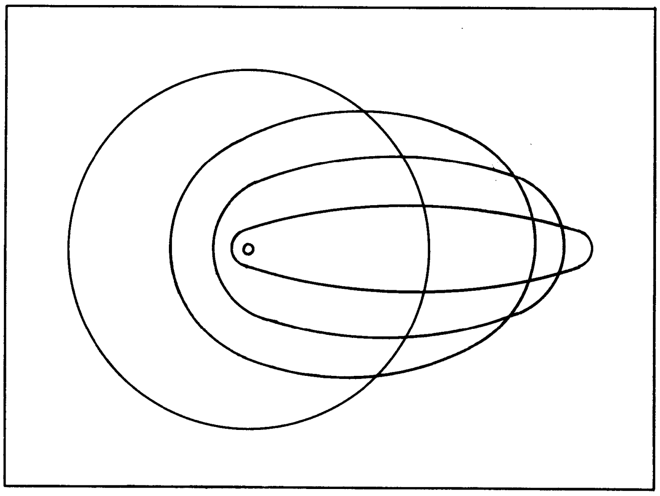
2.6 ΘΕΩΡΙΑ SOMMERFELD

Σήμερα ξέρουμε ότι το ατομικό πρότυπο του υδρογόνου κατά Bohr και γενικότερα η θεωρία του Bohr εξηγεί το φάσμα του ατόμου του υδρογόνου. Δεν μπορεί όμως να εξηγήσει τη «λεπτή υφή» του φάσματος του ατόμου του υδρογόνου, δηλαδή την ανάλυση κάθε φασματικής γραμμής, του κανονικού φάσματος του ατόμου του υδρογόνου, σε ένα αριθμό λεπτότερων γραμμών.

Ο Sommerfeld ύστερα από σειρά πειραμάτων και υπολογισμών κατέληξε, ότι το *ηλεκτρόνιο που κινείται σε μια ορισμένη κυκλική τροχιά στο ατομικό πρότυπο του Bohr, μπορεί επίσης να κινείται –εκτός της κυκλικής– και σε ομάδα ελλειπτικών τροχιών, που έχουν παραπλήσια ενεργεία με την κυκλική τροχιά.*



Σχήμα 2.2.
Σύμφωνα με το Sommerfeld οι ελλειπτικές τροχιές των ηλεκτρονίων έχουν κοινή εστία με την κυκλική τροχιά του ηλεκτρονίου.

Ο αριθμός των ελλειπτικών αυτών τροχιών είναι ορισμένος και έχουν, μαζί με την κυκλική, κοινή εστία τον πυρήνα του ατόμου. Η μεταπήδηση του ηλεκτρονίου από μια ελλειπτική τροχιά σε άλλη είναι η αιτία του διαχωρισμού των φασματικών γραμμών του φάσματος του ατόμου του υδρογόνου σε λεπτότερες γραμμές, όταν χρησιμοποιούμε φασματική συσκευή μεγάλης διαχωριστικής ικανότητας.

2.7 ΑΠΟΨΕΙΣ ΓΙΑ ΤΟ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΟ ΚΑΙ ΤΙΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΕΣ ΤΡΟΧΙΕΣ

Οι απόψεις του Rutherford, του Bohr και του Sommerfeld για τη δομή του ατόμου και για τη συμπεριφορά των πλανητοηλεκτρονίων δεν είναι σήμερα απολύτως ικανοποιητικές.

Το ηλεκτρόνιο δεν μπορούμε να το αντιμετωπίζουμε μόνο σαν ένα κινούμενο σωματίδιο, αλλά όπως παραδέχτηκε ο de Broglie, με την περίφημη **θεωρία των υλοκυμάτων** (1924), το ηλεκτρόνιο έχει σωματιδιακή και κυματική φύση. Το κινούμενο ηλεκτρόνιο παράγει τα **υλοκύματα**, το μήκος κύματος των οποίων δίνεται από τη σχέση:

$$\lambda = \frac{h}{m\,v} \tag{2.3}$$

όπου λ το μήκος κύματος των υλοκυμάτων, m η μάζα του ηλεκτρονίου και v η ταχύτητα του. Το h είναι η σταθερά Planck ($6{,}62 \times 10^{-34}$ J·s ή $6{,}62 \times 10^{-27}$ erg·s).

Οι παραπάνω απόψεις του de Brogue επιβεβαιώθηκαν το 1927 από τους Davisson και Germer, οι οποίοι έδειξαν ότι οι κενοί χώροι μεταξύ των ατόμων στους κρυστάλλους μπορούν να χρησιμεύσουν σαν διαφράγματα και να προκαλέσουν φαινόμενα περιθλάσεως· επειδή οι χώροι αυτοί είναι της ίδιας τάξεως μεγέθους του λ στην εξίσωση de Broglie. Έτσι κατά το «βομβαρδισμό» ενός κρυστάλλου με δέσμη ηλεκτρονίων παρατηρούνται φαινόμενα περιθλάσεως που σε μια φωτογραφική πλάκα φαίνονται σαν σκοτεινοί και φωτεινοί διαδοχικοί κύκλοι.

