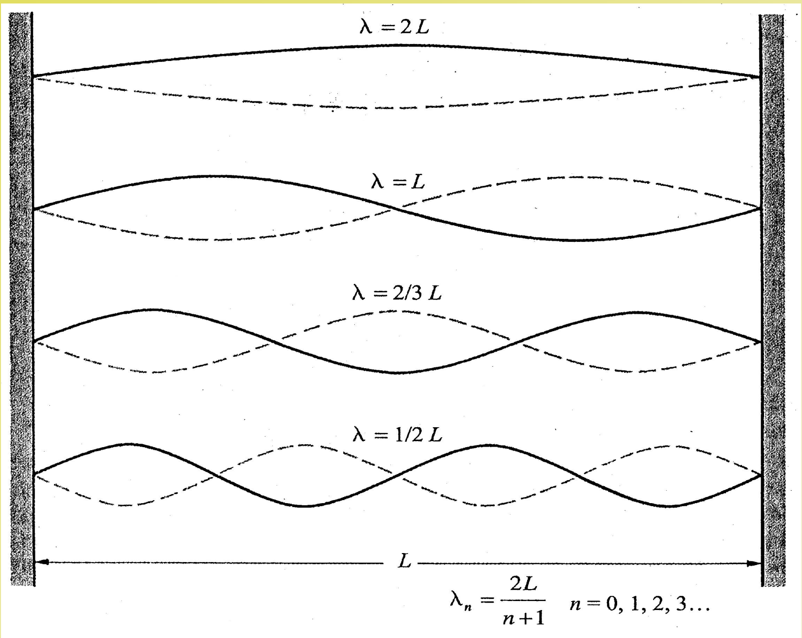
$$\Psi = A\cos(\omega t - kx) - iA\sin(\omega t - kx)$$

$$\boxed{\Psi\left(x,t\right) = A(x,t) + i\cdot B(x,t)}$$

$$i^2 = -1$$

Στάσιμα εγκάρσια κύματα σε χορδή μήκους L

Σε μια χορδή μήκους L το μήκος κύματος των στασίμων κυμάτων παίρνει διακριτές τιμές λ καθώς δύο αντίθετες και σύμφωνες κυμάνσεις διαδίδονται ταυτόχρονα σε πεπερασμένο μέσο με τελικό αποτέλεσμα η συνισταμένη κίνηση να περιγράφεται από τη συνάρτηση Ψ(x,t)



$$\Psi(x,t) = \Psi_1 + \Psi_2$$

$$\Psi(x,t) = A\cos(\omega t - kx) + A\cos(\omega t + kx)$$

$$\Psi(x,t) = -2A\sin(kx)\cos\omega t = \psi(x)\cdot f(t)$$

Το πλάτος της συνισταμένης ταλάντωσης δίνεται τελικά ως:

$$\psi(x) = 2A\cdot\sin(kx) = \mathrm{A}\cdot\sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) = \mathrm{A}\cdot\sin\left(\frac{2\pi\cdot n}{2L}\right) = \mathrm{A}\cdot\sin\left(\frac{n\cdot\pi}{L}x\right) \qquad n=1,2,3,\ldots..$$

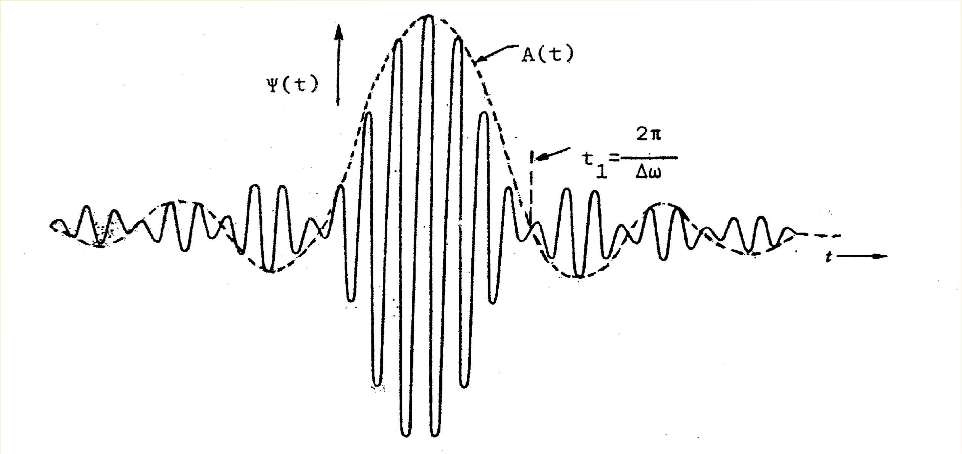
$$\lambda = \frac{2L}{n}$$

Κίνηση ελεύθερου e⁻ - υλοκύμα De Broglie

Για ένα e^- - κύμα de Broglie (υλοκύμα) που κινείται προς την κατεύθυνση +x με σταθερή ταχύτητα υ ≡ ταχύτητα ομάδας u, η συνάρτηση κίνησης – κυματοσυνάρτηση Ψ(x,t) μπορεί να εκφραστεί ως:

$$E = h \cdot \nu = 2\pi \cdot \hbar \cdot \nu$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}$$



$$\Psi(x,t) = Ae^{-i(\omega t - kx)} = Ae^{-2\pi i(\nu t - \frac{x}{\lambda})} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

Το υλοκύμα συνοδεύει ένα ελεύθερο σωμάτιο με ολική ενέργεια E που κινείται με σταθερή ορμή p. Όταν υ < c η ολική ενέργεια είναι το άθροισμα της κινητικής T και δυναμικής V ενέργειας του σωμάτιου

$$E(x,t) = T + V(x,t) = \frac{p^2}{2m} + V(x,t)$$

ΑΡΧΗ ΑΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΤΙΑΣ του Heisenberg

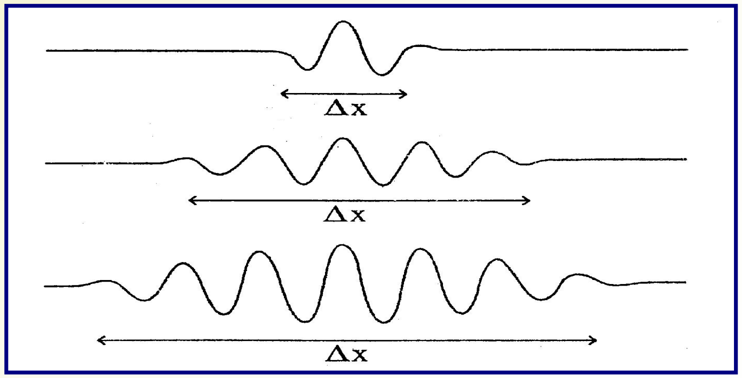
Η κυματοσυνάρτηση δίνει μια κατανομή πιθανότητας όταν θέλουμε να προσδιορίσουμε την θέση του σωματιδίου

$$\Psi\left(x,t\right) = Ae^{-i(\omega t - kx)} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

$$x = \langle x \rangle + \Delta x$$

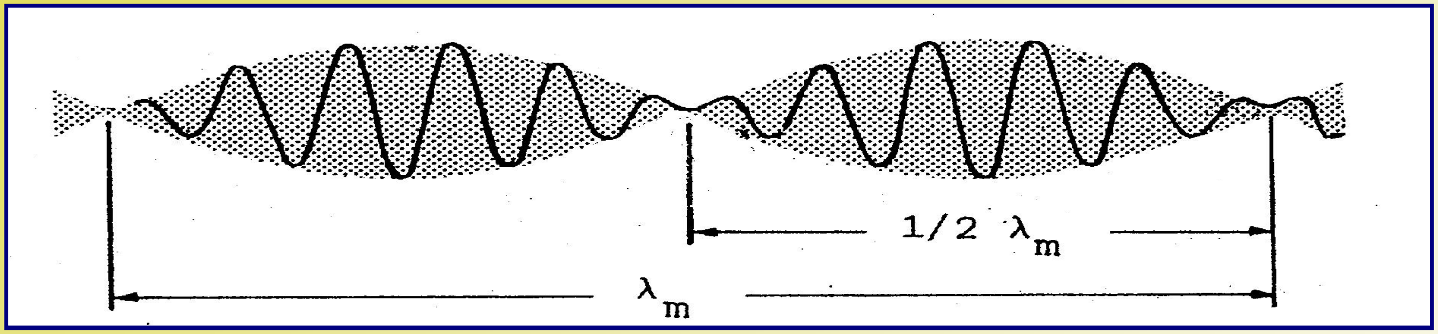
Όπου <x> η αναμενόμενη θέση του – μέση τιμή των πιθανών καταστάσεων του και Δx η **απροσδιοριστία** της θέσης – εύρος κατανομής πιθανών καταστάσεων

