

TEORIA KUANTIKO ZAHARRA(eta III)

LUIS BANDRES

Lehengo artikuluan ikusi genuenez, Bohr-en teoria dela-eta egoera irristagarri batean aurkitzen gara: erradiazioa estudiatzeko bide zeharo desberdin dauzkagu. Hauetako bakoitzak bere esparru berezia du. Bi bide hauek teoria elektrodinamiko klasikoak eta Bohr-en teoria dira. Noiz erabili behar dugu bide bat, eta noiz bestea? Har dezagun izararteko espazioa. Han elektroien baten orbitaren erradioa zentrimetro batkoa izan daiteke. Orduan, hemen nola egingo dugu lana, teoria klasikoaz ala Bohr-en teoriarekin?

Problema honen erantzuna Bohr-en egokitasun-printzipioak ematen digu. Honek zera dio: zenbaki kuantikoa infinitorantz doanean edozein teoria kuantiko baten

emaitzak, teoria klasikoak ematen duen emaitzara joan behar duela. Mekanika klasikoak ($v \ll c$ den kasurako alegia) hurbilketa bat den bezala, teoria mekanikoa eta elektromagnetikoa ere hurbilketa onak dira $n-k$ infinitorantz jotzen duenean. Beraz, lehen aipatutako kasuan, Bohr-en teoriak emango digu ebazpen zehatza, baina teoria klasikoak ematen diguna hurbilketa guztiz ona da.

Orbita zirkular batean higitzen ari denean zatiki kargatu batek, erradiatzen duen maiztasuna, teoria klasikoaren arabera, zatikiaren errotazio-maiztasuna bezainbatekoa da. Beraz, bide klasikoetik Bohr-en teoriak zilegitzat ematen edo permititzen duen edozein orbitari dagokion erradiazioaren

maiztasuna aurkitzeko, aski da lehenengo artikuluan ikusitako (14). eta (15). ekuazioetatik r ezabatuz w ateratzea.

$Z=1$ kasuari dagokiona hauexek da:

$$w = \frac{m_r e^4}{16\pi^2 \epsilon_0 n^3 h^3} = \frac{m_r c^2 a^2}{n^3 h} \quad (25)$$

Erradiazioaren maiztasuna $w/2\pi$ da. Beraz,

$$v = \frac{w}{2\pi} = \frac{m_r c^2 a^2}{n^3 h} \quad (26)$$

Baten bat harritu egin daitezke, formula klasiko batean n zenbaki kuantikoa eta h Plancken konstantea agertzen direlako. Baina hori horrela da, erabiltzen ari garen orbitaren momentu angeluarra $n\hbar$ bait da. Orbita honek, klasikoki, ez du derrigorrezkoa izan behar, baina utzita dago.

Lortutako (26). ekuazioa eta Bohr-en teoriak emango zuen maiztasuna alderatzeko, kontsidera dezagun n orbitatik $n-1$ orbitara-ko trantsizio bat:

(23). ekuaziotik eta $Z=1$ denean,

$$v_{n-1, n} = \frac{m_r c^2 a^2}{2h} \left[\frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2} \right] = \frac{m_r c^2 a^2}{2h} \left(\frac{2n-1}{n^4 - 2n^3 + n^2} \right) \quad (27)$$

$n-k$ infinitorantz jotzen duenean, parentesia $\frac{2n}{n^4}$ -rantz doa. Beraz:

$$v_{n-1, n} \rightarrow \frac{m_r c^2 a^2}{n^3 h}$$

hau da, ondorio klasikoa bera lortzen da.

n orbita batetik $n-1$ orbita batetara doan trantsizio batean, Bohr-en teoriaren bidez lortutako maiztasuna bi orbita horien errotazio-maiztasunen artean aurkitzen da. Maiztasun hori lortzeko ondoko desberdintzak erabili behar ditugu:

$$\frac{m_r c^2 a^2}{n^3 h} < \frac{m_r c^2 a^2}{2h} \left(\frac{2n-1}{n^4 - 2n^3 + n^2} \right) <$$

$$< \frac{m_r c^2 a^2}{(n-1)^3 h} \quad (28)$$

edo

$$n^3 > \frac{2(n^4 - 2n^3 + n^2)}{2n-1} > (n-1)^3 \quad (28')$$

Teoria klasikoaren arabera, elektroiak, n orbitatik n-1 orbitara pasatzerakoan, espiral jarraitu bat betetzen du eta emititzen duen erradiazioaren maiztasuna $m_r c^2 a^2 / n^3 h$ -tik $m_r c^2 a^2 / (n-1)^3 h$ -raino jaierai aldatuz doa. Bohr-en teorian orbita bat-batean aldatzen da eta emititutako fotoiak (27) ekuazioan tarteko maiztasuna dauka.

Bi maiztasun klasikoaren arteko zatidura zera da: $(n-1)^3/n^3 \approx 1-3/n$. Bohr-en maiztasunaren eta n orbitarako klasikoaren arteko erlazioa hau da:

$$\frac{2n^4 - 4n^3 + 2n^2}{2n^4 - n^3} \approx \frac{2n-4}{2n-1} \approx 1 - \frac{3}{2n}$$

Beraz, Bohr-en maiztasuna bi maiztasun klasikoaren erdian aurkitzen da.

Lehen aipatutako adibidean, ia zentimetro bateko erradioko orbitari dagokion n zenbakia (17) ekuaziotik atera dezakegu:

$$n = \left(\frac{r}{5,29177 \times 10^{-9} \text{ cm}} \right)^{1/2} \approx 13,747$$

hau, zenbaki oso hurbilena da.

Pentsa daitekeen bezala, doi-doi zentimetro bateko orbita ez da derrigor utzia izan behar:

n = 13,747 denean erradioa 1,00004 cm-koa da eta n = 13,746 denean erradioa 0,99989 cm-koa da.

orbita eliptikoak

Lehen aipatutako eta estudiatutako kasuetan n=1 kasuko trantsizioak hartu ditugu kontutan, soil-soilik. Baina, n ≠ 1 diren kasuak gertatzen eta ikusiak izan dira espektro atomikoetan. Zer dio horri buruz egokitasun-printzipioak?. Bere arabera, trantsizio horietan emititzen diren maiztasunek, n → ∞ limitean, teoria klasikoak ematen duen zenbait maiztasunetara jo beharko lukete.

Ikus dezagun limite hori (23) ekuaziotik eta z=1 denerako).

$$v_{n-\delta n, n} = \frac{m_r c^2 a^2}{2 h} \left[\frac{1}{(n-\delta n)^2} - \frac{1}{n^2} \right] = \frac{m_r c^2 a^2}{2 h} \left[\frac{2n\delta n - (\delta n)^2}{n^4 - 2n^3\delta n + n^2(\delta n)^2} \right] \quad (29)$$

edo

$$\lim_{n \rightarrow \infty} v_{n-\delta n, n} = \frac{m_r c^2 a^2 \delta n}{n^3 h} \quad (30)$$

Beraz, $n \rightarrow \infty$ limitean n -tik $(n-\delta n)$ -rainoko trantsizioetan emititzen diren maiztasunak, n -tik $(n-1)$ -rainokoaren oinarrizko maiztasunaren multiplo osoak (hots, harmonikoak) dira. Baina, teoria klasikoaren arabera, orbita zirkular batean dagoen partikula batek oinarrizko maiztasuna emititzen du soilik; edozein ardatz baten gainetik dagoen oszilazioa (hots orbita zilegiak zirkularrak direla diona, eta ez beste) egokitasun-printzipioaren aurka dago, baldin orbita zirkular batetik $\delta n > 1$ den beste orbita batera trantsizioak ematen badira behintzat. Korapilo hau askatzeko beste hipotesi bat egin zen orbita zirkularrekin batera orbita eliptikoak ere zilegiak direla onartuz. Hipotesi hau onartzen bada, $\delta n > 1$ -ko trantsizioetan zegoen zailtasuna gaindituta gelditzen da; edozein ardatz baten gainetik dagoen oszilazioa ez da guztiz sinusoidala baldin partikula orbita eliptiko batean higitzen bada; beraz, harmonikoak agertuko dira. Guzti honerkin $\delta n > 1$ -ko trantsizioak orbita eliptiko batetik sortu behar direla pentsa daiteke. Teoria kuantikoaren hizkuntzez: trantsizioak orbita zirkular batetik edukitzea $\delta n = 1$ agintzen duen hautapen-erregela bete behar da.

Nahiz eta Bohr-en orbita eliptikoak kontutan hartu ez zituen, Rydberg-en formula eta R -en balioa lortu zituen. Hau zeragatik izan zen posible; Bohr-ek hartutako momentu angeluarren kuantizazioak emaitza berbera ematen duelako, efektu erlatibistak kontutan hartzen ez badira. Baina, atomo hidrogenoideen espektroak oso zehazki ikertzen direnean lerro bakoitza berez multzo bat dela ikusten da.

Multzo edo "multiplete" horietako bakoitzean uhin-luzera ia berdineko lerro bi edo gehiago agertzen da. 1916 urtean, Arnold Sommerfeld-ek egitura fin hau orbita eliptikoen ondorio moduan adierazi zuen.

Orbita eliptikoen ondorioa kualitatiboki honela uler daiteke: n zenbaki kuantikoaren balio bakoitzarentzat, ez dago n momentu angeluarreko orbita zirkular bakar bat, orbita eliptikozko multzo bat baizik; orbita eliptiko honen ardatz nagusiaren luzera orbita zirkularren diametroarena da, baina beren momentu angeluarrak orbita zirkularrena baino txikiagoak dira. Orbita eliptiko bakoitzaren momentu angeluarrak, orbita zirkularrena bezala, n -ren multiplo

osoa izan behar du. Orbita bakoitzaren momentu angeluarra $k\hbar$ bidez eman daiteke, $0 < k \leq n$ izanik; $k=n$ denean orbita zirkularra daukagu; $k=0$ kasua baztertu egiten da, alde batetik, ikusitako egitura finarekin ados egoteko eta bestetik, kasu horretako orbitan elektroiak nukleoaren kontra joko lukeelako (gaur egun dakigunaren arabera, nukleoa elektroi-eko garden samarra da eta elektroi-ek zeharka dezakete, baina garai hartan egindako argudioak logikoa zirudien $k=0$ orbita arbuia-tzeko). Beraz, elipse bakoitza bi zenbaki kuantikoren bidez adierazita dago: n , honek elipsearen ardatz nagusia finkatzen digu, eta k , honek elektroiaren momentu angeluarra emango digu.

Zuzenketa erlatibistak egiten ez badira, ardatz nagusi berdineko orbita guztiek energia berdina daukate. Beraz, n berdineko orbiten ardatz nagusi berdina baldin badute, teoria honek ematen duen ondorioa eta Bohr-en teoriarena ia ados egongo dira, gertatu behar zen bezala. Zuzenketa erlatibista egiten bada, exzentrikotasun handiko orbitetan elektroiak abiadura handiago bat daukate, nukleoaren hurbilagotik pasatzen direlako; orduan $\frac{1}{2} m v^2$ formula erabiltzea energia zineti-

koa aurkitzeko, beste kasuetan baino zehaztasun txikiagokoa da. Ondorioa hauxe da: n berdineko eta k desberdineko orbiten artean - energi diferentzia txiki bat. Sommerfeld-ek diferentzia hauek kalkulatu zituen, eta hidrogenoaren egitura finaren lerro espektral askoren adierazpena eman zitekeela aurkitu zuen. Edozein multiplete bateko lerro-kopuru aurkituarekin ados egoteko, Sommerfeld-ek $\Delta k = \pm 1$ hautapen erregela ezarri zuen edozein trantsiziotarako; erregela hau, nola ere bait, orbita zirkular batean hasten den trantsizio baten $\Delta n = 1$ erregelaren hedapen gisa kontsidera daiteke. $n=3$ eta $k=3$ orbita bateko elektroi batek egin dezakeen trantsizio bakarra $n=2$ eta $k=2$ orbita baterakoa da; baina $n=3$ eta $k=2$ orbita eliptiko bateko elektroi bat $n=2$ eta $k=1$ edo $n=1$ eta $k=1$ orbitara joan daiteke, adibidez.

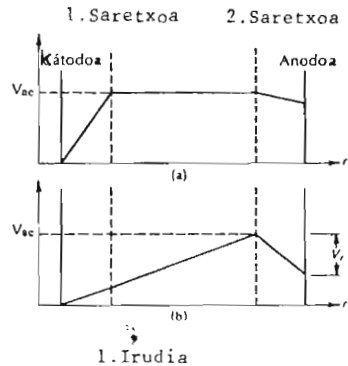
Zoritxarrez, Sommerfeld-en teoriak, Bohr-enak bezala, elektroi anitzeko atomoetan porrot egin zuen. Mekanika kuantikoak garapen handiago bat izan ondoren egitura finaren benetako 'adierazpena' Sommerfeld-ek markatutako bideetatik guztiz at zegoela ikusi izan zen. Sommerfeld-en adierazpenaren arrakasta txiripa bat zen. Halaz guz-

tiz ere, orbita eliptikoaren kon-
tzeptuak laguntza ederra ematen
du atomoen zenbait berezitasun
nolabait ikustatzeko.

frank eta hertz-en experimentua

Einstein-en $E=hf$ ekuazioa
onartzen bada erradiazio atomi-
koetan agertzen diren maiztasun
diskretuak energi mailen diskre-
tutasunaren froga bat dela ikusi
dugu. 1914. urtean James Franck-ek
eta Gustav Hertz-ek atomoen eta
elektroien arteko talkak erabili-
tzen dituen experimentu baten
bidez esandako energi mailen
diskretutasunaren froga zuzen
bat edukizuten. Nahiz eta, energi
transferentzian erradiazioak
parte hartzen, atomoen eta elek-
troien arteko talka ez elastiko-
etan azken hauek galtzen zuten
energi kopuru diskretutan egi-
ten zela frogatu zuten emaitzak.
Orduan, atomoetan dauden elektro-
ien energi mailak diskretuak zi-
rela argi eta garbi geratzen zen.
Experimentua dela eta, 1925. urtean
bi ikertzaile hauek Nobel saria
irabazi zuten.

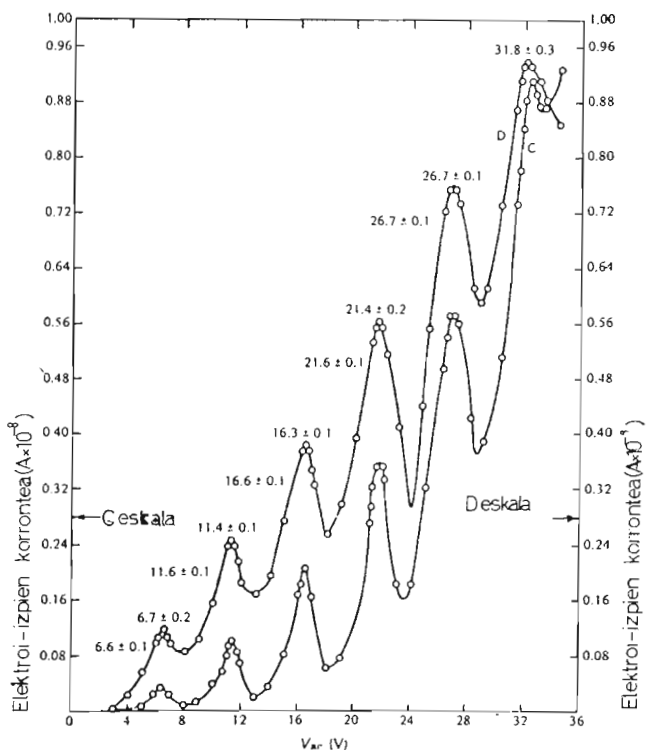
Experimentu honen funtsa eza-
gutzeko, ikus dezagun 1. irudia.
Merkuriozko lurrinez beterik da-
goen hodi batean elektroiak.



V_{acc} saretxo-potentzial batez
azeleratuta daude. Bigarren sa-
retxotik pasatu ondoren sare-
txoaren eta anodoaren arteko V_r
kontrako potentzial batek balaz-
tatzen ditu. Anodoaren zirkuituan
dagoen amperimetro batek anodo-
raino iristen diren elektroiak
neurtuko dizkigu. Lurrina izango
ez halitz, dakigun bezala eta -
edozein huts-hodi batetan gerta-
tzen denaren arabera, V_{acc} sare-
txo-potentzialaren edozein gehi-
kuntza batek bere korrontearen
gehikuntza ekarriko luke. Beste
horrenbeste gertatzen da lurri-
na dagoenean, baldin V_{acc} merku-
riozko atomo bat bere oinarriz-
ko egoetatik lehenengo egoera
exzitazitatua eramateko aski ez
bada. Baina V_{acc} handidagoa egi-
ten bada eta bere bidez elektro-
ien energia zinetikoa esandako
exzitatzeko behar den energia
mailaraino heltzen denean, elek-
troiek talka ez elastikoetan ener-

gia gal dezakete eta gasen atomoak exzita daitezke. Talka gertatu ondoren elektroiak ezin du v_c kontrako potentziala gainditu, eta horrela oso elektroi gutxi iristen da anodoraino;hots, korronea txikiagoa egiten da. Aldiz, v_{acc}

handiagotzen bada, korronea ere handiagotu egingo da. (ikus 2. irudia); baina v_{acc} balioa aski bada elektroiek batek lurritan atomoen kontra bi talka egin ahal izateko, korronea, berriz, txikiagoa egingo zaigu.



Irudian korrontearen erorketa-multzo bat ikus daiteke. Bi erorketen artean dagoen tartea $v_{acc}=5V$ -takoa da; honek zera esan nahi du: lurrin-atomo baten lehenengo egoera exzitatua oinarriko egoeratik 5 eV gorago egongodela, adibidez. Eraitza hau egingadako beste behaketekin ados dago: merkurioarentzat lehenengo egoera exzitatua 4,86 eV-tan dago.

Irudi beretik, beste bi ondorio ere ater-araz daitezke:

- a) korrontearen lehenengo erorketa ez da, doi-doi, 5V -tan gertatzen 6,6 V-tan baizik. Gainontzeko 1,6 V horiek kaltetuak diren lan-funtzioa adierazten digute.
- b) gertatzen diren korrontearerorketa guztiak merkuriorearen lehenengo egoera exzitatuari dagozkio.

Dirudenez, elektroiek lehenengo egoera exzitatuari dagozkion energia lortzen dutenean

beste edozein goragoko energi mailari dagokion energia hatzeman baino lehen merkuriorearen atomo bat edo baten kontra talka egiten dute. Hau gerta dadin, elektroiek 1. b irudian azaltzen den antzerako saretxo-potentzial geldoen bidez azeleratuak izan behar dira. Baina, potentzial azeleratzaileak 1. a irudian ikusten diren bezalakoa bada, elektroiek energia era azkarrago batez har dezakete eta beste energi maila batzuri dagozkien korrontearerorketak ikus daitezke.

Hertz-ek 1924. urtean, behaketa hauen eta lerro-espektroen arteko lotura agertarazteko merkuriorearen lurrinaren argi-espektroa ikertu zuen. Zenbait espektro-lerroren agerpena v_{acc} -ren balioz baldintzaturik zegoen. Lerro berezi bat agertzeko, v_{acc} tentsioaren balioak lerro berezi horri zegokion egoeraren energia eman ahal izan behar zuela ikusi zuen Hertz-ek. v_{acc} -ren balioa esandako mailaraino iristeko, atomo exzitatuek lerro bat emititzen zuten, oinarriko egoeran itzultzerakoan, hoski.