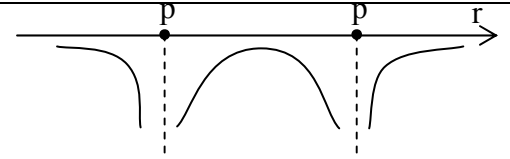
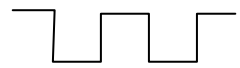


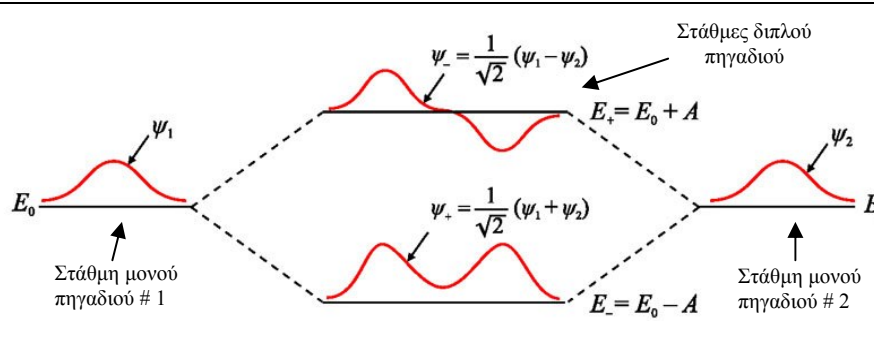
Μόρια: Η Κβαντική Θεωρία του χημικού δεσμού

I: Το πρόβλημα του διπλού πηγαδιού

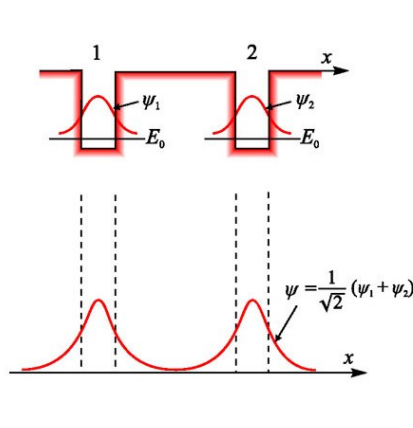
1. Η κίνηση υπό την επίδραση δύο ελκτικών κέντρων (≡ διπλό πηγάδι δυναμικού): Το βασικό πρόβλημα της μοριακής Φυσικής

 <p>Δυναμικό που «βλέπει» ένα ηλεκτρόνιο του μορίου του Υδρογόνου κατά μήκος της ευθείας που συνδέει τα δύο πρωτόνια.</p>	<p>ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ: Η κατανόηση της Φυσικής του χημικού δεσμού απαιτεί την – προσεγγιστική κατ’ ανάγκη – λύση της εξίσωσης Schrödinger ενός σωματιδίου που κινείται υπό την επίδραση δύο ελκτικών κέντρων, δηλαδή ενός συστήματος δύο γειτονικών πηγαδιών που αναπαριστώνται σχηματικά ως δύο τετραγωνικά πηγάδια.</p> 
--	--

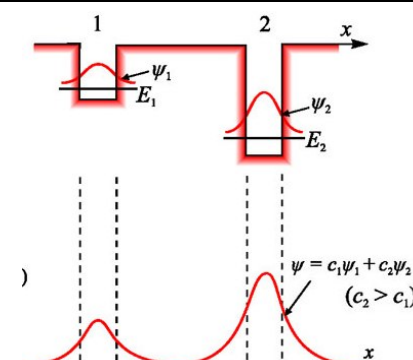
2. Το ενεργειακό διάγραμμα και οι κυματοσυναρτήσεις ενός διπλού πηγαδιού: Τα αποτελέσματα μιας προσεγγιστικής λύσης

 <p>Στάθμη μονού πηγαδιού # 1</p> <p>Στάθμη μονού πηγαδιού # 2</p> <p>Στάθμες διπλού πηγαδιού</p> <p>$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 - \psi_2)$</p> <p>$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_2)$</p> <p>$E_+ = E_0 + A$</p> <p>$E_- = E_0 - A$</p>	<p>ΚΑΝΟΝΑΣ: Κατά την προσέγγιση δύο ίδιων μονών πηγαδιών προς σχηματισμό ενός διπλού, από κάθε στάθμη του μονού πηγαδιού προκύπτει μια <u>δύαδα σταθμών</u> του διπλού, συμμετρικά τοποθετημένων ως προς την αρχική και με κυματοσυναρτήσεις ψ_{\pm} ίσες με την <u>άρτια</u> ή την <u>περιττή συνένωση</u> των κυματοσυναρτήσεων ψ_1 και ψ_2 των δύο μονών πηγαδιών.</p>
--	--

3. ...η εξήγησή τους

 <p>$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_2)$</p>	<p>Στη γειτονιά του κάθε πηγαδιού η κυματοσυνάρτηση του διπλού πηγαδιού είναι πρακτικά η ίδια με την κυματοσυνάρτηση αυτού του πηγαδιού, αφού σ’ αυτή την περιοχή η επίδραση του άλλου πηγαδιού είναι αμελητέα. Η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης του διπλού πηγαδιού θα έχει λοιπόν, λόγω συμμετρίας, τη μορφή $\psi_+ = (\psi_1 + \psi_2)/\sqrt{2}$ (άρτια συνένωση των ψ_1, ψ_2) ενώ η περιττή συνένωση, $\psi_- = (\psi_1 - \psi_2)/\sqrt{2}$, θα δίδει την κυματοσυνάρτηση της 1^{ης} διεγερμένης στάθμης του διπλού πηγαδιού. Οι ενέργειες $E_0 \mp A$ των δύο σταθμών προκύπτουν από τον τύπο της κβαντομηχανικής μέσης τιμής $\langle E \rangle = \int \psi^* (\hat{E}\psi) dx$, όπου \hat{E} είναι ο τελεστής της ενέργειας και $\psi = (\psi_1 \pm \psi_2)/\sqrt{2}$ οι κυματοσυναρτήσεις του διπλού πηγαδιού.</p>
--	---

4. ...και η γενίκευση για ανισόβαθα πηγάδια

 <p>$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ ($c_2 > c_1$)</p>	<p>Η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης του διπλού πηγαδιού θα είναι μια <u>ανισοβαρής υπέρθεση</u> των κυματοσυναρτήσεων των μονών πηγαδιών, με μεγαλύτερο βάρος στην κυματοσυνάρτηση του βαθύτερου πηγαδιού αφού είναι ενεργειακά συμφερότερο για το σωματίδιο να βρίσκεται περισσότερο εκεί.</p>
--	--