Η απροσδιοριστία είναι (α) χαρακτηριστικό των μετρούμενων μεγεθών **[το κβάντο δράσης είναι h]** και (β) σύμφυτη με την κυματική υφή των σωματιδίων **[δεν υπαρχει σημειακό υλοκύμα]**



ΑΡΧΗ ΑΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΤΙΑΣ του Heisenberg

$$\Psi(x,t) = Ae^{-i(\omega t - kx)} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$



$$x = \frac{1}{2}\lambda_m = \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{k_m} \rightarrow x\cdot k_m = \frac{1}{2}$$

$$t = \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{\omega} \rightarrow \omega\cdot t = \frac{1}{2}$$

$$\boxed{\Delta x\cdot\Delta k \geq \frac{1}{2}}$$

$$\boxed{\Delta \omega\cdot\Delta t \geq \frac{1}{2}}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\cdot p}{h} \rightarrow \Delta k = \frac{2\pi}{h}\cdot\Delta p$$

$$h\cdot\omega = 2\pi\cdot h\nu = 2\pi\cdot E \rightarrow E = \hbar\cdot\omega$$

$$\Delta\omega = \frac{1}{\hbar}\Delta E$$

$$\boxed{\Delta x\cdot\Delta p \geq \frac{h}{4\pi} \geq \frac{\hbar}{2}}$$

$$\boxed{\Delta E\cdot\Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Εξίσωση SCHRÖDIGER

Για ένα e$^-$ - κύμα de Broglie (υλοκύμα) που κινείται προς την κατεύθυνση +x με συνάρτηση κίνησης – κυματοσυνάρτηση Ψ(x,t) τότε αυτή θα πρέπει να πληρεί την γενική εξίσωση ενός κύματος :

$$\boxed{\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{1}{\upsilon^2}\frac{d^2\Psi}{dt^2}}$$

$$\Psi(x,t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi \leftrightarrow -\hbar^2 \cdot \nabla^2\Psi = p^2 \cdot \Psi$$

$$E(x,t) = \frac{p^2}{2m} + V(x,t)$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\cdot\Psi = \frac{1}{i\hbar}E\cdot\Psi$$

$$E\cdot\Psi = \frac{p^2\cdot\Psi}{2m} + V\cdot\Psi$$

$$\boxed{i\hbar\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\nabla^2\Psi + V\cdot\Psi}$$

Περιγράφει την κυματοσυνάρτηση Ψ(x,t) για ένα e$^-$ - κύμα de Broglie (υλοκύμα) που κινείται εντός χρονικά μεταβαλλόμενου δυμανικού V [V=V (x,y,z,t)] – **Χρονικά εξαρτώμενη εξίσωση Schrödiger**

Η εξίσωση δεν είναι Σχετικιστική [**Dirac**] και το Η/Μ πεδίο είναι συνεχές (V) ενώ το Η/Μ κύμα είναι κβαντισμένο [**Feynmann, QCD**]

ΚΥΜΑΤΟΣΥΝΑΡΤΗΣΗ Ψ

Η **κυματοσυνάρτηση Ψ = Ψ (x,y,z,t)** είναι μια μιγαδική συνάρτηση και περιγράφει την κίνηση του υλοκύματος που συνοδεύει σωμάτιο μάζας m πάνω στην οποία ασκείται δυναμικό V = V (x,y,z,t)

$$\Psi\left(x, y, z, t\right) = A(x, y, z, t) + i \cdot B(x, y, z, t)$$

$$i\hbar \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \nabla^2 \Psi + V \cdot \Psi$$

$$i^2 = -1$$

$$|\Psi|^2 = \Psi * \Psi = (A - iB) \cdot (A + iB) = A^2 - i^2 B^2 = A^2 + B^2$$

Η **Πυκνότητα πιθανότητας** $|\Psi|^2$ ύπαρξης ενός σωματιδίου είναι μια πραγματική συνάρτηση που προκύπτει από το γινόμενο δύο συζυγών κυματοσυναρτήσεων

Η **πιθανότητα P = P (x,y,z,t)** να βρεθεί το σωματίδιο που περιγράφεται από την Ψ εντός στοιχειώδους όγκου dV κάποια χρονική στιγμή dt ορίζεται ως:

$$P(x, y, z, t) = \left|\Psi(x, y, z, t)\right|^2 dVdt$$

Εξίσωση SCHRÖDIGER

Το υλοκύμα συνοδεύει ένα ελεύθερο σωμάτιο με σταθερή με τον χρόνο ολική ενέργεια E που κινείται με σταθερή ορμή p. Όταν υ < c η ολική ενέργεια είναι το άθροισμα της κινητικής T και δυναμικής V ενέργειας του σωμάτιου

$$\boxed{\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{1}{\upsilon^2}\frac{d^2\Psi}{dt^2}}$$

$$E(x) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$$\Psi(x,t) = Ae^{-i(\omega t - kx)} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} = A\cdot e^{+\frac{ip}{\hbar}x}\cdot e^{-\frac{iE}{\hbar}t} = \psi(x)\cdot f(t)$$

$$f(t)\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{1}{\upsilon^2}\cdot\psi(x)\cdot\omega^2\cdot f(t)$$

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{\omega^2}{\upsilon^2}\cdot\psi(x)}$$

$$\frac{\omega^2}{\upsilon^2} = k^2 = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 = \frac{4\pi^2}{(h/p)^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)$$

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\cdot\psi(x)}$$

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

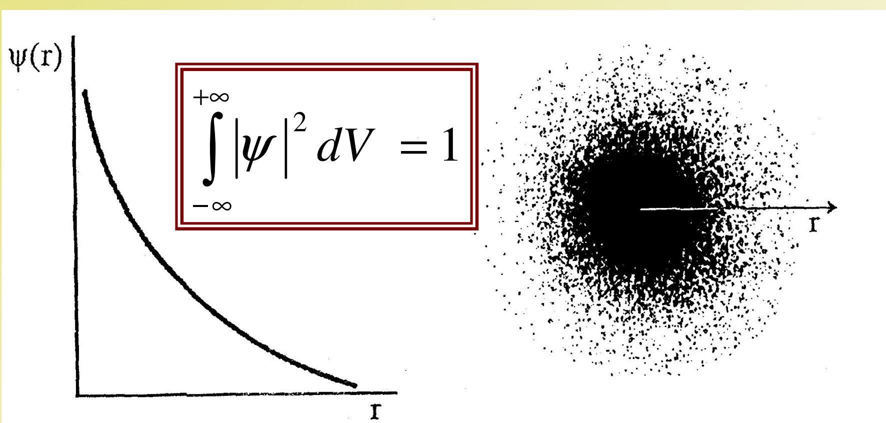
Περιγράφει την μεταβολή του πλάτους ψ(x) της κυματοσυνάρτησης Ψ(x,t) για ένα e^- - κύμα de Broglie (υλοκύμα) που κινείται εντός δυμανικού V που είναι σταθερό με τον χρόνο [V=V (x,y,z)] – **Ανεξάρτητη του χρόνου εξίσωση Schrödiger**

ΙΔΙΟΣΥΝΑΡΤΗΣΗ ψ

Η **<u>ιδιοσυνάρτηση ψ = ψ (x,y,z)</u>** είναι επίσης μια μιγαδική συνάρτηση και περιγράφει την κίνηση του υλοκύματος που συνοδεύει σωμάτιο μάζας m πάνω στην οποία ασκείται δυναμικό V = V (x,y,z) οπότε το σωμάτιο βρίσκεται σε ενεργειακά στάσιμες καταστάσεις-ιδιοκαταστάσεις για διάφορες τιμές της ολικής του ενέργειας **ιδιοτιμές Ε**

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

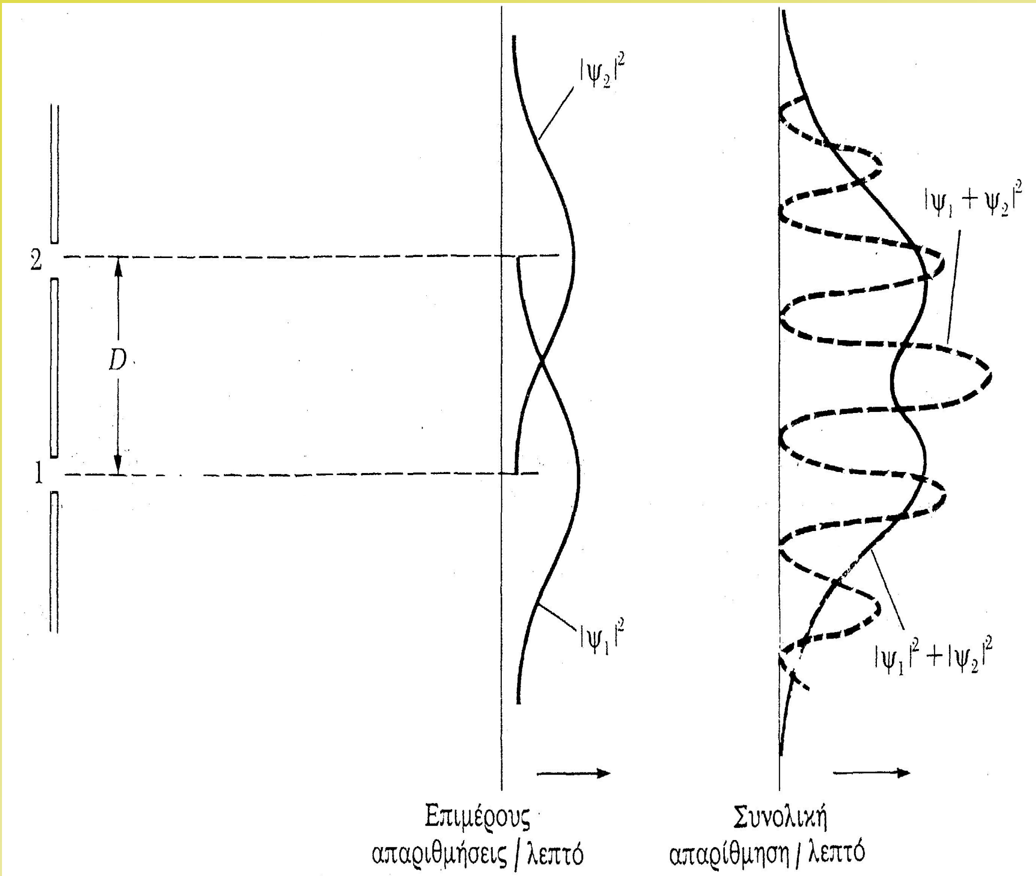
Όταν διαφορετικές καταστάσεις του σωματιδίου – ιδιοσυναρτήσεις έχουν την ίδια ολική ενέργεια – ιδιοτιμή Ε τότε καλούνται **εκφυλισμένες**