Με βάση την υλοκυματική θεωρία του de Broglie, ο Schrödinger ανάπτυξε μια γενικότερη θεωρία γνωστή σαν **κυματομηχανική**. Την κυματομηχανική θεωρία την επέκτεινε ο Heisenberg και την ονόμασε **κβαντομηχανική**.

Οι θεωρίες αυτές παραδέχονταια ότι το φορτίο του ηλεκτρονίου δεν περιορίζεται, δεν είναι συγκεντρωμένο, στη μάζα του, αλλά εκτείνεται στο γύρω της μάζας χώρο και σχηματίζει αυτό που είναι γνωστό σαν **ηλεκτρονικό νέφος**. Η πυκνότητα του ηλεκτρονικού νέφους σε κάθε σημείο γύρω από τη μάζα του ηλεκτρονίου είναι ανάλογη του τετράγωνου μιας κυματικής συναρτήσεως γνωστής σαν **συνάρτηση ψ**.

Η τιμή της συνάρτησης ψ δίνεται από τη γνωστή εξίσωση Schrödinger.

2.8 ΚΥΜΑΤΙΚΗ ΕΞΙΣΩΣΗ SCHRÖDINGER

Στο σύστημα των καρτεσιανών συντεταγμένων (άξονες x, y, z) η εξίσωση Schrödinger έχει τη μορφή:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2\, m\, E_k}{h^2}\,\psi = 0 \tag{2.4}$$

όπου m η μάζα του ηλεκτρονίου και h η σταθερά του Planck. Αν στην εξίσωση (2.4) αντικαταστήσουμε την παράσταση:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}$$

με το γινόμενο $\nabla^2\psi$ προκύπτει η εξίσωση:

$$\nabla^2\psi + \frac{8m\,\pi^2 E_k}{h^2}\,\psi = 0 \tag{2.5}$$

όπου εκτός από τα σύμβολα m και h που είναι γνωστά, το E_k είναι η κινητική ενέργεια του ηλεκτρονίου. Η παράσταση ∇^2 είναι γνωστή ως **τελεστής Laplace**.

2.9 ΕΞΑΓΩΓΗ ΤΗΣ ΕΞΙΣΩΣΕΩΣ SCHRODINGER

Η κυματική συνάρτηση ψ του ηλεκτρονίου είναι συνάρτηση της αποστάσεως χ, του χρόνου t και του μήκους κύματος λ, δηλαδή:

$$\psi = f(x, t, \lambda) \tag{2.6}$$

Η εξίσωση που συνδέει τη συνάρτηση ψ με την απόσταση x, με άλλα λόγια η εξίσωση που δίνει την πυκνότητα του ηλεκτρονικού νέφους σε ορισμένη απόσταση από τον πυρήνα ή την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε απόσταση x από τον πυρήνα, είναι ανάλογη με την εξίσωση που περιγράφει την αρμονική κίνηση:

$$\psi = A\ \eta\mu(\omega t + \varphi) \tag{2.7}$$

όπου ω η γνωστή γωνιακή ταχύτητα, φ η γωνία φάσεως της κινήσεως και A το μέγιστο πλάτος.

Για φ = 0 έχουμε:

$$\psi = A\ \eta\mu\ \omega t \tag{2.8}$$

Αν αντικαταστήσουμε τη γωνιακή ταχύτητα με $\frac{2\pi}{T}$, (T = περίοδος) προκύπτει η σχέση:

$$\psi = A\ \eta\mu \frac{2\pi}{T} t$$

επειδή όμως χ = vt και $T = \frac{\lambda}{v}$, όπου v ταχύτητα, η παραπάνω εξίσωση παίρνει τη μορφή:

$$\psi = A\ \eta\mu \frac{2\pi}{\lambda} x \tag{2.9}$$

Δηλαδή η ψ είναι τριγωνομετρική συνάρτηση του χ.

Αν διαφορίσουμε την εξίσωση (2.9) παίρνουμε:

$$\frac{d\psi}{dx} = A \frac{2\pi}{\lambda}\ \sigma\upsilon\nu \frac{2\pi}{\lambda} x$$

και

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = A \frac{2\pi}{\lambda} \left(- \frac{2\pi}{\lambda}\ \eta\mu \frac{2\pi}{\lambda} x \right) \tag{2.10}$$

και τελικά

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -A \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \eta\mu \frac{2\pi}{\lambda} x \tag{2.11}$$

Με συνδυασμό των εξισώσεων (2.9) και (2.11) προκύπτει η σχέση

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = - \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \psi$$

που τελικά μετασχηματίζεται στην εξίσωση: