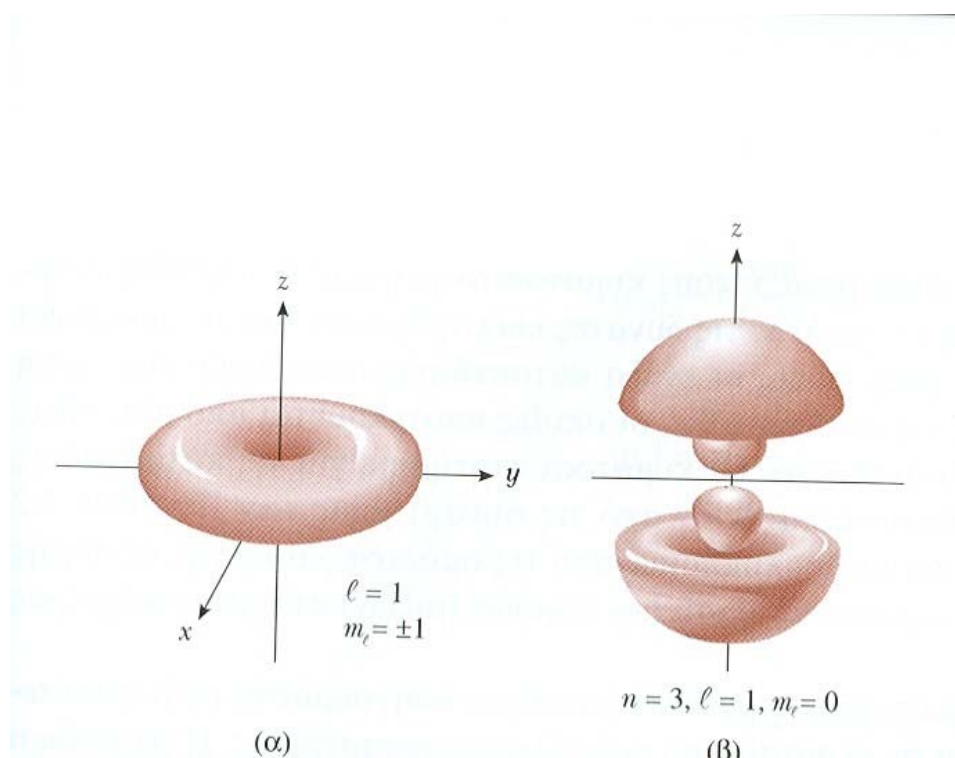


Το Κβαντικό Ατομικό Μοντέλο

Γιατί δεν το κατανοούν οι μαθητές του Λυκείου και όχι μόνο;



Ασημίνα Μ. Κοντογεωργίου

Το Κβαντικό Ατομικό Μοντέλο

Γιατί δεν το κατανοούν οι μαθητές του Λυκείου και όχι μόνο;

Εκδότης: Ασημίνα Κοντογεωργίου – Παπανικολάου

Άνω Λεχώνια

Βόλος

38500

ISBN: 978-960-92999-2-3

Το παράθυρο που μας ανοίγουν οι αισθήσεις στον κόσμο είναι πραγματικά πολύ μικρό, διότι πολλά από τα φυσικά φαινόμενα που συμβαίνουν στο σύμπαν είναι πέρα από την άμεση εμπειρία μας κυρίως όταν είναι κοσμολογικά, γεωλογικά ή αφορούν τον μικρόκοσμο. Η ενασχόληση της επιστήμης με αυτόν τον προηγούμενο αιώνα καθορίζει κυριολεκτικά την πορεία της. Έτσι σήμερα η επιστημονική κοινότητα γνωρίζει και αποδέχεται πλέον, έπειτα από συζητήσεις, διαμάχες και πολλές προσπάθειες στο θεωρητικό και στο πειραματικό πεδίο ότι «οι κλασικοί νόμοι – οι νόμοι του ‘δικού μας’ χειροπιαστού μακρόκοσμου – δεν είναι παρά μια ωχρή αντανάκλαση, μια ακραία οριακή περίπτωση, των ‘κβαντικών νόμων’ που κυβερνούν τον ατομικό μικρόκοσμο» (Τραχανάς 1981).

Επιπλέον η ανάπτυξη της Κβαντικής Θεωρίας άνοιξε νέα προοπτική θεώρησης του φυσικού κόσμου από την ανθρώπινη νόηση. Ο ντετερμινισμός εκτοπίστηκε και το μέλλον δεν μπορεί πλέον να προβλεφθεί με βεβαιότητα. Ο χρόνος είναι μη αντιστρεπτός, αφού τα γεγονότα στον φυσικό κόσμο συμβαίνουν με τρόπο στοχαστικό,

μη καθορισμένο από το παρελθόν. Το αποτέλεσμα μιας μέτρησης δεν μπορεί να αναχαιτίσει την τυχαιότητα με όσο μεγάλη προσοχή και ακρίβεια και αν αυτή εκτελεσθεί. Οι επιστήμονες μπορούν να μιλούν ακόμη για κίνηση, αλλά δεν μπορούν να προσδιορίσουν πώς ένα αντικείμενο του μικρόκοσμου θα κινείται με ακρίβεια πάνω σε ένα δρόμο – τροχιά. Σε διαφορετικούς επιστημονικούς χώρους ο διάλογος για το μυστήριο της σύνδεσης του κύματος και του σωματιδίου στην περιγραφή της συμπεριφοράς των απειροελάχιστων δομικών λίθων του ατόμου είναι ακόμη ανοικτός.

Ο αναγωγικός χαρακτήρας της Κλασικής Φυσικής Θεωρίας δεν μπορεί να εφαρμοσθεί στο μικρόκοσμο. Το υποκείμενο παρατηρητής, η συσκευή μέτρησης, το παρατηρούμενο αντικείμενο και η μεταξύ τους αλληλεπίδραση συνιστούν μια μη διαχωρίσιμη ολότητα, που δεν μπορεί να αναλυθεί στα μέρη που την αποτελούν χωρίς απώλεια πληροφορίας. Η διενεργούμενη κατά τη μέτρηση αναγκαία μεθοδολογική τομή αποκρύπτει την ‘πραγματική φύση’ της κβαντικής ολότητας, της οποίας η πλήρης γνώση καθίσταται ανέφικτη (Χατζηδάκη και Καρακώστας 2003).

Ως ερευνητικό αλλά και διδακτικό αντικείμενο η Κβαντική Θεωρία όταν περιγράφει και ερμηνεύει τον μικρόκοσμο αποτελεί σημείο συνάντησης της Φυσικής και της Χημείας. Η μελέτη των βασικών νόμων της είναι απαραίτητη για να διερευνηθούν οι ιδιότητες της ύλης και ιδιαίτερος η δομή και η μορφή των ατόμων των χημικών στοιχείων εφ’ όσον αποτελούν δομικές της μονάδες. Η κατανόηση της ατομικής δομής έχει αξία για τους φυσικούς, τους μηχανικούς, τους χημικούς και τους βιολόγους και επομένως πρέπει να έχει μια μεγάλη επίδραση στην κοινωνία.

Αν ληφθεί υπόψη ότι οι σημερινοί μαθητές και φοιτητές θα είναι οι αυριανοί επιστήμονες αλλά και πολίτες σε μια κοινωνία, όπου η ανάπτυξη της τεχνολογίας βασισμένης στην σύγχρονη φυσική θεωρία θα κυριαρχεί στη ζωή τους, θεωρούμε ότι είναι απαραίτητο να είναι ενημερωμένοι για τις βασικές αρχές της αλλά και τις φιλοσοφικές της προεκτάσεις. Η αφετηρία για την ενεργητική οικοδόμηση αυτής της γνώσης μπορεί να είναι η μελέτη του ατόμου και κατ’ επέκταση του ατομικού μοντέλου, που δομείται σύμφωνα με τις αρχές της Κβαντομηχανικής.

Η Κβαντική Θεώρηση του Ατόμου (ΚΘΑ) αποτελεί πηγή πολλών δυσκολιών και προσωπικών νοητικών παραστάσεων εκ μέρους των διδασκομένων, που στην συνέχεια αδυνατούν να προσεγγίσουν την επιστημονικά τεκμηριωμένη γνώση που αφορά στην κρυσταλλική και μοριακή δομή, στους χημικούς δεσμούς, τις χημικές αντιδράσεις, στην αλληλεπίδραση της ύλης με την ακτινοβολία, στην μεταφορά της πληροφορίας μέσα

από την ύλη και πολλά άλλα επιτεύγματα της ανθρώπινης σκέψης και προσπάθειας. Ως θετική συνεισφορά για την επίλυση των προβλημάτων αυτών υποστηρίζεται συχνά η αξιοποίηση των δυνατοτήτων του Η/Υ για την οπτική αναπαράσταση των ατόμων σύμφωνα με τους νόμους που διέπουν τον κβαντικό μικρόκοσμο.

Στο **1^ο Κεφάλαιο**, *Ο μικρόκοσμος: Θεωρητική προσέγγιση και διδακτική πράξη* περιγράφονται οι λόγοι για τους οποίους ο μικρόκοσμος και ιδιαίτερα η κβαντική του προσέγγιση αποτελεί το ερευνητικό πεδίο συνάντησης των φυσικών και των χημικών. Επισημαίνεται δε, ότι είναι απαραίτητη προϋπόθεση η διδακτική παρουσίαση της ΚΘΑ να προκύψει ως αποτέλεσμα αλληλεπίδρασης και συνεργασίας των δύο επιστημονικών χώρων, όπως αρχίζει να συμβαίνει σήμερα και για σχετικά ερευνητικά ερωτήματα. Στη συνέχεια επιχειρείται εκτενής βιβλιογραφική ανασκόπηση για την παρουσίαση των ερευνών που αφορούν τις δυσκολίες των μαθητών και των φοιτητών στην κατανόηση της ατομικής δομής της ύλης και κυρίως της ΚΘΑ και καταγράφονται οι αυθόρμητες νοητικές τους παραστάσεις για τις βασικές έννοιες και αρχές. Το κεφάλαιο κλείνει με τις προτάσεις για την επίλυση των διαπιστωμένων μαθησιακών προβλημάτων, που αναφέρονται στην ΚΘΑ.

Το **2^ο Κεφάλαιο**, *Το άτομο: Ανάλυση του επιστημονικού περιεχομένου*, περιλαμβάνει ανάλυση του γνωστικού αντικειμένου με τη διδακτική προσέγγιση του οποίου ασχολείται η διατριβή. Έχει διαπιστωθεί ότι ο ρόλος των μοντέλων και των επιστημονικών θεωριών παρουσιάζεται με τρόπο που ενισχύει την σύγχυση στους διδασκόμενους. Επιπλέον η Κβαντική Θεωρία περιγράφει το μικρόκοσμο χρησιμοποιώντας αρχές, που ενώ επαληθεύονται από τα πειραματικά δεδομένα είναι μακριά από την αντίληψη του φυσικού κόσμου μέσω των αισθήσεων.

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται προσπάθεια να παρουσιασθούν τα ιστορικά ατομικά μοντέλα και η παλιά Κβαντική Θεωρία που διατυπώθηκε κυρίως από τον Bohr δίνοντας

έμφαση στο ατομικό του μοντέλο. Ακολούθως αναλύονται οι βασικές αρχές της Κβαντικής Φυσικής και οι εμπλεκόμενες έννοιες δίνοντας έμφαση στα σημεία που έχει διαπιστωθεί ότι οδηγούν τους διδασκόμενους στη δημιουργία παρανοήσεων και αυθόρμητων νοητικών παραστάσεων. Επίσης παρουσιάζονται οι απόψεις των ερευνητών σχετικά με το ερώτημα αν πρέπει να διδαχθεί η ΚΘΑ ποιοτικά και με ποια διδακτική μέθοδο στις τελευταίες τάξεις του Λυκείου και τα πρώτα Πανεπιστημιακά έτη. Στην συνέχεια ανακεφαλαιώνοντας τους ορισμούς των βασικών εννοιών και αρχών υπογραμμίζεται η θετική συμβολή της οπτικοποίησης του ατόμου στην επεξεργασία των εννοιολογικών εμποδίων που συνδέονται με αυτές. Το συμπέρασμα του κεφαλαίου είναι ότι πρέπει να αξιοποιηθούν οι ΤΠΕ, ώστε η ΚΘΑ να παρουσιασθεί ποιοτικά στους μαθητές και τους φοιτητές με ένα τρόπο περισσότερο προσιτό σε αυτούς.

Ο μικρόκοσμος:

Θεωρητική προσέγγιση και διδακτική πράξη

1.1 Εισαγωγή

Η πολυπλοκότητα της φύσης αποτελούσε από την αρχαιότητα μια πρόκληση για τους φιλοσόφους και στην συνέχεια τους επιστήμονες που προσπαθούσαν να ερμηνεύσουν τα ποικίλα φαινόμενα. Για όλους αυτούς οι θεωρίες που αφορούσαν το μικρόκοσμο αποτελούσαν την αρχή μιας ελπιδοφόρας πορείας, διότι έδειχναν πως η φύση σε μικρή κλίμακα είναι πολύ πιο τακτοποιημένη από τον κόσμο της καθημερινής μας εμπειρίας.

Η ανακάλυψη της σωματιδιακής μορφής του κόσμου φαίνεται συναρπαστική για δύο κυρίως λόγους:

- ▶ Πρώτο, λόγω του μεγέθους των ατόμων, οι μετρήσεις των ιδιοτήτων τους είναι συνήθως έμμεσες και συνεπάγονται απαραίτητα ευφυείς χειρισμούς μετρήσεων μακροσκοπικής κλίμακας, προκειμένου να συναχθούν συμπεράσματα για τις ιδιότητες των μικροσκοπικών σωματιδίων.
- ▶ Δεύτερο, η ιστορική εξέλιξη των ιδεών σχετικά με την ατομικότητα δείχνει σαφώς την πραγματική πορεία την οποία ακολουθεί η πρόοδος της επιστήμης. *‘Αυτή η πορεία δεν είναι πάντα ευθεία και συχνά απαιτεί την σύμπραξη της Φυσικής, της Χημείας και των Μαθηματικών, καθώς και τη σύγκλιση πολλών διαφορετικών προσεγγίσεων διερεύνησης’* (Serway et al. 2001).

Ο νομπελίστας Richard Feynman είπε κάποτε ότι αν ένας κατακλυσμός εξαφάνιζε όλη την επιστημονική γνώση και άφηνε μόνο μια φράση, η φράση αυτή θα ήταν: ‘Όλα τα πράγματα γίνονται από άτομα - μικρά σωματίδια που περιστρέφονται ατέρμονα, έλκοντας το ένα το άλλο όταν βρίσκονται σε μια μικρή απόσταση, αλλά απωθώντας το ένα το άλλο όταν εφάπτονται’. Η ατομική θεωρία είναι, επομένως, εξαιρετικά κρίσιμη και βασική για την επιστήμη. Σήμερα μας περιβάλλει μια τεχνολογία, η οποία βασίζεται στη γνώση και χρήση των ατόμων, για τα οποία για πρώτη φορά ο Λεύκιππος υποστήριξε: ‘Τίποτα άλλο δεν υπάρχει παρά μόνο τα άτομα και το κενό’. Εντούτοις δύομισι χιλιάδες χρόνια και περισσότερο μετά, ο ατομικός μικρόκοσμος παραμένει μυστηριώδης μόνο και μόνο επειδή απέχει έξι ή επτά τάξεις μεγέθους από την ανθρώπινη αντιληπτική ικανότητα.

Είναι όμως πλέον γενικά αποδεκτό ότι οι μεγάλες επιτυχίες της σημερινής επιστήμης και μηχανικής είναι στενά δεμένες με την αυξανόμενη κατανόηση του σύμπαντος σε ολοένα και μικρότερες κλίμακες. Η ηλεκτρονική, οι υπολογιστές, η βιοτεχνολογία, ο σχεδιασμός φαρμάκων και ένας τεράστιος αριθμός άλλων εφευρέσεων βασίζονται στη γνώση της Κβαντομηχανικής και των αλληλεπιδράσεων ανάμεσα στα άτομα και τα μόρια. Η οργάνωση της ύλης έχει συχνά μεγάλη σημασία, η ανακατάταξη και ο ανασυνδυασμός των ατόμων έχει κρίσιμη και ρυθμιστική σημασία για την ανθρώπινη ζωή.

1.2 Ο μικρόκοσμος ερευνητικό πεδίο συνάντησης της Φυσικής και της Χημείας

1.2.1 Από την πλευρά της Ιστορίας της Επιστήμης

Ο μικρόκοσμος και οι επιστημονικές θεωρίες που τον περιγράφουν αποτελούν ένα σημαντικό πεδίο συνάντησης της Φυσικής και της Χημείας. Όμως, ενώ στο κέντρο κάθε χημικής δραστηριότητας βρίσκεται η μικροσκοπική θεώρηση των φαινομένων που εμπλέκονται, η Ατομική Φυσική εκφράζει μόνο μία μορφή προσέγγισης του φυσικού κόσμου από τις πολλές που συναντώνται στο χώρο της Φυσικής. Η κατανόηση της Χημείας βασίζεται κυρίως στην αισθητοποίηση του αόρατου και αυτού που δεν μπορείς να αγγίξεις. Είναι επομένως λογικό οι περισσότερες έρευνες για τον μικρόκοσμο και στον τομέα της Διδακτικής να προέρχονται από το χώρο της Χημείας (Albanese and Vicentini 1997, Campbell 2000, MacKinnon 1999, Coll and Treagust 2003, Harrison and Treagust 1996, Ogilvie 1990, Scerri 2000a, b Scerri 2001, Tsaparlis 2001, Tsaparlis and Papafotis 2002).

Στο κέντρο του ενδιαφέροντος της συνάντησης των δύο επιστημών βρίσκεται η ΚΘΑ, που από το 1927 περίπου που διατυπώθηκε, κατόρθωσε να ερμηνεύσει όλα τα σχετικά πειραματικά δεδομένα. Η ακρίβεια των πληροφοριών που μας δίνει, περιορίζεται μόνο από τις υπολογιστικές μας δυνατότητες.

Από τα μέσα του 19ου αιώνα με τη θεμελίωση της Θερμοχημείας φάνηκε ο δισταγμός των χημικών να συμφωνήσουν με την κινητική προσέγγισή της, που οδηγούσε στη σύνδεση με τη Φυσική η οποία πρώτη είχε αποδεχθεί την ύπαρξη των ατόμων και των μορίων. Οι χημικοί προτιμούσαν την θερμοδυναμική (μακροσκοπική) προσέγγιση της Θερμοχημείας, που την απομάκρυνε από οποιαδήποτε εποπτική αναπαράσταση του χημικού φαινομένου και των αιτίων του.

Στις αρχές του 20ου αιώνα, η ραδιενέργεια θα οδηγήσει τις σχέσεις Φυσικής και Χημείας προς ένα δρόμο χωρίς επιστροφή. Το χημικό στοιχείο χάνει την ταυτότητά του και συγκεντρώνει έναν απροσδιόριστο αριθμό διακριτών ισοτόπων. Η ερμηνεία των ιδιοτήτων του θεωρείται ότι ανήκει 'φυσιολογικά' στη Φυσική, την επιστήμη των αρχών. Η Χημεία ορίστηκε ως τεχνική στην υπηρεσία των ερωτημάτων που έθεσαν οι φυσικοί. Η Φυσική προσδιορίζεται από μια νέα πρόκληση: να προχωρήσει πέρα από τα παρατηρήσιμα φαινόμενα, σε μια άλλη πραγματικότητα που θα επιτρέπει την ερμηνεία τους.

Το 1912 ο Bohr ξεκίνησε μια εργασία που θα οδηγήσει στο πρώτο ατομικό μοντέλο, σε μια προσπάθεια να συμφιλιώσει τους γενικούς νόμους της μηχανικής με την ιδιαιτερότητα του χημικού στοιχείου. Η δημιουργία του ατόμου του Bohr ανήκει στην ιστορία της Φυσικής. Έτσι, όμως αποκρύπτεται ο ρόλος που έπαιξαν στην ιστορία, αν όχι οι χημικοί, τουλάχιστον η γνώση που αυτοί παρήγαγαν σχετικά με τα άτομα και

τα μόρια. Ο Bohr δεν σκόπευε στο να υποτάξει τη Χημεία στη μηχανική, αλλά σε μια ταυτόχρονη υπέρβαση της Μηχανικής και της φαινομενολογικής Χημείας. Επιχειρεί να ορίσει τη χημική ιδιαιτερότητα των στοιχείων που είναι ομαδοποιημένα στον πίνακα του Μεντελέγιεφ, μέσα από την περιγραφή της συμπεριφοράς των ηλεκτρονίων. Δεν επιδιώκει να αναγάγει το άτομο στην Κλασική Μηχανική, αλλά να συγκεκριμενοποιήσει το μετασχηματισμό που το χημικό άτομο πρέπει να επιβάλει στην Κλασική Φυσική. Το ατομικό του μοντέλο τρέφεται από τη Χημεία και αντιφάσκει με τους νόμους της Φυσικής (Stengers and Bensaude-Vincent 1999).

Τα επιτεύγματα του ατόμου του Bohr ήταν όνειρο για τους χημικούς, επειδή ερμήνευαν τη χημική συμπεριφορά και το σθένος κάποιων από τα στοιχεία του πίνακα του Μεντελέγιεφ και εφιάλτης για τους φυσικούς διότι τα δύο αιτήματα του Bohr αποτελούσαν *ad hoc* υποθέσεις που με την εξερεύνηση ατόμων με πιο πολλά ηλεκτρόνια πολλαπλασιάστηκαν. Σαν να έπρεπε η Φυσική όπως και η Χημεία να μαθαίνει από τα άτομα πώς να τα κατανοεί, αντί να τα συνάγει από θεμελιώδεις αρχές. Πολύ σύντομα οι χημικοί το οικειοποιήθηκαν, επειδή προμήθευε μια εκπληκτικά διαισθητική εκδοχή των αποτελεσμάτων τους. Έτσι το ατομικό μοντέλο του Bohr κατάφερε να ενώσει φυσικούς και χημικούς και να τους επιτρέψει να κατανοήσουν με τον ίδιο τρόπο δεδομένα που ήταν πλέον κοινά.

Με την ανάπτυξη της Κβαντικής Θεωρίας τα δεδομένα άλλαξαν και ο ακανόνιστος κόσμος των ατόμων της Κινητικής Θεωρίας εξαφανίστηκε προς όφελος μιας μη παρατηρήσιμης 'κβαντικής πραγματικότητας' η οποία είναι κανονική, επειδή υπόκειται σε κάποιο νόμο.

Στην αρχή η Κβαντική Θεωρία ύφανε ισχυρούς δεσμούς με τη Χημεία. Όμως το 1927 οι Heitler και London έδειξαν για το μόριο του υδρογόνου, ότι η δημιουργία ομοιοπολικού δεσμού εξαρτάται από την ύπαρξη ηλεκτρονικού spin, διαφορετικά η απαγορευτική αρχή του Pauli δεν θα την επέτρεπε (Coulson 1997). Η δημιουργία αυτού του δεσμού θα γίνει το σύμβολο της αναγωγής της Χημείας στην Κβαντική Θεωρία. Μέσα από την αρχή του Pauli ο φυσικός κατακτά θέση αρχής (Scerri 2001, Stengers and Bensaude - Vincent 1999). Παρά ταύτα η άποψη ότι η Κβαντική Χημεία μάλλον ανοικοδομήθηκε από διάσπαρτα στοιχεία που ορισμένα προέρχονται από την Κβαντική Μηχανική και άλλα έχουν θεωρητικοποιηθεί από την Χημεία είναι σε μεγάλο βαθμό ορθή (Stengers and Bensaude - Vincent 1999).

1.2.2 Πώς προσεγγίζουν σήμερα τον κβαντικό κόσμο οι δυο επιστήμες

Σήμερα καθώς η φιλοσοφία της Χημείας αρχίζει να αναπτύσσεται σαν ιδιαίτερος κλάδος οι χημικοί υποστηρίζουν την αυτονομία της Χημείας μη αποδεχόμενοι την άποψη για την αναγωγή της στη Φυσική. Θεωρούν ότι από την μια πλευρά βρίσκεται η Κβαντική Μηχανική που δεν επιτρέπει την οπτική αναπαράσταση των ατομικών τροχιακών και το μαθηματικό ορισμό ενός ατομικού τροχιακού μέσω των κβαντικών αριθμών για κάθε ηλεκτρόνιο, εκτός από το άτομο του υδρογόνου και επομένως γι' αυτή δεν έχει νόημα η ηλεκτρονική δομή των πολυηλεκτρονικών ατόμων όπως την χρησιμοποιούν οι χημικοί. Από την άλλη πλευρά βρίσκεται η Χημεία για την οποία η έννοια του τροχιακού 'έχει στην πραγματικότητα κληρονομηθεί από την παλιά Κβαντική Θεωρία' του Bohr (Scerri 2000b). Ακόμη 'υπάρχουν εμπειρικά γεγονότα, που συμφωνούν με την κβαντική θεωρία, αλλά δεν προκύπτουν αυστηρά από αυτή' (Scerri 2001). Επίσης επιμένουν στο γεγονός ότι 'η Χημεία δεν είναι μόνο η επιστήμη των μορίων αλλά επίσης και των υλικών, είναι η μόνη βασική επιστήμη που αποτελεί τις βάσεις της βιομηχανίας' (Ogilvie 1990). Πρέπει επομένως και κατά τη διδασκαλία να δίνεται έμφαση στον φαινομενολογικό της χαρακτήρα και όχι στην Κβαντική υπολογιστική Χημεία.

Οι πιο πάνω απόψεις αντιπροσωπεύουν κυρίως τους πειραματικούς χημικούς από τους οποίους φαίνεται να χρησιμοποιείται μια 'Λαϊκή Μοριακή Θεωρία' (ΛΜΘ) όπως επισημαίνεται από τους Sanchez Gomez και Martin (2002). Η ύπαρξή της έχει εμποτίσει αλλά και διευκολύνει παράλληλα την κοινότητα των χημικών στην ερμηνεία των πειραματικών τους αποτελεσμάτων αλλά και τη διδακτική πράξη. Η θεωρία αυτή παρουσιάζεται ανεξάρτητα από την Κβαντική Θεωρία αλλά συνδέεται και με αυτήν. Περιλαμβάνει την περιγραφή των ατόμων, των μορίων και των χημικών δεσμών με τη βοήθεια διαφόρων μοντέλων και ημιεμπειρικών κανόνων, όπως οι τύποι κατά Lewis, τα ατομικά τροχιακά και οι κανόνες υβριδισμού τους και το μοντέλο του VSEPR. Σήμερα όμως έχει χάσει την ερμηνευτική της αξία για πειραματικά δεδομένα που βρίσκονται στο κέντρο του ενδιαφέροντος της Χημείας.

Η ΛΜΘ περιλαμβάνει ‘κβαντικούς’ όρους από τη Θεωρία Δεσμού Σθένους. Για την Θεωρία Δεσμού Σθένους οι όροι αυτοί αποτελούν στοιχεία μαθηματικής μεθόδου για την επίλυση της εξίσωσης Schrödinger, ενώ για την ΛΜΘ φαίνεται να έχουν ένα τύπο ‘αυθεντικής’ πραγματικής ύπαρξης. Η Θεωρία Δεσμού Σθένους δεν μετέβαλε τη ΛΜΘ σε κβαντική, μάλλον η δεύτερη (ΛΜΘ) απέκτησε μια κβαντική όψη υιοθετώντας κάποιους κβαντικούς όρους, αλλά παρέμεινε ουσιαστικά συνδεδεμένη με την κλασική σκέψη.

Επομένως, φαίνεται να συνυπάρχουν ο κόσμος της Χημείας και των πειραματικών επιστημόνων της από τη μια πλευρά και ο κβαντικός κόσμος από την άλλη που φέρνει τη σφραγίδα της Φυσικής και γι’ αυτό οι πλειοψηφία των χημικών τον αποφεύγει. Είναι βέβαια δυνατό στο χώρο της Χημείας αλλά και της Χημικής Εκπαίδευσης να χρησιμοποιούνται οι γλώσσες και των δύο κόσμων, κάτι που βέβαια δεν το συναντάμε συχνά. Προσπαθώντας να γεφυρώσει τις δύο πλευρές ο Richman (1998) υπογραμμίζει ‘καθώς σύγχρονοι H/Y σχεδιάζουν μοριακά τροχιακά και κάνουν κβαντομηχανικούς υπολογισμούς προσιτούς στους αρχάριους φοιτητές και την ίδια στιγμή τα μικροσκόπια σάρωσης σήραγγος μας δείχνουν εικόνες των μεμονωμένων ατόμων, γίνεται όλο και περισσότερο σημαντικό να διαφοροποιήσουμε τον θεωρητικό από τον πειραματικό δείχνοντας στους διδασκόμενους πως μια ενσωμάτωση και των δύο καθορίζει την ξεχωριστή φύση της σκέψης των χημικών’.

Για τους φυσικούς ‘η Κβαντική Θεωρία βελτιώθηκε, εφαρμόστηκε και επεκτάθηκε, χωρίς καμιά από τις επεξεργασίες αυτές να κλονίσει τις θεμελιώδεις αρχές της. Η διαμάχη όμως για το πώς ερμηνεύονται εξακολουθεί αμείωτη μέχρι σήμερα’ (March 1996). Οι φυσικοί έχοντας ως αφετηρία τη σχολή της Κοπεγχάγης συνεχίζουν να διατυπώνουν νέες απόψεις από φιλοσοφική και επιστημολογική σκοπιά. Ο Feynman μάλιστα πιστεύει ότι είναι καθαρή αλαζονεία να επιμένουμε πως οι νόμοι θα πρέπει να έχουν νόημα. ‘Ήταν περισσότερο εποικοδομητικό να προσπαθήσει κανείς να ορίσει πόσο διαφέρουν οι κβαντικοί κανόνες από εκείνους που εφαρμόζονται στο νευτώνειο σύμπαν, να τους θαυμάσουμε, αλλά μακροπρόθεσμα δεν μπορούμε παρά ταπεινά να παραδεχθούμε πως είναι αυτοί που είναι, για πάντα ανεξήγητοι’ (March 1996). Σήμερα βέβαια όλες οι πλευρές συμφωνούν σ’ ένα βασικό σημείο: η Κβαντική Φυσική μας εισάγει σε μια μη ντετερμινιστική πραγματικότητα, ο μικρόκοσμος είναι ένας κόσμος ‘στον οποίο δεν μπορεί να προβλεφθεί το μέλλον’ (March 1996).

Οι φυσικοί μπορούν να σκέφτονται και να συζητούν για την ύπαρξη μιας ύλης η οποία φαίνεται να χρωστά τις παρατηρήσιμες ιδιότητές της μόνο και μόνο στην παρατήρησή μας. Η δυνατότητα τέτοιων εικασιών αποδεικνύει το γεγονός ότι όταν ο σκοπός είναι να ‘σκεφτούμε πάνω στις αρχές’, η μαρτυρία των χημικών θεωρείται αμελητέα, ανάξια να επιβάλει περιορισμούς στο στοχασμό των φυσικών. Για τους χημικούς τα γεγονότα υπάρχουν ανεξάρτητα από την παρατήρηση, όποιος και αν είναι ο τρόπος, που η πιθανότητα να συμβούν συνάγεται από την εξίσωση του Schrödinger. Στην αντίθετη περίπτωση καμιά χημική αντίδραση, καμιά εξέλιξη που περιγράφεται με όρους κίνησης των ατόμων και των μορίων, τίποτε δηλαδή από όσα ενδιαφέρουν τον χημικό δεν θα είχε ύπαρξη ανεξάρτητη από την παρατήρηση. Αλλά, οι ιδιότητες των στοιχείων της Χημείας, που επίσημα ανάγονται στη Κβαντική Μηχανική, δεν ‘ανακαλύφθηκαν’ αλλά ήταν αποτέλεσμα διαπραγματεύσεων με τις πειραματικές μετρήσεις. Οι ιδιότητες αυτές εμφανίζονται ως προσεγγίσεις σε σχέση με μια ιδεατή γνώση, απροσπέλαστη εξαιτίας των ορίων των υπολογιστικών μας δυνατοτήτων.

Ως συμπέρασμα, θα μπορούσαμε να διατυπώσουμε την άποψη, ότι η Φυσική είναι η καθαρή και διακριτή επιστήμη των αρχών. Εκεί όπου ανακαλύφθηκε κάποια δίοδος πέρα από τα φαινόμενα, προς ένα κόσμο που υπόκειται σε κατανοήσιμους νόμους, συναντάμε την Φυσική. Εκεί όπου οι συνέπειες των κατανοήσιμων νόμων της Φυσικής χάνουν την διαφάνειά τους, εκεί όπου αρχίζει το σκοτεινό μαγείρεμα των προσεγγίσεων και των διαπραγματεύσεων με τα εμπειρικά δεδομένα, έχουμε να κάνουμε με την Χημεία (Stengers and Bensaude-Vincent 1999).

1.2.3 Η διδακτική πράξη

Η περιγραφή και η ερμηνεία των φαινομένων που αναφέρονται στον μικρόκοσμο ως γνωστό αντικείμενο συνδέονται με τη διδασκαλία της Φυσικής και την Χημείας. Στη διδακτική πράξη διεθνώς όσον αφορά στην Δευτεροβάθμια κυρίως Εκπαίδευση, στο μάθημα της Φυσικής δίνεται έμφαση στην Κβαντομηχανική συνολικά ως θεωρία και περιγράφονται οι βασικές αρχές της με βάση τις οποίες ερμηνεύεται ο μικρόκοσμος, επαληθεύοντας το γεγονός ότι η Φυσική είναι η επιστήμη των αρχών. Στο μάθημα της Χημείας το ενδιαφέρον εστιάζεται στην ηλεκτρονική δομή των στοιχείων και τις ιδιότητές τους όπως καθορίζονται από αυτή. Χρησιμοποιείται η έννοια του τροχιακού,

ενώ στη Φυσική αναφέρεται η κυματοσυνάρτηση ψ ως λύση της εξίσωσης Schrödinger, που περιγράφει το κβαντικό σύστημα (Dimopoulos and Kalkanis 2005, Johnston al. 1998, MacKinnon 1999, Müller and Wiesner 1999, Olsen 2002, Petri and Niedderer 1998, Pospiech 2000a,b, 2001, Shiland 1997, Taber 2002, Tsaparlis and Papafotis 2002).

Σήμερα αρχίζει να αρθρώνεται ένας προβληματισμός για τις δυνατότητες της από κοινού διδασκαλίας αρχών και εννοιών που συναντώνται στην ύλη και των δύο επιστημών και των φυσικών επιστημών γενικότερα. Συζητούνται τα όρια μεταξύ τους και επισημαίνονται οι δυσκολίες των μαθητών να συνειδητοποιήσουν ότι πρόκειται για τις ίδιες έννοιες που οφείλουμε να τις προσεγγίσουμε με την ίδια γλώσσα (Sanchez Gomez and Martin 2003, Taber 2003, Toomey and Garafalo 2003).

Ακόμη όμως, η κάθε επιστήμη προσεγγίζει τον μικρόκοσμο από την δική της πλευρά αγνοώντας τις περισσότερες φορές τις προσπάθειες ή τις μεθόδους παρουσίασής του από την άλλη στη διδακτική πράξη. Στους διδακτικούς μετασχηματισμούς που προέρχονται από τους δύο επιστημονικούς χώρους δίνεται έμφαση σε διαφορετικές έννοιες και αρχές ή κανόνες. Στο μάθημα της Χημείας δε γίνεται εκτεταμένη αναφορά στην ερμηνεία της αρχής της αβεβαιότητας και δεν συνδέεται με την μεταφορά 'ηλεκτρονικό νέφος πιθανότητας', ενώ στο μάθημα της Φυσικής δεν δίνεται έμφαση στην απαγορευτική αρχή του Pauli και την δομή των πολυηλεκτρονιακών ατόμων.

Από το 1970 οι διδάσκοντες εξέφραζαν τον προβληματισμό τους για την ανάγκη εισαγωγής των βασικών εννοιών της Κβαντομηχανικής και τις δυσκολίες που προκύπτουν για την κατανόησή τους από τους μαθητές και τους φοιτητές σε διεθνές επίπεδο (Schubert 1970). Τα τελευταία χρόνια διαρκώς περισσότεροι επιστήμονες από το χώρο της Διδακτικής και των Φυσικών ή Χημικών Πανεπιστημιακών Τμημάτων, όπως βέβαια και διδάσκοντες Φυσική ή Χημεία στη Δευτεροβάθμια Εκπαίδευση, αναζητούν τον καταλληλότερο τρόπο εξοικείωσης των διδασκομένων με τον μικρόκοσμο ανάλογα με την βαθμίδα εκπαίδευσης στην οποία βρίσκονται. Τα προβλήματα που αντιμετωπίζουν οι διδάσκοντες είναι κοινά για τους φυσικούς και τους χημικούς, όπως υποδεικνύει η κοινή λογική και προκύπτει από την βιβλιογραφική ανασκόπηση, που παρουσιάζεται στην επόμενη παράγραφο.

Η προσπάθεια να αντιμετωπισθούν από κοινού τα προβλήματα που συναντούν στη διδακτική πράξη θα είχε γόνιμα αποτελέσματα, διότι 'ο αυξανόμενος όγκος τεκμηριωμένης πληροφορίας σε διαφορετικές επιστήμες έχει σαν συνέπεια να συσκοτίζονται τα σημεία συνάντησης τους, ιδιαίτερα για τους αρχάριους από τους διδασκόμενους' (Toomey and Garafalo 2003). Ο ιδιαίτερος χαρακτήρας της Κβαντικής Θεωρίας και οι δυσκολίες που έχουν διαπιστωθεί εκ μέρους των μαθητών αλλά και των φοιτητών κυρίως στα πρώτα πανεπιστημιακά έτη καταγράφονται και από τους δύο επιστημονικούς χώρους.

Στην κοινότητα κυρίως των διδασκόντων της Χημείας και των ερευνητών της διδακτικής της τίθεται συχνά το ερώτημα για το αν πρέπει να διδάσκονται στοιχεία Κβαντικής Χημείας στη Δευτεροβάθμια Εκπαίδευση και στα πρώτα πανεπιστημιακά έτη και η απάντηση είναι συχνά αρνητική διότι πρυτανεύει ο φαινομενολογικός χαρακτήρας της Χημείας από τη μια πλευρά και από την άλλη προβάλλουν οι δυσκολίες κατανόησης μιας θεωρίας που απαιτεί υψηλό επίπεδο αφαιρετικής ικανότητας εκ μέρους των διδασκόμενων (Gillespie 2001, MacKinnon 1999, Shiland 1997, Tsaparlis 2001, Tsaparlis and Papafotis 2002).

Οι φυσικοί πάλι αρκετά συχνά υποστηρίζουν ότι πρέπει να τη συμπεριλάβουμε στα αναλυτικά προγράμματα της Δευτεροβάθμιας Εκπαίδευσης, διότι οι συνέπειες των εφαρμογών της αφορούν την τεχνολογική επανάσταση του αιώνα μας (Dimopoulos and Kalkanis 2005, Johnston al. 1998, Müller and Wiesner 1999, Olsen 2002, Petri and Niedderer 1998, 2001, Pospiech 1999, 2000, Taber 2002).

Όπως προκύπτει από την ιστορική προσέγγιση της ανάπτυξης των δύο επιστημονικών χώρων αλλά και από την έρευνα για τις απόψεις που έχουν εκφρασθεί από σύγχρονους επιστήμονες και των δύο πλευρών, η Χημεία από την αρχή έδινε έμφαση στις μεθόδους κάθαρσης και ταυτοποίησης των υλικών, ενώ η Φυσική στις αρχές που διέπουν την συμπεριφορά της ύλης, μιας ύλης όμως συχνά μη διαφοροποιημένης (Stengers and Bensaude - Vincent 1999).

Η Φυσική ήταν πάντα η επιστήμη που ενδιαφέρονταν για τη φύση του σύμπαντος με όρους ενέργειας, ύλης και των μεταξύ τους αλληλεπιδράσεων, ενώ η Χημεία η επιστήμη που ενδιαφέρονταν για τις ιδιότητες και τις χημικές αντιδράσεις των διαφόρων ουσιών (Taber 2003). Μέσα σ' αυτό το πλαίσιο η Κβαντική Θεωρία ερμηνεύθηκε από τους πειραματικούς χημικούς με τη λογική της κλασικής σκέψης, ενώ στις μέρες μας έφερε πιο κοντά τους θεωρητικούς επιστήμονες της Κβαντικής Χημείας και της Φυσικής (Sanchez Gomez and Martin 2003). Στη διδακτική πράξη όμως ο απόηχος αυτής της προσέγγισης δεν έχει φτάσει.

Επιπλέον από την έρευνα στη Διδακτική έχει βρεθεί ότι οι μαθητές έχουν την τάση να δημιουργούν διαφορετικές νοητικές δομές σε διαφορετικά γνωστικά περιβάλλοντα (Henessy 1993, Solomon 1993) και ειδικότερα φαίνεται ότι δεν μπορούν να σκεφτούν με όρους Φυσικής για την ατομική δομή στο μάθημα της Χημείας (Taber 1998). Επομένως η έλλειψη διαλόγου μεταξύ των δύο επιστημονικών κοινοτήτων επηρεάζει αρνητικά και τη διδακτική πρακτική με αποτέλεσμα να μην υπάρχει από κοινού αντιμετώπιση των δυσκολιών και παρανοήσεων των μαθητών που διαπιστώνονται ότι είναι όμοιες σε μεγάλο βαθμό.

1.3 Βιβλιογραφική ανασκόπηση

1.3.1 Νοητικές παραστάσεις των μαθητών και των φοιτητών για τη σωματιδιακή δομή της ύλης

Οι επιστήμονες για την ερμηνεία αυτών των φαινομένων με αναφορά στην σωματιδιακή διάσταση της ύλης έχουν εφεύρει εξειδικευμένα συστήματα συμβολισμού, όπως εξισώσεις, διαγράμματα μοριακής δομής, γραφικές παραστάσεις και μοντέλα τριών διαστάσεων στον H/Y. Πρέπει όμως να αναρωτηθεί κανείς ποιες είναι οι νοητικές παραστάσεις των διδασκόμενων στις διάφορες εκπαιδευτικές βαθμίδες όταν βλέπουν ένα πείραμα, μια εξίσωση, μια γραφική παράσταση ή μια οπτική αναπαράσταση με ή χωρίς κίνηση ενός φαινομένου.

Τα πειράματα που χρησιμοποιούνται για επίδειξη στην τάξη είναι προσεκτικά επιλεγμένα ώστε η μεταβολή να γίνεται εμφανής από την αλλαγή του χρώματος, την δημιουργία ενός στερεού ή αερίου, την έκλυση ή απορρόφηση θερμότητας, την παραγωγή ηλεκτρικού ρεύματος ή το άναμμα ενός λαμπτήρος, αλλά τα μαθησιακά αποτελέσματα δεν είναι συνήθως ενθαρυντικά. Στον πραγματικό κόσμο η ερμηνεία των ίδιων φαινομένων είναι ακόμη πιο πολύπλοκη καθώς δεν είναι εύκολο να τα διακρίνουμε και να τα απομονώσουμε. Είναι επομένως πολύ δυσκολότερο να εμπλουτισθεί με αυτά η διδακτική επεξεργασία εννοιών που αφορούν στο μικρόκοσμο.

Επιπλέον, επειδή δεν μπορούν να έχουν άμεση εμπειρία της μικροσκοπικής δομής της ύλης, είναι δύσκολο να σχηματίσουν σαφή εικόνα γι' αυτή (Campbell 2000). Οι μαθητές, αλλά και οι φοιτητές, δυσκολεύονται να την αναπαραστήσουν και συχνά της αποδίδουν μακροσκοπικές ιδιότητες. Έχουν δε μεγαλύτερη επιτυχία σε ερωτήσεις που απαιτούν αριθμητικούς υπολογισμούς από ότι σε αυτές που απαιτούν ή αναφέρονται σε οπτική αναπαράσταση (Campbell 2000). Ακόμη, οι αφηρημένες έννοιες που συναντούν οι διδασκόμενοι στα μαθήματα των Φυσικών Επιστημών, όταν ασχολούνται με τον μικρόκοσμο, συνηγορούν στην ανάπτυξη αυθόρμητων νοητικών παραστάσεων.

Επίσης, φαίνεται ότι δεν μπορούν εύκολα να μετακινηθούν από το μακροσκοπικό στο μικροσκοπικό επίπεδο για να ερμηνεύσουν τις μακροσκοπικές ιδιότητες ενός υλικού, ενώ αποδίδουν πολύ εύκολα τις μακροσκοπικές ιδιότητες της ουσίας στα σωματίδια, μόρια και άτομα που τον αποτελούν, όπως το χρώμα. Γενικότερα, θεωρούν τον μικρόκοσμο σαν εντελώς ομοιόμορφο με τον μακρόκοσμο, εκτός από τον παράγοντα της κλίμακας. Συχνά επίσης δέχονται ότι η ύλη είναι συνεχής χωρίς κενά μεταξύ των σωματιδίων και ότι δε διατηρείται πάντα στις χημικές αντιδράσεις (Albanese and Vicentini 1997, Anderson 1990, Lee et al. 1993, Nussbaum and Novick 1982). Δηλαδή θέματα που αφορούν στον μικρόκοσμο αποτελούν διδακτικά αντικείμενα που τους δυσκολεύουν, όπως έδειξαν οι έρευνες που έχουν πραγματοποιηθεί μέχρι σήμερα.

Ειδικότερα όταν οι ερευνητές εστιάζουν την προσοχή τους στις νοητικές παραστάσεις των διδασκομένων για το άτομο, εφ' όσον αυτό αποτελεί τη δομική μονάδα του μικρόκοσμου, τους ζητούν να το περιγράψουν με λόγια ή να το ζωγραφίσουν, ενώ άλλες φορές να επιλέξουν από κάποιες προτεινόμενες αναπαραστάσεις – εικόνες του ατόμου αυτή που θεωρούν περισσότερο αποδεκτή, προσπαθώντας έτσι να ανιχνεύσουν αν κάποιο ατομικό μοντέλο είναι περισσότερο κατανοητό από αυτούς ή το θεωρούν πιο 'σωστό'. Οι ερωτώμενοι είναι μαθητές Γυμνασίου ή Λυκείου, φοιτητές ακόμη και ενήλικες, διδάσκοντες Φυσική ή Χημεία στη Μέση Εκπαίδευση. Ορισμένα από τα συμπεράσματα των μέχρι τώρα ερευνών αναφέρονται πιο κάτω:

- ▶ Ένα άτομο συχνά περιγράφεται σαν στρογγυλό, στερεό και σκληρό (Griffiths and Preston 1992, Harrison and Treagust 1996) και ορίζεται ως 'μπάλα' ή 'σφαίρα'. Ακόμη πολλοί μαθητές το περιγράφουν σαν σταφίδα ή δομή που μπορεί να διαιρεθεί και να αναπαραχθεί σαν κύτταρο (Harrison and Treagust 1996, Simon 1998). Λιγότεροι από τους μισούς μαθητές τελειώνοντας το γυμνάσιο έχουν κατανοήσει επαρκώς ότι ένα άτομο αποτελείται από πυρήνα και ηλεκτρόνια καθώς και την ηλεκτρονιακή δομή του (Charlet-Brehelin 1998, Harrison and Treagust 1996). Επομένως, το άτομο δεν περιγράφεται σύμφωνα με κάποια επιστημονική θεωρία και δεν φαίνεται να έχει κατανοηθεί ότι οι αισθήσεις μας δεν είναι δυνατόν να μας δώσουν πληροφορίες για την οπτικοποίησή του.
- ▶ Η περιγραφική έρευνα για τις ηλικίες 14 – 16 ετών των νοητικών μοντέλων των μαθητών για τα άτομα έδειξε ότι οι περισσότεροι προτιμούν μοντέλα που τα απεικονίζουν σαν ξεχωριστές, διακεκριμένες δομές. Αυτό το συμπέρασμα προκύπτει από το γεγονός ότι προτιμούν το ατομικό μοντέλο που μοιάζει με το ηλιακό σύστημα και θεωρούν τις ηλεκτρονιακές στοιβάδες και τα ηλεκτρονιακά νέφη ως πλήρεις ή ημιστερεές δομές (Harrison and Treagust 1996). Ακόμη και φοιτητές περιγράφουν το άτομο ως σφαίρα ή σύμφωνα με το πλανητικό μοντέλο ανατρέχοντας στην Κλασική Φυσική και θεωρώντας ότι έχει συγκεκριμένο μέγεθος (Charlet - Brehelin 1998, Cokelz and Dumon 2005, Harrison and Treagust 1996, Mashadi 1996). Οι εικόνες αυτές έρχονται σε πλήρη αντίθεση με την ΚΘΑ σύμφωνα με την οποία υπάρχει πάντα μια μικρή πιθανότητα να βρεθεί ένα ηλεκτρόνιο οποιουδήποτε ατόμου σε πολύ μεγάλη απόσταση από τον πυρήνα και επομένως το μέγεθος του ατόμου δεν είναι καθορισμένο.

- ▶ Οι μαθητές, ακόμη και όταν έχουν διδαχθεί αναλυτικά τα σχετικά κεφάλαια στα μαθήματα της Φυσικής και της Χημείας, συγγέουν όχι μόνο τις έννοιες σωματίδιο, άτομο, μόριο, αλλά και πυρήνας, πρωτόνιο, νετρόνιο και ηλεκτρόνιο, όπως και τις σχέσεις μεταξύ τους (Coll and Treagust 2003, Johnston 1988, Osborne and Freyberg 1985). Δεν διαθέτουν δηλαδή νοητική εικόνα για τα δομικά συστατικά της ύλης, ώστε να μπορούν να περιγράψουν πώς είναι δομημένα, ποιες είναι οι ιδιότητές τους και ποιες οι μεταξύ τους διαφορές.
- ▶ Οι μαθητές δε θεωρούν τα άτομα ως στοιχεία ενός μοντέλου που ερμηνεύει τις μακροσκοπικές ιδιότητες της ύλης σαν αναδυόμενες ιδιότητες του συνόλου των στοιχείων (τις οποίες από μόνα τους δεν τις έχουν), αλλά σαν τα πιο μικρά κομμάτια στα οποία το μακροσκοπικό αντικείμενο μπορεί να υποδιαιρεθεί ενώ διατηρούν τα χαρακτηριστικά του. Δέχονται όμως, το άτομο σαν το τμήμα της ύλης που δεν μπορεί να διαιρεθεί σε μικρότερα τμήματα (Albanese and Vicentini 1997). Διαθέτουν δηλαδή μια προσωπική θεωρία σύμφωνη με αυτή των επιστημόνων του 19^{ου} αιώνα.
- ▶ Σπάνια αναφέρονται στην έννοια του ατομικού μοντέλου, ενώ πολλοί φαίνεται να συγγέουν το ατομικό μοντέλο με την πραγματικότητα (Cokelez and Dumon 2005, Harrison and Treagust 1996, Simon 1998, Unal and Zollman 2000). Ακόμη και οι φοιτητές όταν υιοθετούν κάποιο από τα μοντέλα του ατόμου, δεν μπορούν να το χρησιμοποιήσουν για να ερμηνεύσουν κάποιο φυσικό φαινόμενο (Fletcher and Johnston 1999). Η έννοια του ατομικού μοντέλου ως επιστημονικού εργαλείου, που μπορεί να ανασκευαστεί ή να καταργηθεί στο μέλλον, δεν φαίνεται να έχει οικοδομηθεί από τους μαθητές αλλά και τους φοιτητές.
- ▶ Οι μαθητές στο Δημοτικό και το Γυμνάσιο θεωρούν τα ηλεκτρόνια σαν στερεά και στατικά αντί για κινούμενα προς κάθε κατεύθυνση, ενώ μεταξύ των μαθητών του Λυκείου αλλά και των φοιτητών πριν αρχίσουν το μάθημα της Κβαντομηχανικής το μηχανιστικό μοντέλο των γρήγορα κινούμενων ηλεκτρονίων σε καθορισμένες τροχιές είναι κυρίαρχο (Harrison and Treagust 2000). Στα ηλεκτρόνια αποδίδονται ιδιότητες κλασικών αντικειμένων, όμοιων με αυτά που συλλαμβάνουν οι αισθήσεις μας.

- ▶ Η σχέση της ηλεκτρονιακής δομής του ατόμου ενός στοιχείου και η θέση του στον περιοδικό πίνακα δεν φαίνεται να είναι ξεκάθαρη για τους μαθητές (MacKinnon 1999). Δέχονται επίσης ότι τα ηλεκτρόνια είναι κατανεμημένα σε ζευγάρια γύρω από τον πυρήνα, επηρεασμένοι από τους τύπους κατά Lewis, που χρησιμοποιούνται για την ερμηνεία των χημικών δεσμών (Cokelez and Dumon 2005, Keig and Rubba 1993). Για τα πολυηλεκτρονικά άτομα διαθέτουν νοητικές εικόνες που συμβαδίζουν με τη ‘Λαϊκή Μοριακή Θεωρία’ και συνδέονται με την κλασική προσέγγιση του μικρόκοσμου.

Επομένως, οι μαθητές και οι φοιτητές για να περιγράψουν το άτομο ανακαλούν εικόνες του μακρόκοσμου με τις οποίες έχουν εξοικειωθεί, ενώ συχνά συγχέουν μεταξύ τους δομικούς λίθους της άβιας (σωματίδια) και της έμβιας ύλης (κύτταρο). Η οπτικοποίηση και οι ιδιότητες του ατόμου ταυτίζονται με την πραγματικότητα, χωρίς να γίνεται οποιαδήποτε αναφορά στα ατομικά μοντέλα και τις θεωρίες από τις οποίες προκύπτουν. Αναδεικνύεται έτσι, η δυσκολία τους να κατανοήσουν την δομή της ύλης και την οργάνωση του μικρόκοσμου γενικότερα, ώστε να μπορούν να ερμηνεύσουν και τις διαφορετικές μακροσκοπικές ιδιότητες των υλικών.

1.3.2 Νοητικές παραστάσεις των διδασκομένων για την Κβαντική Θεώρηση του ατόμου

Από τις μέχρι τώρα έρευνες διαπιστώνεται ότι το σημαντικότερο εμπόδιο στην κατανόηση των αρχών που διέπουν τον κβαντικό κόσμο είναι η κλασική προσέγγισή του από τους μαθητές, αλλά πολλές φορές και από τα βιβλία και τους διδάσκοντες. Ένα άλλο σημαντικό πρόβλημα είναι η ορολογία που χρησιμοποιείται και έχει μια διαφορετική ερμηνεία για την Κβαντική Θεωρία από ότι στον κόσμο της κλασικής σκέψης. Για παράδειγμα ‘η αβεβαιότητα’, για την κλασική μέτρηση φανερώνει απλά την έλλειψη απόλυτης ακρίβειας της μετρητικής μας συσκευής, το σφάλμα στη μέτρηση, ενώ είναι ένα εγγενές χαρακτηριστικό γνώρισμα του κβαντικού κόσμου, που φανερώνει ότι οι μετρήσεις δεν αναπαράγονται (Johnston et al. 1998).

Κυρίαρχο φαίνεται να είναι ακόμη το πρόβλημα της ποιοτικής ερμηνείας του μαθηματικού φορμαλισμού που απασχολεί τους διδάσκοντες στην Δευτεροβάθμια και την Τριτοβάθμια Εκπαίδευση και τους ερευνητές της Διδακτικής (Ardac 2002, Budde et al. 2002a,b, Early 1999, Fischler 1999, Fleming et al. 2000, Fletcher and Johnston 1999, Hobson 2001, 2002, Hurwitz et al.1999, Johnston et al. 1998, Lawrence 2001, Niedderer and Deylitz 1999, Olsen 2002, Petri, and Niedderer 1998, 2001, Pospiech 1999, 2000, 2001, Rebello and Zollman 1999, Roblee et al. 1999, Scerri 2000b, 2001, Shiland 1997, Zollman 1998). Δεν είναι όμως δυνατή η μονοσήμαντη αντιμετώπισή του, όταν ερωτήματα που αφορούν την ερμηνεία της Κβαντικής Θεωρίας αποτελούν θέματα ανοιχτών συζητήσεων και αντιπαραθέσεων των επιστημόνων.

Από διαφορετικές μελέτες αναδεικνύονται πολλές νοητικές παραστάσεις εκ μέρους των διδασκομένων, διαφορετικές από αυτές που συμφωνούν με τις επιστημονικές θεωρίες. Πιο κάτω καταγράφονται οι σημαντικότερες από αυτές, όπως έχουν καταγραφεί από τους ερευνητές της Διδακτικής των Φυσικών Επιστημών:

- ▶ Μαθητές και φοιτητές συγχέουν την έννοια του τροχιακού με το ενεργειακό επίπεδο, το χώρο 'όπου κινείται το ηλεκτρόνιο' ή 'υπάρχει πιθανότητα να βρεθεί', 'την τροχιά όπου κινείται το ηλεκτρόνιο' ή 'υπάρχει πιθανότητα να βρεθεί', 'το ηλεκτρονιακό νέφος πιθανότητας', 'την ηλεκτρονιακή στοιβάδα' και 'την υποστοιβάδα' (Cervellati and Perugini 1981, Mashadi 1994, MacKinnon 1999, Taber 2001, 2002, 2005, Tsaparlis and Papaphotis 2002, Κοντογεωργίου 2003, Παπαφώτης 2004). Αναφέρονται στα ενεργειακά επίπεδα χρησιμοποιώντας τις έννοιες της τροχιάς ή της στοιβάδας ή μόνο μαθηματικές σχέσεις και παραδείγματα που διδάχτηκαν χωρίς να προχωρούν στην εφαρμογή των γνώσεών τους σε καινούριες καταστάσεις (Fletcher and Johnston 1999).
- ▶ Δυσκολεύονται να κατανοήσουν την συμβολική αναπαράσταση της ηλεκτρονιακής δομής, αλλά και την σημασία της για την ΚΘΑ, ενώ μπορούν εύκολα να την αναπαράγουν στηριγμένοι σε μνημονικούς κανόνες (MacKinnon 1999, Tsaparlis and Papaphotis 2002, Κοντογεωργίου 2003).
- ▶ Η έννοια της τροχιάς ενός κβαντικού αντικειμένου δεν αμφισβητείται (Fischer 1999). Ενώ, όταν έχουν διδαχθεί την αρχή του De Broglie θεωρούν ότι το ηλεκτρόνιο κατά μήκος της τροχιάς ακολουθεί μια διαδρομή με μορφή κύματος (Fletcher and Johnston 1999).

- ▶ Συχνά δεν κατανοούν τον πιθανολογικό χαρακτήρα των τροχιακών (Nicol 2001) αντιλαμβανόμενοι ότι τα τροχιακά αναπαριστούν ένα καλά καθορισμένο και περιχαρακωμένο χώρο (Tsapalis and Papaphotis 2002) ή θεωρώντας την πιθανότητα να βρεθεί κάπου το ηλεκτρόνιο σαν υποκειμενική έλλειψη γνώσης (Petri and Niedderer 1998) και θεωρούν τα Δx και Δp σαν σφάλματα μέτρησης (Müller and Wiesner 1999).
- ▶ Θεωρούν το σπιν ως μία τεχνητή κατασκευή που εφηύραν οι επιστήμονες για να ερμηνεύσουν τα πειραματικά δεδομένα (Nicol 2001). Ακόμη και η συγγραφέας του άρθρου αποδίδει πάντα στα ηλεκτρόνια μόνο την σωματιδιακή τους ιδιότητα και όταν αναφέρεται στο σπιν γράφει: «...τα ηλεκτρόνια περιστρέφονται περί άξονα γύρω από τον εαυτό τους». Ο Taber (2005), αναφέρει ότι την ίδια νοητική παράσταση διαθέτουν μαθητές Λυκείου.
- ▶ Μετά την διδασκαλία με παραδοσιακό τρόπο στοιχείων της κβαντομηχανικής θεωρίας ακόμη και στην περίπτωση που δέχονται την κυματοσωματιδιακή φύση του ηλεκτρονίου περιγράφουν το άτομο με τον κλασικό τρόπο σκέψης (Müller and Wiesner 1999, Tsapalis and Papaphotis 2002, Unal and Zollman 2000) και γενικότερα εφαρμόζουν ιδέες της Κλασικής Φυσικής στα κβαντικά φαινόμενα (Euler et al. 1999).
- ▶ Δεν μπορούν να απαλλαγούν από ένα πλανητικό ατομικό μοντέλο ακόμη και στις περιπτώσεις που η διδασκαλία στο πανεπιστήμιο δεν περιλαμβάνει το μοντέλο του Bohr και έχουν διδαχθεί την έννοια του τροχιακού με παραδοσιακό τρόπο ή έχουν χρησιμοποιήσει H/Y για υπολογισμούς σχετικά με την δομή πολυηλεκτρονιακών ατόμων (Cervellati and Perugini 1981, Cros et al. 1986, Fischler 1999, Harrison and Treagust 2000, MacKinnon 1999, Mashadi 1994, Petri and Niedderer 1998, 2001, Rebello and Zollman 1999, Olsen 2001, Παπαφώτης 2004).
- ▶ Έχοντας διδαχθεί την αρχή της αβεβαιότητας και την έννοια της κυματοσυνάρτησης ψ καταλήγουν σε ένα μοντέλο όπου τα ηλεκτρόνια βρίσκονται σε τροχιές πιο διευρυμένες. Αλλά και στην περίπτωση που έχουν αποδεχτεί και φαίνεται να έχουν κατανοήσει το ατομικό μοντέλο με το ηλεκτρόνιο ως νέφος φορτίου, στο τέλος ξαναγυρίζουν στο μοντέλο ενός στατικού ατόμου όπου τα ηλεκτρόνια είναι κυρίως διατεταγμένα σε συγκεκριμένες στοιβάδες (Petri and Niedderer 1998).

- ▶ Οι μαθητές αλλά και οι φοιτητές που έχουν διδαχθεί Χημεία σε προχωρημένο επίπεδο δεν μπορούν να περιγράψουν την συμπεριφορά των ηλεκτρονίων που συμμετέχουν σε δεσμούς μεταξύ ατόμων σύμφωνα με κάποιο από τα ατομικά μοντέλα και όταν αναφέρονται στα p τροχιακά θεωρούν ότι τα ηλεκτρόνια διαγράφουν τροχιά της μορφής του αριθμού οκτώ (Nicoll 2001).
- ▶ Στην τελευταία τάξη του Λυκείου αλλά και στα πρώτα Πανεπιστημιακά έτη οι περισσότεροι αναπαριστούν τα τροχιακά σαν επίπεδες ολότητες, ενώ η ιδέα μιας πιθανοτικής απεικόνισης στο χώρο των τριών διαστάσεων τους διαφεύγει (Mac Kinnon 1999, Tsaparlis and Papaphotis 2002).
- ▶ Η μεταφορές που χρησιμοποιούν οι διδάσκοντες ‘ηλεκτρονιακό νέφος’ ή ‘ηλεκτρονιακές στοιβάδες’, φαίνεται να προκαλούν στο μυαλό των μαθητών την δημιουργία διαφορετικών μοντέλων (Harrison and Treagust 1996).
- ▶ Οι μαθητές, αλλά και οι φοιτητές κρατούν στο μυαλό τους την εικόνα του ηλεκτρονιακού νέφους σαν μια μήτρα όπου τα ηλεκτρόνια είναι εμφυτευμένα, όπως τα σταγονίδια του νερού σε ένα σύννεφο. Αυτό το μοντέλο μοιάζει πολύ με την αντίληψη ότι η ύλη είναι συνεχής με τα άτομα εμφυτευμένα στη βασική ουσία (Harrison and Treagust 1996).
- ▶ Δεν φαίνεται να έχουν τη δυνατότητα αναπαράστασης των ατόμων και των μορίων ακόμη και φοιτητές των χημικών τμημάτων, αλλά και όταν διαθέτουν κάποια είναι διαφορετική από αυτή που αποδέχονται οι επιστήμονες (Nicoll 2001). Άρα δυσκολεύονται να αναπαραστήσουν τα άτομα και τα μόρια, ακόμη και σύμφωνα με την Κλασική Θεωρία.
- ▶ Οι φοιτητές κρατούν τις γνώσεις τους από το Λύκειο και δεν τις αλλάζουν ούτε και μετά το τρίτο έτος των σπουδών τους (Fletcher and Johnston 1999).
- ▶ Οι συγγραφείς διδακτικών εγχειριδίων αναμειγνύουν τη Σύγχρονη με την Κλασική Φυσική Θεωρία και αντιμετωπίζουν το ηλεκτρόνιο μόνο σαν σωματίδιο ακόμη και όταν αναφέρουν την κυματοσωματιδιακή του φύση. Χρησιμοποιούνται αναλογίες όπως ότι τα τροχιακά είναι τα διαμερίσματα μιας πολυκατοικίας αντιμετώπιση που έρχεται σε πλήρη αντίθεση με την αρχή της υπέρθεσης. Τα μοντέλα με ισόπυκνες επιφάνειες υποβάλουν στους μαθητές τις παρακάτω διαφορετικές απόψεις: το ηλεκτρόνιο έχει αυτό το σχήμα, το ηλεκτρόνιο μπορεί να βρίσκεται μόνο εκεί, το ηλεκτρόνιο είναι νέφος με αυτό το σχήμα (Στεφανή και Τσίπης 2002).

Από τα αποτελέσματα των ερευνών που αναφέρονται πιο πάνω, φαίνεται ότι όμοιες νοητικές παραστάσεις έχουν καταγραφεί για μαθητές και φοιτητές ανεξάρτητα από το επίπεδο διδασκαλίας των σχετικών θεμάτων. Αναδεικνύονται δηλαδή όμοιες δυσκολίες στην κατανόηση της ΚΘΑ ακόμη και όταν έχουν διδαχθεί τον προχωρημένο μαθηματικό φορμαλισμό που απαιτείται για την περιγραφή των βασικών εννοιών και αρχών.

Διαθέτουν αυθόρμητες νοητικές παραστάσεις για πολλές από τις εμπλεκόμενες έννοιες, τις σχέσεις μεταξύ τους και τις αρχές που διέπουν την Κβαντική Θεωρία, όπως *το τροχιακό, το ενεργειακό επίπεδο, την πιθανότητα ανίχνευσης του ηλεκτρονίου σε συγκεκριμένο χώρο, την ηλεκτρονιακή κατανομή του ατόμου, την μη ύπαρξη συγκεκριμένης τροχιάς του ηλεκτρονίου, το σπιν του ηλεκτρονίου, την κυματοσωματιδιακή του φύση, την αρχή της αβεβαιότητας.*

Επιπλέον, σε συνάρτηση με όσα αναφέρθηκαν πιο πάνω, οι διδασκόμενοι σε διαφορετικές εκπαιδευτικές βαθμίδες δεν φαίνεται να διαθέτουν νοητική εικόνα για το άτομο σύμφωνα με την Κβαντική Θεωρία στο χώρο των τριών διαστάσεων, δεδομένου ότι οι περιγραφές τους, ακόμη και όταν είναι επιστημονικά αποδεκτές, αναφέρονται μεμονωμένα σε συγκεκριμένες έννοιες όπως το τροχιακό ή το ηλεκτρονιακό νέφος. Όμως και οι ερωτήσεις, που διατυπώνουν οι διδάσκοντες ασχολούνται αποσπασματικά με την μορφή των γραφικών παραστάσεων των τροχιακών και των ηλεκτρονιακών νεφών στο χώρο, χωρίς να τις συνδέουν με την οπτικοποίηση του ατόμου συνολικά.

1.4 Σύνοψη

Από τη βιβλιογραφική ανασκόπηση που προηγήθηκε διαπιστώθηκε ότι τα ατομικά μοντέλα και ιδιαίτερα η ΚΘΑ δυσκολεύουν τους διδασκόμενους σε όλες τις εκπαιδευτικές βαθμίδες. Τα μαθησιακά προβλήματα που εμφανίζονται κατά την διδασκαλία ταξινομούνται κυρίως σε τρεις κατηγορίες:

Ο ρόλος των μοντέλων. Οι διδασκόμενοι δεν έχουν κατανοήσει ότι για να περιγράψουν το άτομο ενός συγκεκριμένου χημικού στοιχείου χρησιμοποιούν ένα ατομικό μοντέλο ή μια επιστημονική θεωρία που μπορεί να αναθεωρηθεί στο μέλλον.

Οι έννοιες, οι αρχές και τα σύμβολα. Οι διδασκόμενοι δημιουργούν λανθασμένες νοητικές παραστάσεις για τις θεμελιώδεις έννοιες και αρχές που θεωρούνται απαραίτητες στην ΚΘΑ. Οι διάφοροι συμβολισμοί που χρησιμοποιούν οι επιστήμονες και συνδέονται με την ΚΘΑ, όπως ο μαθηματικός φορμαλισμός, η ηλεκτρονιακή δομή ή οι γραφικές παραστάσεις δεν ερμηνεύονται με τον ίδιο τρόπο από τους διδασκόμενους.

Η ερμηνεία των οπτικών αναπαραστάσεων. Οι διαθέσιμες αναπαραστάσεις της κυματοσυνάρτησης, της πυκνότητας πιθανότητας και του ηλεκτρονιακού νέφους πιθανότητας είναι τις περισσότερες φορές δισδιάστατες, αλλά και όταν είναι τρισδιάστατες δεν παρουσιάζονται με τον κατάλληλο τρόπο, ώστε να δημιουργείται σύγχυση στους μαθητές. Επιπλέον η δυσκολία οπτικής αναπαράστασης συνολικά του ατόμου σύμφωνα με την Κβαντική Θεωρία είναι αναμενόμενο ότι δεν τους βοηθούν να κατανοήσουν τη μορφή του προτεινόμενου προτύπου στο χώρο. Συνεπώς για να περιγράψουν το άτομο ενός στοιχείου και να ερμηνεύσουν τον σχηματισμό μορίων στοιχείων ή χημικών ενώσεων ανακαλούν συχνότερα ένα πλανητικού τύπου μηχανιστικό μοντέλο.

Οι προτάσεις των ερευνητών για την επίλυση των παραπάνω προβλημάτων μπορούν να ταξινομηθούν σε τρεις κατηγορίες.

Ποιοτική προσέγγιση του ΚΘΑ. Οι διδάσκοντες και οι ερευνητές της Διδακτικής προσανατολίζονται συχνά προς μια διδακτική πρόταση με έμφαση στα ποιοτικά χαρακτηριστικά της ΚΘΑ. Η άποψη αυτή υποστηρίζεται επειδή η ΚΘΑ προσεγγίζεται από τους επιστήμονες με προχωρημένο μαθηματικό φορμαλισμό και δεν υπάρχει ακόμη συμφωνία μεταξύ τους για το πώς οι έννοιες αυτές θα διδαχθούν ποιοτικά, ώστε οι διδασκόμενοι να μπορούν να αφομοιώσουν τις αφηρημένες μαθηματικές μεθόδους αργότερα κατά την διάρκεια των σπουδών τους (Byrne 1996, Cataloglou and Robinett 2002, Dimopoulos and Kalkanis 2005, Jones et al. 2005, Tuví and Nachmias 2001).

Ενιαία παρουσίαση του ΚΘΑ στα μαθήματα Φυσικής και Χημείας. Επειδή η γνώση δεν περικλείεται μέσα στα όρια των επίσημα καθορισμένων επιστημών, προτείνεται να δημιουργηθεί μια ουσιαστική σύνδεση μεταξύ της διδασκαλίας της Φυσικής και της Χημείας και να υπογραμμισθεί ιδιαίτερα το γεγονός ότι η ΚΘΑ δίνει τη δυνατότητα ερμηνείας φυσικών και χημικών φαινομένων (Albanese and Vicentini 1997, Κοντογεωργίου και Μικρόπουλος 2004).

Αξιοποίηση των ΤΠΕ για την οπτική αναπαράσταση εννοιών που συνδέονται με την ΚΘΑ. Πολλοί ερευνητές υποστηρίζουν την άποψη ότι η χρήση των οπτικοποιήσεων με την αξιοποίηση των ΤΠΕ βελτιώνει την κατανόηση των εννοιών που συνδέονται με την ΚΘΑ, διότι διαφορετικά είναι δύσκολο να δημιουργηθούν τρισδιάστατες οπτικές αναπαραστάσεις του ατόμου σύμφωνα με την κβαντική του θεώρηση (Barak 2005, Barnea and Dori 1999, 2000, Byrne 1996, Cataloglou and Robinett 2002, Dori and Barak 2001, Trindade et al. 2002). Επομένως είναι φανερή η ανάγκη για τη σχεδίαση και ανάπτυξη ολοκληρωμένων πληροφορικών εκπαιδευτικών περιβαλλόντων με κύριο στόχο την επιστημονικά αποδεκτή σήμερα οπτικοποίηση της δομής της ύλης, για την υποστήριξη της κατανόησης μεγεθών και φαινομένων (Mikropoulos and Bellou 2006).

Το άτομο: Ανάλυση του επιστημονικού περιεχομένου

2.1 Εισαγωγή

Για τον σχεδιασμό της έρευνας αλλά και του εκπαιδευτικού λογισμικού κρίθηκε απαραίτητη μια παρουσίαση των ατομικών μοντέλων και των θεωριών που συνδέονται με την περιγραφή του ατόμου, αντλώντας πληροφορίες από την Ιστορία των Επιστημών και δίνοντας βαρύτητα στον ορισμό βασικών εννοιών για τις οποίες δημιουργούνται αυθόρμητες νοητικές παραστάσεις εκ μέρους των μαθητών και των φοιτητών, διαφορετικές από τις επιστημονικά αποδεκτές.