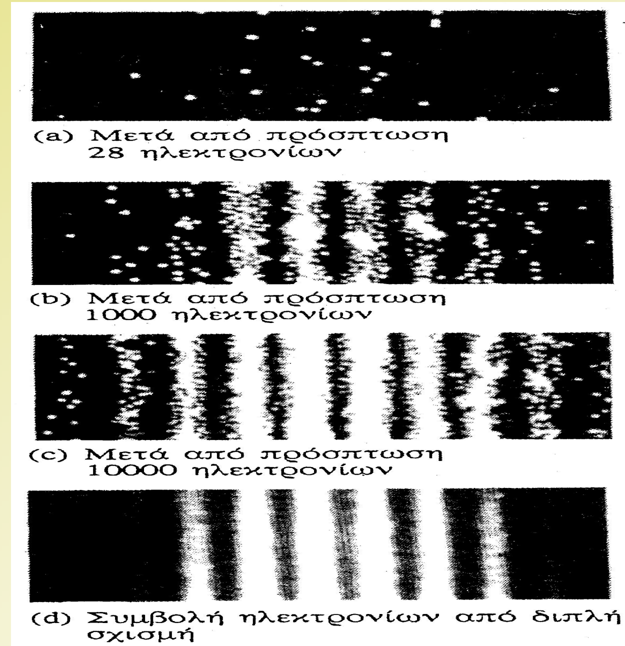


$$\boxed{P(x,y,z) = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 \, dV = 0 \ldots 1}$$

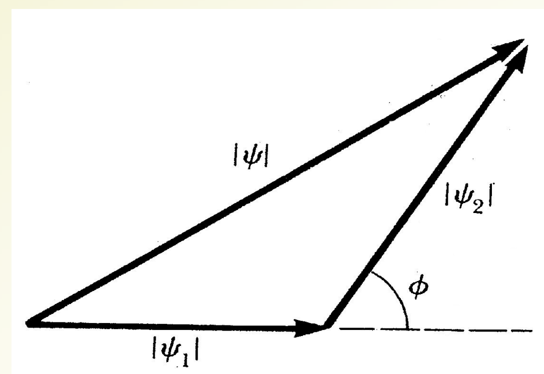
Το σωματίδιο συνοδεύεται από ένα κύμα πιθανότητας *P*

Πείραμα των δύο σχισμών



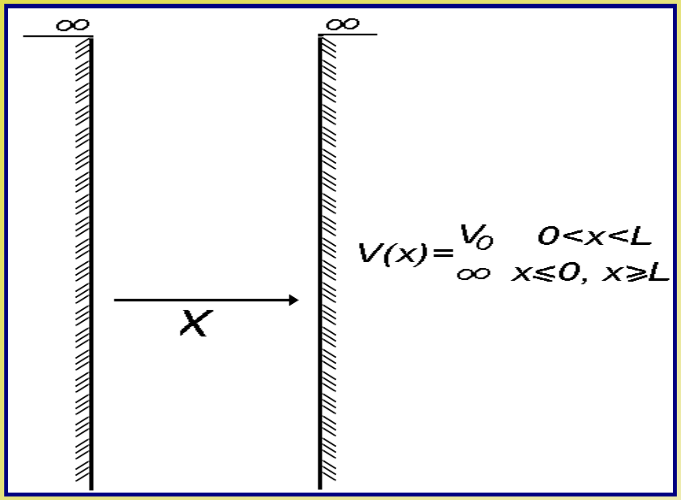


Η πιθανότητα P ανίχνευσης του e^- όταν και οι δύο σχισμές είναι ανοιχτές



$$\boxed{P \sim |\Psi|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2 = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + 2|\Psi_1| \cdot |\Psi_2| \cdot \cos\varphi}$$

Σωματίδιο εγκλωβισμένο σε ένα κιβώτιο μήκους L είτε σε ένα φρέαρ δυναμικού εύρους L και απείρου βάθους



Ένα e⁻ - υλοκύμα – κύμα de Broglie εγκλωβισμένο σε ένα κιβώτιο μήκους L είτε σε ένα φρέαρ δυναμικού εύρους L και απείρου βάθους θα βρίσκεται σε ενεργειακές καταστάσεις **ιδιοτιμές E = h.f** όπου f η συχνότητα de Broglie.

Για e^- δέσμια με ολική ενέργεια E και συχνότητα f που παραμένει σταθερή η συνάρτηση κίνησης – κυματοσυνάρτηση Ψ(x,t) μπορεί να εκφραστεί ως:

$$0 \leq x \leq L \quad V = \text{const} = 0$$

$$\Psi(x,t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} = A \cdot e^{+\frac{ip}{\hbar}x} \cdot e^{-\frac{iE}{\hbar}t} = \psi(x) \cdot f(t)$$

$$\boxed{\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\cdot \psi(x)}$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \psi(x) = 0$$

$$\psi = A \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right) + B \cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right)$$

Σωματίδιο εγκλωβισμένο σε ένα κιβώτιο μήκους L είτε σε ένα φρέαρ δυναμικού εύρους L και απείρου βάθους

$$\psi = A \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + B\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)$$

x = 0 V→∞ και ψ(0) = 0

$$B = 0$$

x = L V→∞ και ψ(x)=0

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot L = n\pi \qquad n = 1,2,3,....$$

Ιδιοτιμές ενέργειας E του συστήματος

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2}n^2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2$$

$$n = 1,2,3,....$$

$$\boxed{\psi_n(x) = \mathrm{A}\sin\left(\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}x\right) = \mathrm{A}\sin\left(\frac{n\cdot\pi}{L}x\right)}$$

$$n = 1,2,3,....$$

Σωματίδιο εγκλωβισμένο σε ένα κιβώτιο μήκους L είτε σε ένα φρέαρ δυναμικού εύρους L και απείρου βάθους

Οι ιδιοσυναρτήσεις ψ_n που αντιστοιχούν σε ιδιοτιμές ενέργειας E_n

$$0 \le x \le L \quad V = \text{const} = 0$$

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} x\right) = A \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{L} x\right) \qquad n = 1,2,3,....$$

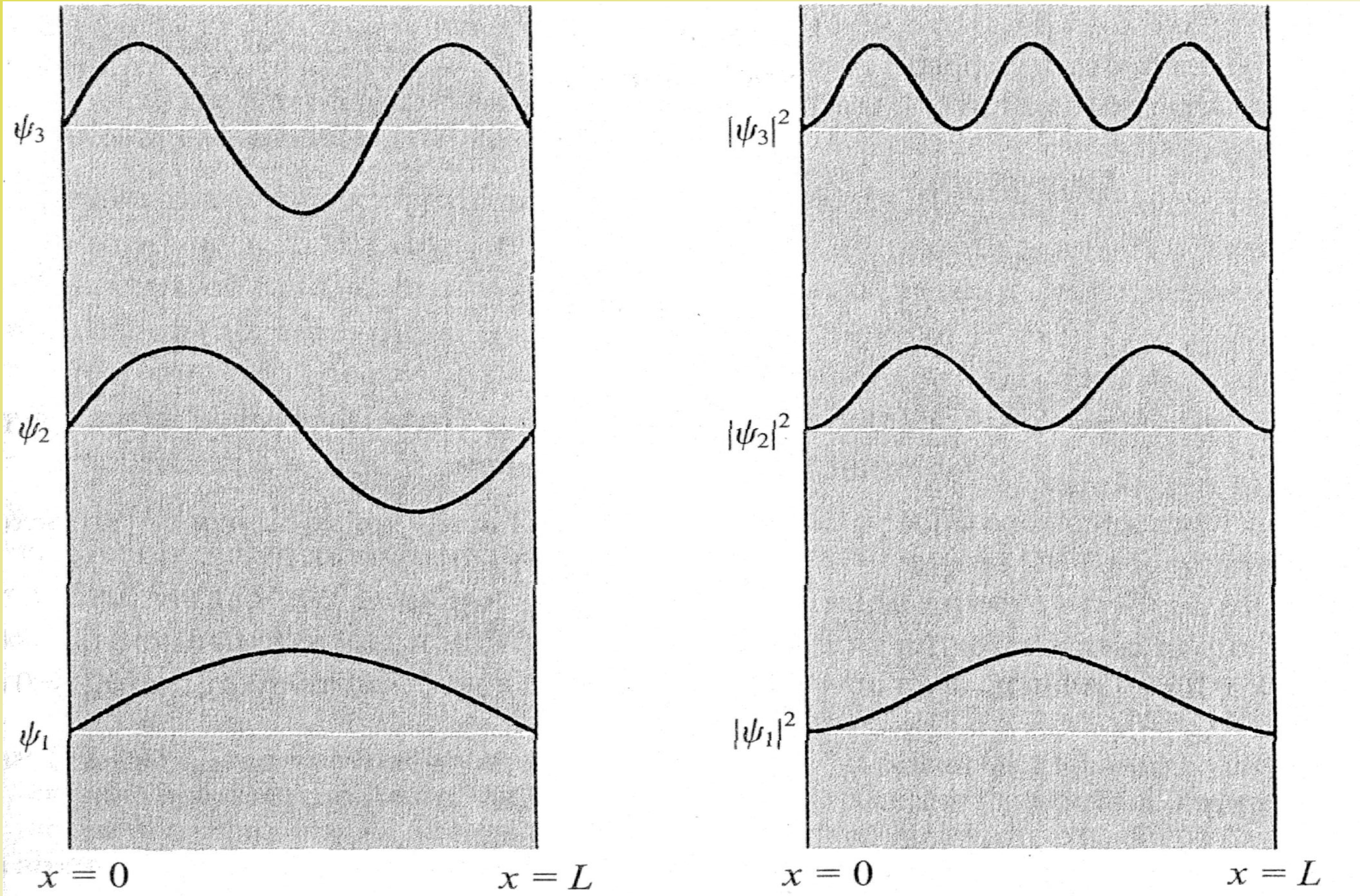
$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_0^L |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_0^L \sin\left(\frac{n \pi x}{L}\right)^2 dx = A^2 \frac{L}{2} = 1$$