Η βιβλιογραφική ανασκόπηση που παρουσιάστηκε στο πρώτο κεφάλαιο έδειξε ότι ο μικρόκοσμος, τα μοντέλα και οι θεωρίες, που δομήθηκαν για την περιγραφή του αποτελούν διδακτικά αντικείμενα τα οποία δυσκολεύουν τους διδασκόμενους.

Ειδικότερα για το άτομο εντοπίστηκαν αυθόρμητες νοητικές παραστάσεις, που αφορούν στην ερμηνεία των βασικών όρων και των αρχών για την περιγραφή του ατόμου και ιδιαιτέρως της Κβαντικής Θεώρησής του. Οι μαθητές, οι φοιτητές αλλά και πολλοί από τους διδάσκοντες δεν διευκολύνονται να σχηματίσουν νοητική εικόνα για το άτομο των χημικών στοιχείων, πιθανώς λόγω του αποσπασματικού και στατικού χαρακτήρα των διαφορετικών απεικονίσεων με τις οποίες έρχονται συνήθως σε επαφή.

Τα ατομικά μοντέλα και οι θεωρίες από τις οποίες προκύπτουν, ως προϊόντα της επιστημονικής σκέψης χρησιμοποιήθηκαν για να ερμηνευθεί η μακροσκοπική συμπεριφορά της ύλης και επομένως θα πρέπει να συμπεριληφθούν στα αναλυτικά προγράμματα μεταξύ των πλέον σημαντικών θεμάτων για την διδασκαλία των Φυσικών Επιστημών. Επιπλέον, οφείλουμε να λάβουμε υπ' όψη ότι η ενημέρωση για την πρόοδο και τα επιτεύγματα της επιστήμης, όπως και η κατανόηση των βασικότερων από αυτά, συντελεί στην δημιουργία σκεπτόμενων και καλά πληροφορημένων πολιτών, που θα μπορούν να συμμετέχουν στις αποφάσεις για την ποιότητα της ζωής τους. Για τον λόγο αυτό δεν είναι αρκετό οι περισσότεροι από τους μαθητές να τελειώνουν το Λύκειο γνωρίζοντας μόνο τα ιστορικά ατομικά μοντέλα σαν αναντίρρητες αλήθειες και συνεπώς τον αιτιοκρατούμενο κόσμο της κλασικής φυσικής σκέψης.

Επιλέξαμε να ασχοληθούμε με την ποιοτική διδακτική προσέγγιση της ΚΘΑ, διότι θεωρούμε ότι μέσα από την διαδρομή για την κατανόηση της σύγχρονης Κβαντικής Θεωρίας αφ' ενός μεν η επιστημολογική στάση των διδασκόμενων θα εμπλουτισθεί, αφ' εταίρου δε θα γίνουν περισσότερο προσितिές σ' αυτούς οι σύγχρονες εφαρμογές της, όπως το laser, το τρανζίστορ, η τομογραφία κ.λπ.

Κατά την ανάλυση του επιστημονικού περιεχομένου της Κβαντικής Θεωρίας δόθηκε έμφαση στην ποιοτική εμβάθυνση των εννοιών και ορισμένων από τις σημαντικές αρχές της, τη σημασία των οποίων επισημαίνουν και άλλοι ερευνητές (Johnston 1998, Olsen 2001).

2.2 Ιστορικά ατομικά μοντέλα

Το τέλος του 19ου και η αρχή του 20ου αιώνα αποτέλεσαν μια περίοδο σημαντικών ζυμώσεων, αλλαγών και δραστηριοτήτων στη φυσική που κατέληξαν στην εμφάνιση της Σχετικότητας, της Κβαντικής Θεωρίας, της Ατομικής και Υποατομικής Φυσικής.

Το τελευταίο τέταρτο του 19ου αιώνα η ισχύς της Ατομικής Θεωρίας ήταν εμφανής αν και ένα σύνολο από φυσικά και χημικά φαινόμενα θα μπορούσαν να εξηγηθούν και χωρίς αυτήν. Έτσι επιφανείς επιστήμονες όπως οι Ernst Mach, Wilhelm Ostwald και Pierre Duhem αρνούσαν την εγκυρότητά της.

Το 1872 ενώ δεν είχε ακόμα εμπεδωθεί εντελώς η ιδέα των αρχέγονων αδιαίρετων ατόμων, ο Maxwell έγραφε: 'Είναι τα μόνα υλικά πράγματα τα οποία παραμένουν στην ίδια ακριβώς κατάσταση στην οποία ήταν όταν άρχισαν να υπάρχουν'. Το 1897 ο Joseph John Thomson ανακάλυψε το ηλεκτρόνιο ως αυθύπαρκτο αρνητικά φορτισμένο σωματίδιο και το 1899 ανήγγειλε ότι τα άτομα είναι διαιρετά: 'Η ηλεκτρίση συνεπάγεται ουσιαστικά τη ρήξη του ατόμου, κατά την οποία ένα μέρος της μάζας του ελευθερώνεται και αποσπάται από αυτό'. Στη συνέχεια η αδιαιρετότητα του ατόμου αμφισβητήθηκε από το πειραματικό έργο της Marie Curie, τους Ernest Rutherford και Frederic Soddy και επίσης από τα πειράματα του Lenard και του Jean Perrin. Όλες αυτές οι ανακαλύψεις και επιπλέον η υπόνοια ότι οι περίπλοκες φασματικές γραμμές των ατόμων πρέπει να παράγονται από κάτι που τραντάζεται μέσα στο άτομο, οδήγησαν σε διάφορες απόψεις σχετικά με την εσωτερική δομή του ατόμου (Chalmers 1998). Έπρεπε ακόμη να αποσαφηνιστεί σε ποια περιοχή του ατόμου βρίσκονταν τα ηλεκτρόνια ή και αν ακόμα βρίσκονταν μέσα στα άτομα.

Το πιο γνωστό από τα πρώτα ατομικά μοντέλα ήταν το μοντέλο του 'σταφιδόψωμου' που προτάθηκε από τον Thomson το 1898. Σύμφωνα με αυτό το άτομο ήταν μια ομοιογενής με ομοιόμορφη κατανομή μάζας θετικά φορτισμένη σφαίρα, στην οποία ήταν σφηνωμένα σαν σταφίδες αρνητικά φορτισμένα ηλεκτρόνια (Serway et al. 2001). Ο Thomson προχώρησε πολύ πιο πέρα από την απλή παρουσίαση των πειραματικών του αποτελεσμάτων κάνοντας υποθέσεις για την ερμηνεία τους, προτείνοντας το ατομικό του μοντέλο και εκφράζοντας μια θεωρία σύμφωνα με την οποία το σωματίδιο ηλεκτρόνιο αποτελούσε πλέον συστατικό του ατόμου. Ακολούθησε δηλαδή μια πορεία που έρχεται σε αντίθεση με την παραδοσιακή άποψη για την επιστημονική μέθοδο, σύμφωνα με την οποία μια επιστημονική υπόθεση ελέγχεται με τα πειραματικά αποτελέσματα. Αντιθέτως την ίδια εποχή οι Kaufmann και Wiechert ενώ υπολόγισαν και αυτοί πειραματικά τον λόγο m/e των καθοδικών ακτίνων, δεν μπόρεσαν να καταλήξουν σε κανένα συμπέρασμα για τη φύση τους, να προχωρήσουν δηλαδή σε μία θεωρητική ερμηνεία των πειραματικών δεδομένων τους.

Το μοντέλο του Thomson διέθετε ηλεκτρική σταθερότητα, αφού τα ηλεκτρόνια ισορροπούσαν σε συμμετρικές διατάξεις μέσα στην σφαίρα του θετικού φορτίου, αλλά δεν ερμήνευε τα έντονα γραμμικά φάσματα ακόμη και του υδρογόνου.

Ο Rutherford, του οποίου η βασική ερευνητική του ενασχόληση την εποχή αυτή αφορούσε τη ραδιενέργεια, με τους συνεργάτες του Hans Geiger και Ernst Marsden, σε μια σειρά από πειράματα από το 1909 μέχρι το 1910 και ενώ η ανάπτυξη της Κβαντικής μηχανικής είχε αρχίσει, ανακάλυψαν τον πυρήνα του ατόμου. Ο ίδιος για να ερμηνεύσει τα απροσδόκητα αποτελέσματα της οπισθοσκέδασης των σωματίων α, εισήγαγε το ατομικό του μοντέλο γνωστό ως πλανητικό, που παρουσιάστηκε στο Philosophical Magazine τον Μάιο του 1911.

Το μοντέλο του βοήθησε στην ερμηνεία μιας ευρείας περιοχής χημικών φαινομένων, όμως ο ίδιος δεν ασχολήθηκε με την περιοδικότητα των ιδιοτήτων των χημικών στοιχείων ούτε έκανε οποιαδήποτε προσπάθεια για να προσδιορίσει την κατανομή των ηλεκτρονίων γύρω από τον πυρήνα (Scerri 2000b). Η τυχαία αλληλουχία γεγονότων και η έξυπνη εκμετάλλευση των τυχαίων ανακαλύψεων, που οδήγησαν στη μνημειώδη για την εποχή του πυρηνική θεωρία του ατόμου του Rutherford περιγράφονται από τον ίδιο στο δοκίμιό του 'Εξέλιξη της θεωρίας της ατομικής δομής' που δημοσιεύτηκε το 1940 στο Background to Modern Science (Serway et al. 2001).

Η συνέπεια της δημιουργίας ενός πυρηνικού ατομικού μοντέλου έδωσε υπόσταση σε νέα ερωτήματα από τα οποία βασικότερα ήταν:

- ⊕ Αν υπάρχουν μόνο Z θετικά φορτία στον πυρήνα, από τι απαρτίζεται το άλλο μισό του ατομικού βάρους;
- ⊕ Πώς εξασφαλίζεται η συνεκτική δύναμη που συγκρατεί πολλά πρωτόνια περιορισμένα σε μια απίστευτα μικρή περιοχή 10^{-14} m;
- ⊕ Πώς κινούνται τα ηλεκτρόνια γύρω από τον πυρήνα και πώς αυτή η κίνησή τους εξηγεί τις παρατηρούμενες φασματικές γραμμές;

Ο Rutherford έδωσε κάποιες απαντήσεις χωρίς επιτυχία στα δύο πρώτα ερωτήματα, ενώ το τρίτο αποτέλεσε το κορυφαίο θέμα στο έργο του Bohr.

2.3 Η παλιά Κβαντική θεωρία – Το άτομο του Bohr

2.3.1 Η ατομική θεωρία του Niels Bohr

Προς τα τέλη του 19ου αιώνα η Κλασική Φυσική είχε πια φτάσει στην ιστορική της ολοκλήρωση. Στους φυσικούς της εποχής κυριαρχεί η αντίληψη ότι ο οριακός – και μέχρι σήμερα ανεκπλήρωτος – στόχος της φυσικής να φτάσει σε έσχατη και τελική ερμηνεία του υλικού κόσμου είχε πραγματοποιηθεί. Το 1899 ο Michelson έγραφε:

‘Όλοι οι θεμελιώδεις νόμοι και δεδομένα της φυσικής επιστήμης έχουν ήδη ανακαλυφθεί και είναι τόσο σταθερά εδραιωμένοι, ώστε η πιθανότητα να ανατραπούν κάποτε ως αποτέλεσμα νέων ανακαλύψεων είναι τελείως μακρινή’ (Τραχανάς 2005).

Όμως ένα χρόνο μετά στις 14 Δεκεμβρίου του 1900 ο Max Planck θα ανακοινώσει στην ακαδημία του Βερολίνου την εργασία του για το μέλαν σώμα και θα ανοίξει εντελώς ξαφνικά το δρόμο για την ανάπτυξη της Κβαντομηχανικής, που θα εδραιωθεί τελικά το 1927.

Για να προχωρήσουμε προς την πλήρη κατανόηση της νέας φυσικής θεωρίας είναι απαραίτητο ‘να συνειδητοποιήσουμε πρώτα την πλήρη χρεωκοπία της Κλασικής Φυσικής στο ατομικό επίπεδο. Την απόλυτη αδυναμία της να ερμηνεύσει όχι κάποια λεπτομερειακά χαρακτηριστικά του ατομικού μικρόκοσμου, αλλά την ίδια την ύπαρξη των βασικών συστατικών του: Των ατόμων και των μορίων’ (Τραχανάς 2005).

Τι προκάλεσε όμως την κατάρρευση της κλασικής φυσικής; *Η αρχή του κυματοσωματικού διϊσμού*. Δηλαδή η διαπίστωση – ύστερα από περίπου εικοσιπέντε χρόνια πειραματικής έρευνας του μικρόκοσμου - ότι *τα πάντα στη φύση έχουν διπλή υφή*. Είναι σωματίδια και κύματα ταυτόχρονα (Τραχανάς 2005).

Ο Planck κατέληξε στον νόμο της ακτινοβολίας αναλύοντας τη συνεργασία μεταξύ της ακτινοβολίας μέσα σε κοιλότητα και των ατόμων που αποτελούν τα τοιχώματα της κοιλότητας. Τα άτομα αυτά ‘συμπεριφέρονται’ σαν μικροσκοπικοί ταλαντωτές, ο καθένας με μια χαρακτηριστική συχνότητα ταλαντώσεως. Αυτοί ακτινοβολούν ενέργεια υπό μορφή ερτζιανών κυμάτων, που είχε ήδη ανακαλυφθεί από τον Hertz, μέσα στην κοιλότητα και απορροφούν ενέργεια από αυτήν. Είναι δυνατό να συμπεράνουμε τα χαρακτηριστικά της ακτινοβολίας της κοιλότητας από τα χαρακτηριστικά των ταλαντωτών που παράγουν την ενέργεια αυτή.

Κλασικά η ενέργεια από αυτούς τους μικροσκοπικούς ταλαντωτές είναι μία ομαλά συνεχής μεταβλητή. Ο Planck έκανε μια ριζοσπαστική υπόθεση: οι ατομικοί ταλαντωτές δεν μπορούν να έχουν οποιαδήποτε ενέργεια E αλλά μόνο ενέργειες επιλεγμένες από ένα διακεκριμένο σύνολο, που ορίστηκε ως:

$$E = nhf (n = 1, 2, 3...)$$

όπου f είναι η συχνότητα ταλαντώσεως και h είναι η σταθερά του Planck, η οποία εισάγεται για πρώτη φορά. Η ενέργεια ενός ταλαντωτή είναι κβαντισμένη και ο n είναι κβαντικός αριθμός (Halliday – Resnick 1989). Η Κλασική Φυσική ίσχυε με την παραδοχή ότι κάποιο μέγεθος, όπως η ενέργεια, επιτρέπονταν να λάβει ορισμένες μόνο τιμές και ονομάζονταν ‘κβαντισμένο’.

Το επόμενο βήμα έγινε από τον Einstein το 1905, ο οποίος έθεσε το αξίωμα ότι σε μερικές περιπτώσεις η ενέργεια του φωτός είναι κβαντισμένη δηλαδή συγκεντρωμένη σε πακέτα ενέργειας, που αργότερα ονομάστηκαν *φωτόνια*. Αυτά τα πακέτα ενέργειας του φωτός που ως κύμα έχει συχνότητα f , θεωρούνται σωματίδια με μηδενική μάζα ηρεμίας και ενέργεια

$$E = hf$$

Η ορμή τους δίνεται από τη σχέση που ο Einstein εισήγαγε και για την Θεωρία της Σχετικότητας:

$$E = pc$$

Έτσι ο Einstein πρότεινε την κυματοσωματιδιακή φύση του φωτός, που έδινε απάντηση σε πολλά από τα ερωτήματα που απασχολούσαν τους φυσικούς μέχρι τότε.

Όμως ‘μέσα στο κλασικό πλαίσιο η συνύπαρξη σωματιδιακών και κυματικών ιδιοτήτων είναι όχι απλώς αδύνατη αλλά και λογικά αδιανόητη’, διότι ‘η διάκριση *σωματίδιο - κύμα* προσλαμβάνει στην κλασική φυσική τις διαστάσεις μιας καθαρά λογικής αντίφασης ανάμεσα στα αντιθετικά ζεύγη εννοιών *εντοπισμένο και αδιαίρετο* αφ’ ενός (\equiv σωματίδιο) και *εκτεταμένο και διαιρετό* αφ’ εταίρου (\equiv κύμα) (Τραχανάς 2005). Εφ’ όσον η διχοτόμηση αυτή του κόσμου αποδείχθηκε λανθασμένη και από τα πειραματικά δεδομένα, ήταν αναμενόμενη η κατάρρευση του κλασικού οικοδομήματος.

Στις αρχές του 20^{ου} αιώνα δύο από τα προβλήματα που αναζητούσαν τη λύση τους ήταν κατά ποια ακριβώς έννοια διέφεραν μεταξύ τους τα άτομα διαφορετικών στοιχείων, και πώς ερμηνεύονταν το διαφορετικό χρώμα, που εξέπεμπαν τα άτομα διαφορετικών αερίων στις λυχνίες εκκένωσης (Styer 2000). Ενώ, δηλαδή, η ατομική

φασματοσκοπία είχε αναπτυχθεί αρκετά ο μηχανισμός μέσα στο άτομο, που ήταν υπεύθυνος για την εκπομπή του φωτός παρέμενε ένα μυστήριο (Ford 1980). Πιο συγκεκριμένα, δύο ήταν τα ερωτήματα που απασχολούσαν την επιστημονική κοινότητα και στα οποία προσπάθησε να απαντήσει ο Bohr: Η μορφή των ατομικών φασμάτων και η ατομική σταθερότητα.

Ο Bohr μπήκε στο επιστημονικό στίβο το αρχών του αιώνα χωρίς επαγγελματικούς ή συναισθηματικούς δεσμούς με την κρατούσα φυσική φιλοσοφία. Μη έχοντας εκτεθεί στην αναμφισβήτητη γοητεία του κλασικού οικοδομήματος ήταν διατεθειμένος να το απαρνηθεί πιο εύκολα απ' όσο οι φυσικοί της προηγούμενης γενιάς. Έτσι τη στιγμή που ο Planck πάσχιζε να εκδιώξει τη σταθερά από τα ηλεκτρομαγνητικά φαινόμενα ο Bohr αποφάσισε να την εισαγάγει και στα ατομικά (Τραχανάς 1981).

Ξεκίνησε από την παρατήρηση ότι το μέγεθος του ατόμου του υδρογόνου είχε ένα καθορισμένο μέγεθος της τάξεως του 1 \AA , χωρίς να μπορεί να δώσει γι' αυτό μια λογική εξήγηση. Υπέθεσε ότι η σταθερά του Planck έπαιζε κάποιο ρόλο στα ατομικά φαινόμενα, οπότε συνδυάζοντάς την και με άλλα σταθερά μεγέθη, όπως μάζα του ηλεκτρονίου (m), φορτίο του ηλεκτρονίου (e) και ταχύτητα του φωτός (c) κατέληξε στο συμπέρασμα ότι η ακτίνα του ατόμου ήταν $a \sim h^2/2\pi m e^2$ του οποίου η αριθμητική τιμή είναι της τάξεως του 0.5 \AA . Από εκεί και πέρα ο δρόμος προς τις ομώνυμες συνθήκες ήταν πια ανοικτός (Τραχανάς 1981).

Τον Ιούλιο του 1913 δημοσιεύτηκε στο *Philosophical Magazine* το πρώτο μέρος μιας τριλογίας, από τον Bohr: Στην τέταρτη παράγραφο διατυπώνει τον ισχυρισμό του που άφησε εποχή:

‘Ο τρόπος θεώρησης των προβλημάτων αυτού του είδους, έχει όμως υποστεί σημαντικές αλλαγές που οφείλονται σε πειράματα πολύ διαφορετικών φαινομένων, όπως οι ειδικές θερμότητες, το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο, οι ακτίνες x, κ.λ.π. Το αποτέλεσμα της συζήτησης αυτών των ερωτήσεων, φαίνεται να είναι μια γενική αναγνώριση της ακαταλληλότητας της κλασικής ηλεκτροδυναμικής να περιγράψει συστήματα του μεγέθους του ατόμου... Φαίνεται απαραίτητο να εισάγουμε στους νόμους υπό αμφισβήτηση μια ποσότητα ξένη προς την κλασική ηλεκτροδυναμική, δηλαδή την σταθερά του Planck’.

Το πρόβλημα, που απασχόλησε τον Bohr στην αρχή, ήταν η σταθερότητα του ατόμου του Rutherford, διότι το πρότυπό του ερμήνευε πολύ καλά ένα ευρύ φάσμα από τα προβλήματα της Χημείας, ιδιαίτερα δε όσον αφορά τη φύση των στοιχείων, την περιοδικότητα και τις διαφορές μεταξύ τους. Ο ίδιος γράφει αναφερόμενος στο μοντέλο του ατόμου του Rutherford: *‘...συναντήσαμε σοβαρής φύσεως δυσκολίες από την προφα-*

νή μη σταθερότητα του συστήματος των ηλεκτρονίων' (Niaz 1998). Ο σκοπός του ήταν να εξηγήσει την παράδοξη σταθερότητά του και όχι τις σειρές Balmer και Paschen του φάσματος του υδρογόνου, όπως φαίνεται και από ένα γράμμα του ίδιου προς τον Rutherford τον Ιανουάριο του 1913:

Καθόλου δεν ασχολήθηκα με το πρόβλημα του υπολογισμού των συχνοτήτων που αντιστοιχούν στις γραμμές του ορατού φάσματος. Το μόνο που προσπάθησα είναι, στη βάση της απλής υπόθεσης που έκανα από την αρχή να συζητήσω τη δομή των ατόμων και των μορίων στη σταθερή τους κατάσταση'.

Ο Bohr κατάφερε να συνδυάσει την αρχή του κβάντου ενέργειας του Planck με το ατομικό πρότυπο του Rutherford. Βέβαια, αν και αναφέρει το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο στην αρχή της εργασίας του, στη συνέχεια υπονοεί ότι δεν είχε ακόμη παραδεχτεί την ιδέα του φωτονίου. Χρειαζόταν να χρησιμοποιήσει μόνο το γεγονός ότι η μεταβολή της ενέργειας E του ατόμου συνδέονται με τη σχέση $E = h\nu$.

Τέσσερις από τις ιδέες του αξίζουν ειδική αναφορά, διότι αποτελούν τμήμα και της σύγχρονης Κβαντικής Θεωρίας.

1. Η ιδέα της *στάσιμης κατάστασης*. Έθεσε ως αξίωμα ότι τα ηλεκτρόνια στα άτομα μπορούν να βρίσκονται σε διάφορες ενεργειακές καταστάσεις κίνησης, κάθε μια από τις οποίες είναι διακριτή και χαρακτηρίζεται από μια συγκεκριμένη ενέργεια. Μια τέτοια κατάσταση ονομάζεται *στάσιμη*. Άρα μπορούμε να συμπεράνουμε ότι η ενέργεια στα άτομα είναι κβαντισμένη μεταβλητή και μπορεί να πάρει μόνο ορισμένες τιμές.
2. Η ιδέα του *κβαντικού άλματος*. Σύμφωνα με την κλασική θεωρία, ένα φορτισμένο σωματίο που επιταχύνεται, άρα και το ηλεκτρόνιο που περιστρέφεται, όπως στο άτομο του Rutherford, θα έπρεπε να ακτινοβολεί συνέχεια και η συχνότητά του να αλλάζει με συνεχή τρόπο δημιουργώντας φασματικές ζώνες και όχι γραμμές. Το ηλεκτρόνιο θα κατέληγε στον πυρήνα και το άτομο θα ταυτίζονταν μ' αυτόν.

Ο Bohr υιοθετώντας την έννοια του φωτονίου από τον Einstein θεώρησε αξιωματικά ότι ένα άτομο παθαίνει 'αιφνίδιες' μεταπτώσεις (κβαντικά άλματα) από μια στάσιμη κατάσταση σε μια άλλη, με κάθε μια από τις οποίες τα ηλεκτρόνια αλλάζουν την κατάσταση κινήσεώς τους καθώς ακτινοβολούν ένα ορισμένο ποσό ενέργειας. Όταν το άτομο του υδρογόνου μεταβαίνει από μία στάσιμη κατάσταση ενέργειας E_n σε μία άλλη ενέργειας E_m , το ηλεκτρόνιο εκπέμπει ακτινοβολία συχνότητας ν που ικανοποιεί τη σχέση:

$$E_n - E_m = hf$$

Αυτή είναι και η *πρώτη συνθήκη* του Bohr.

Κλασικά το ηλεκτρόνιο πρέπει να ταλαντώνεται με μια συχνότητα ίση με αυτή που εκπέμπει και η ταλάντωση να διαρκεί τουλάχιστον τόσο, ώστε να γίνει ευκρινής και καθορισμένη η συχνότητα f , όπου

$$f = \frac{E_n - E_m}{h}$$

Ο χρόνος αυτός είναι της τάξης του 10^{-8} s, σύμφωνα με την σχέση $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$

Ο Rutherford σε μια επιστολή του είχε θέσει στον Bohr το ερώτημα: *‘Πώς αποφασίζει ένα ηλεκτρόνιο σε ποια συχνότητα θα ταλαντωθεί καθώς περνά από την μία στάσιμη κατάσταση στην άλλη; Μου φαίνεται ότι πρέπει να υποθέσεις ότι το ηλεκτρόνιο γνωρίζει προκαταβολικά πού θα σταματήσει’*. Σ’ αυτό απάντησε αργότερα η Κβαντική Θεωρία υπολογίζοντας την πιθανότητα των μεταπτώσεων. Η κάθε μια παραμένει το ίδιο απρόβλεπτη όπως και στην εποχή του Bohr!

3. *Η διατήρηση της ενέργειας* στον μικρόκοσμο. Ο Bohr κράτησε όση κλασική φυσική του φαινόταν ότι απέδιδε στο πεδίο του ατόμου. Υπέθεσε λοιπόν ότι ισχύει και εδώ η αρχή διατήρησης της ενέργειας. Ήταν ο πρώτος που χρησιμοποίησε σωστά αυτήν την αρχή στο μικρόκοσμο.
4. *Η αρχή της αντιστοιχίας*. Ήταν η γέφυρα που ένωσε την Κλασική με την Κβαντική Θεωρία. Πρότεινε για τη δεύτερη αυτό που ίσχυε ήδη για την Θεωρία της Σχετικότητας: Η Κβαντική Θεωρία οφείλει να συμφωνεί με την κλασική στο όριο όπου η δεύτερη είναι γνωστό ότι συμφωνεί με το πείραμα. Στην περίπτωση του ατομικού του προτύπου η Κβαντική Φυσική δίνει τα ίδια αποτελέσματα με την κλασική στις περιπτώσεις που η ενεργειακή μεταβολή μεταξύ στάσιμων καταστάσεων είναι μικρή, δηλαδή ο κβαντικός αριθμός n παίρνει μεγάλες τιμές και όταν το σύστημα γί-νεται πολύ μεγαλύτερο από το άτομο (Ford 1980).

Η αληθινά μεγάλη διορατικότητα του Bohr τον οδήγησε στο να διατυπώσει την άποψη ότι η κβάντωση της στροφορμής ήταν ένα αξίωμα που δεν προέκυπτε από κάποιον βαθύτερο νόμο και ότι η ισχύς της εξαρτώνταν απλώς από την συμφωνία μεταξύ του μοντέλου του και των πειραματικών δεδομένων. Απέδειξε με ευφυή τρόπο ότι η κβάντωση της στροφορμής είναι συνέπεια της ομαλής και σταδιακής εμφάνισης κλασικών αποτελεσμάτων από την Κβαντική Θεωρία στο όριο των μεγάλων συστημάτων. Συγκεκριμένα διατύπωσε το επιχείρημα, σύμφωνα με την αρχή της αντι-

στοιχίας, ότι οι κλασικοί νόμοι του Maxwell για την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία και οι κβαντικές συνθήκες για την εκπομπή και την κβάντωση της τροχιάς πρέπει να ισχύουν ταυτόχρονα. Κατέληξε δε στο συμπέρασμα ότι για τη στροφορμή L ισχύει ότι:

$$L = mvr = n\hbar, \text{ αυτή είναι η δεύτερη συνθήκη του Bohr (Ford 1980).}$$

Η Κβαντική Θεωρία απέδειξε αργότερα ότι αυτό δεν ισχύει ούτε για το άτομο του υδρογόνου στη θεμελιώδη κατάσταση. Σύμφωνα με την παραπάνω σχέση $L = 1$ όταν το άτομο του υδρογόνου βρίσκεται στη θεμελιώδη κατάσταση, ενώ σήμερα ξέρουμε και αποδεχόμαστε ότι $L = 0$ (Ford 1980), όπως αναλύεται διεξοδικά πιο κάτω στην παράγραφο 2.4.4. Η κβάντωση της στροφορμής, που αποτελεί μια ευφύεστατη διαισθητική εικασία (Young 1994), έπαιξε πολύ σημαντικό ρόλο για την ανάπτυξη της Κβαντικής Θεωρίας αργότερα.