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{L} x\right)} \qquad n = 1,2,3,....$$

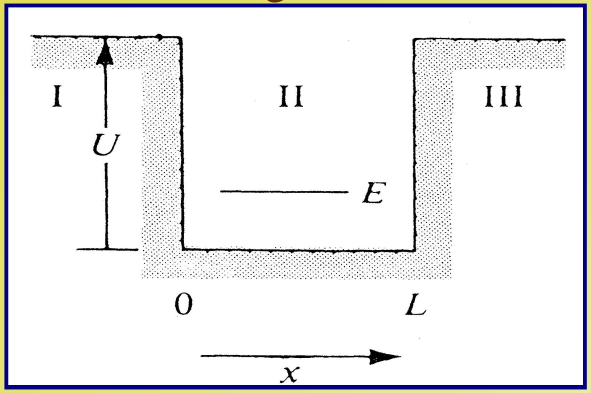
Σωματίδιο εγκλωβισμένο σε ένα κιβώτιο μήκους L είτε σε ένα φρέαρ δυναμικού εύρους L και απείρου βάθους



Στάσιμο κύμα σε χορδή μήκους L

Σωματίδιο εγκλωβισμένο σε ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού εύρους L και βάθους U

Ένα e⁻ - υλοκύμα – κύμα de Broglie εγκλωβισμένο σε ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού εύρους L και βάθους U περιγράφεται από την χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödiger



$$\boxed{\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2m\left(E-U\right)}{\hbar^2}\cdot\psi(x)}$$

$$\psi(x) = A\cdot e^{\left(\frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}x\right)} + B\cdot e^{-\left(\frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}x\right)}$$

[I] x < 0

$$\psi_{[I]}(x) = A\cdot e^{\left(\frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}x\right)}$$

[III] x > L

$$\psi_{[III]}(x) = B\cdot e^{-\left(\frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}x\right)}$$

[II] 0 ≤ x ≤ L

$$\psi_{[II]}(x) = F\cdot\sin\left(\frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}x\right) + G\cdot\cos\left(\frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}x\right)$$

Σωματίδιο εγκλωβισμένο σε ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού εύρους L και βάθους U

Οριακές Συνθήκες

x = 0 $\psi_{[I]} = \psi_{[II]}$ $\frac{d\psi_{[I]}}{dx} = \frac{d\psi_{[II]}}{dx}$

x = L $\psi_{[II]} = \psi_{[III]}$ $\frac{d\psi_{[II]}}{dx} = \frac{d\psi_{[III]}}{dx}$