2.3.2 Τα όρια του μοντέλου του Bohr

Ο Bohr δοκίμασε τη θεωρία του σε όλη της την έκταση, έχοντας ως τελικό του σκοπό την ανάπτυξη μιας θεωρητικής βάσης για τον περιοδικό πίνακά των στοιχείων. Για τα πολυηλεκτρονικά άτομα, οι βασικές ιδέες του για την δομή των στιβάδων έχουν ως εξής:

- ⊕ Τα ηλεκτρόνια των στοιχείων με μεγάλο ατομικό αριθμό κατανέμονται σε σταθερούς ομόκεντρους δακτυλίους με καθορισμένους αριθμούς επιτρεπόμενων ηλεκτρονίων σε κάθε δακτύλιο ή στιβάδα.
- ⊕ Ο αριθμός των ηλεκτρονίων στην εξώτερη στιβάδα καθορίζει το σθένος.

Πέρα όμως από το υδρογόνο και τα όμοια με αυτό άτομα, τα υδρογονοειδή, το μοντέλο του Bohr είχε περιορισμένη επιτυχία. Δεν μπορούσε επίσης να προβλέψει την ένταση των φασματικών γραμμών καθώς και να μελετήσει τις μη περιοδικές κινήσεις όπως η σκέδαση ηλεκτρονίου σε άτομο. Σε επιστημολογικό επίπεδο, επίσης, ουσιαστικά πρόκειται για ετερόκλητο μείγμα από μη κλασικές παραδοχές μέσα σε κλασικό εννοιολογικό πλαίσιο:

- ⊕ Διατηρείται η κλασική έννοια της τροχιάς, ενώ διατυπώνεται η αυθαίρετη παραδοχή ότι στις επιτρεπόμενες τροχιές το ηλεκτρόνιο δεν ακτινοβολεί, χωρίς να εξηγείται γιατί η κλασική ηλεκτροδυναμική δεν ισχύει σ' αυτή την περίπτωση.

⊕ Υπάρχουν, επίσης, τα ‘κβαντικά άλματα’. Υποτίθεται ότι το ηλεκτρόνιο δεν ακτινοβολεί ούτε στην αρχική, ούτε στην τελική τροχιά. Άρα θα ακτινοβολεί καθ’ οδόν. Όμως όποια και αν είναι η μορφή της κίνησης που οδηγεί το ηλεκτρόνιο από την μια τροχιά στην άλλη, θα είναι κατ’ ανάγκη απεριοδική και άρα το φάσμα συχνοτήτων που θα παίρνουμε συνεχές! Ο Bohr δεν έδωσε καμία ερμηνεία.

Μία εξήγηση θα μπορούσε να δοθεί, αν θεωρούσαμε ότι το ηλεκτρόνιο πηγαиноέρχεται αρκετά εκατομμύρια φορές μεταξύ της αρχικής και της τελικής κατάστασης μέχρι να αποδιεγερθεί δίνοντας την ενέργεια ως $h\nu$. Η συχνότητά του είναι της τάξης:

$$10^{14}(1 \pm 10^{-7})\text{Hz} = (10^{14} \pm 10^7)\text{Hz} = f + \Delta f$$

$$\Delta f \Delta t \approx 1 \Rightarrow \Delta t \approx \frac{1}{\Delta f} \approx \frac{1}{10^7} \approx 10^{-7} \text{ s}$$

Δηλαδή η διάρκεια του φωτονικού παλμού Δt είναι της τάξης το 10^{-7} s. Άρα το φωτόνιο ‘περιέχει’ 10^7 ταλαντώσεις σε 10^{-7} s. Το φάσμα είναι μεν συνεχές αλλά η μέση τιμή είναι 10^{14} Hz με εύρος $\pm 10^7$, δηλαδή 10^{-7} της μέσης τιμής, άρα πρακτικά γραμμικό και μέσα στο εύρος της γραμμής είναι συνεχές (Μπακάλης, προσωπική επικοινωνία).

Ο αδύνατος κρίκος στη θεωρία του Bohr ήταν η δεύτερη συνθήκη του, η εισαγωγή της έννοιας της κβαντισμένης κυκλικής τροχιάς για την περιγραφή των επιτρεπτών ενεργειακών καταστάσεων, ενώ η έννοια της ενεργειακής κβάντωσης έχει ακλόνητο πειραματικό υπόβαθρο (Τραχανάς 1981).

Η κβάντωση των ενεργειακών καταστάσεων στο άτομο εξηγεί με τον καλύτερο τρόπο την σταθερότητά του. Αν το άτομο μόνο σε ορισμένες διακριτές καταστάσεις μπορεί να υπάρξει, τότε η μετάβασή του από την μία στην άλλη μπορεί να γίνει μόνο με την απορρόφηση ενέργειας. Για το άτομο του υδρογόνου η μετάβαση από την θεμελιώδη κατάσταση στην πρώτη διεγερμένη, απαιτεί ενέργεια 10.2 eV. Κατά τις θερμικές κρούσεις σε θερμοκρασία δωματίου των ατόμων η ενέργεια που μπορεί να προσφερθεί είναι πολύ μικρότερη, της τάξης του 1/40 eV (Αν ενέργεια 1/40 eV αντιστοιχούν σε θερμοκρασία 300 K, τότε ενέργεια 10 eV αντιστοιχεί σε $300 \times 10 \times 40 = 120000$ K, θερμοκρασία, που είναι αδύνατο να επιτευχθεί πάνω στη γη!). Άρα στην θεμελιώδη στάθμη το άτομο είναι ευσταθές, διότι δε μπορεί να αποκτήσει την απαιτούμενη ενέργεια για να φτάσει στην επόμενη επιτρεπτή ενεργειακή στάθμη, για ένα ευρύ φάσμα θερμοκρασιών. Με την κλασική παραδοχή, αντίθετα, δεν υπάρχει κανένα ενεργειακό φάσμα που να χωρίζει την μια κατάσταση από την άλλη, άρα το άτομο σαν αυθύπαρκτη, σταθερή οντότητα δεν θα μπορούσε να υπάρχει. Το ηλεκτρόνιο θα είχε ήδη πέσει στον πυρήνα, θα υπήρχαν μόνο νετρόνια, όχι άτομα. Ένα καθαρά κλασικό σύμπαν δεν θα ήταν παρά μια άναρχη κίνηση σωματιδίων, χωρίς καμιά δυνατότητα σχηματισμού ευσταθών μικροσκοπικών συστημάτων. Κατά μείζονα λόγο δεν θα ήταν δυνατή η δημιουργία μακροσκοπικής ύλης με καθορισμένες και σταθερές ιδιότητες (Τραχανάς 1981).

2.4 Η ανάπτυξη της σύγχρονης Κβαντικής Θεωρίας

2.4.1 Ο κυματοσωματιδιακός δυϊσμός της ύλης

Μετά από όσα αναφέρθηκαν στην κριτική για τη θεωρία του Bohr είναι εύκολο να αντιληφθεί κανείς ότι το καίριο ερώτημα στη Φυσική του 1920 – 1923 είναι αν υπάρχει κάποιος λογικός τρόπος να ερμηνεύσουμε την ενεργειακή κβάντωση χωρίς να εισάγουμε την κλασικής προέλευσης έννοια των κβαντωμένων τροχιών. Την απάντηση έδωσε ο De Broglie ακολουθώντας τη λογική που φαίνεται στο παρακάτω απόσπασμα: *‘Είχα τελείως πειστεί ότι ο κυματοσωματιδιακός δυϊσμός που ανακαλύφθηκε από τον Einstein, στη θεωρία του για τα φωτεινά κβάντα, είναι απόλυτα γενικός και εκτείνεται σ’ όλη τη φυσική πραγματικότητα. Έτσι μου φαινόταν σίγουρο ότι, η κίνηση ενός σωματιδίου οποιουδήποτε είδους (φωτόνιο, ηλεκτρόνιο, πρωτόνιο κ.λπ.) συνοδεύεται πάντα και από τη διάδοση ενός κύματος’.*

Στο σημείο αυτό οφείλουμε να επισημάνουμε την σημασία αυτού το βήματος ανατρέχοντας σε όσα η Κλασική Φυσική δέχονταν μέχρι τότε για την ύλη και το κύμα. Υπήρχε μια απόλυτη διχοτόμηση του κόσμου σε δύο αλληλοαποκλειόμενες φυσικές οντότητες: τα σωματίδια και τα πεδία. Με την υπόθεση του Einstein το 1905 για τα φωτόνια η κλασική διχοτόμηση του κόσμου καταρρέει.

Η αρχή του *κυματοσωματιδιακού δυϊσμού* μπορεί να διατυπωθεί ως εξής: Ο κυματοσωματιδιακός δυϊσμός είναι ένα παγκόσμιο χαρακτηριστικό της ύλης σ' όλες τις μορφές. Οι σχέσεις που συνδέουν τα κυματικά με τα σωματιδιακά χαρακτηριστικά είναι:

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad f = \frac{E}{h}$$

Για ένα κύμα τα χαρακτηριστικά μεγέθη είναι το λ και το f , για ένα σωματίδιο η ορμή p και η ενέργεια E . Τέλος η σταθερά h του Planck είναι ο κρίκος, ο οποίος συνδέει την κυματική και σωματιδιακή φύση της ύλης και της ακτινοβολίας.

Ο De Broglie αποδεχόμενος το μοντέλο του Bohr πρότεινε, αν θέλουμε να δούμε το ηλεκτρόνιο να περιφέρεται γύρω από το κεντρικό πρωτόνιο σαν ένα κύμα, το κύμα να βρίσκεται στην ίδια φάση μετά από κάθε περιστροφή του ηλεκτρονίου. Αν δεν συνέβαινε αυτό το κύμα θα καταστρέφονταν από αποσβεστική συμβολή: Ας φανταστούμε το κύμα να ακολουθεί το ηλεκτρόνιο. Όπως ένα φίδι που δαγκώνει την ουρά του, το κύμα μπορεί να συμβάλει με τον εαυτό του. Η συνθήκη για να συμβεί αυτό είναι το μήκος της περιφέρειας της τροχιάς να είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του λ :

$$2\pi r = n\lambda$$

Η κυματική εικόνα του De Broglie για τις ηλεκτρονικές τροχιές στο άτομο του υδρογόνου βρίσκεται μεταξύ κλασικής – τροχιακής θεωρίας και Κβαντικής. Είναι δε ελλιπής σε δύο βασικά σημεία:

- ✦ Διατηρεί την ιδέα ότι η σαφώς καθορισμένη τροχιά του Bohr αποτελεί οδηγό για το κύμα.
- ✦ Αγνοεί την τρισδιάστατη υφή του κύματος και δίνει βαρύτητα μόνο στο λ κατά την υποτιθέμενη γραμμή διάδοσης.

Περιέχει όμως την κβάντωση της ενέργειας και της στροφορμής που διατηρείται και στην Σύγχρονη Θεωρία. Είναι επιτρεπτές μόνο εκείνες οι κυματοσυναρτήσεις που είναι πεπερασμένες και ικανοποιούν ορισμένες οριακές συνθήκες. Για το υποθετικό κύμα De Broglie η οριακή συνθήκη είναι το κύμα να αυτοενισχύεται.

Πώς όμως είναι δυνατόν το σωματίδιο να συμπεριφέρεται σαν κύμα χωρίς να χάνει την σωματιδιακή του υπόσταση;

Όταν εκτελούμε το πείραμα συμβολής από δύο σχισμές με δέσμη ηλεκτρονίων η εικόνα που παίρνουμε παρουσιάζει το χαρακτηριστικό σχήμα της κυματικής συμβολής. Δεν μπορούμε να προβλέψουμε που θα πέσει κάθε ηλεκτρόνιο και δεν μπορούμε να απαντήσουμε στην ερώτηση μέσω ποιας σχισμής πέρασε το κάθε ηλεκτρόνιο, χωρίς καμία προς τούτο παρατήρηση. Αυτό σημαίνει ότι το ηλεκτρόνιο παρουσιάζει μια κυματική ιδιότητα για της οποίας τη φύση δεν ξέρουμε απολύτως τίποτα και η οποία υπαγορεύει τη θέση των σωματίων στο πέτασμα (Μπακάλης, προσωπική επικοινωνία). Υπογραμμίζουμε δε το γεγονός ότι πειράματα αυτής της μορφής έχουν γίνει όχι μόνο με ‘μικρά’ ηλεκτρόνια, αλλά και με μόρια φουλερενίων (C_{60}) που η διάμετρός τους είναι $\sim 7\text{\AA}$, η μάζα τους $60 \times 12 \times 2000 = 1440000$ μεγαλύτερη από του ηλεκτρονίου και φαίνονται στο μικροσκόπιο.

Γενικά η ύλη συμπεριφέρεται σαν ‘κύμα’ κατά την κίνησή της και σαν σωματίο κατά την ανίχνευσή της (εύρεση της θέσης της σε κάποια χρονική στιγμή). Οι μετρήσεις της θέσης της ύλης δεν δίνουν το ίδιο αποτέλεσμα υπό τις ίδιες συνθήκες (Ford 1980). Καταλήγουμε λοιπόν στο συμπέρασμα ότι το ηλεκτρόνιο είναι μεν σωματίο, αλλά η κίνησή του δεν ακολουθεί κάποια συγκεκριμένη τροχιά (Οικονόμου 1992)! Επομένως, δεν μπορούμε να περιγράψουμε την κίνησή του με τους νόμους της Κλασικής Θεωρίας. Η κυματική του ιδιότητα μας οδηγεί να τα περιγράψουμε με μια κυματική ποσότητα, την κυματοσυνάρτηση ψ , στην οποία θα αναφερθούμε πιο κάτω.

Τα κυματοσωμάτια όπως το ηλεκτρόνιο θα τα ονομάζουμε στο εξής κβαντικά αντικείμενα διότι θεωρούμε ότι έχουν ιδιότητες, τις οποίες ερμηνεύει μόνο η Κβαντική Θεωρία. Εξακολουθούμε βέβαια, να μην μπορούμε να εμβαθύνουμε στην κυματική φύση των κβαντικών αντικειμένων, την οποία εκδηλώνουν πριν ανιχνευθούν και παραμένει πέρα από τις διαπιστωτικές μας ικανότητες.

Σύμφωνα με μία ερμηνευτική απόπειρα η συνύπαρξη κυματικών και σωματιδιακών ιδιοτήτων στο ίδιο φυσικό αντικείμενο είναι δυνατή, μόνο με την ερμηνεία του κύματος ως *κύματος πιθανότητας*. Δηλαδή ως ενός πολύ αφηρημένου μαθηματικού κύματος, που δεν αντιπροσωπεύει μια μετρήσιμη φυσική διαταραχή αλλά μόνο την πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο στη μια ή στην άλλη περιοχή του χώρου (Τραχανάς 2005). Η ανίχνευση καθενός από τα κβαντικά αντικείμενα αυτά υπαγορεύεται από ένα κύμα πιθανότητας. Αυτό σημαίνει ότι το ποσό ενέργειας, που όπως είπαμε περιέχει το κβαντικό αντικείμενο (ως κύμα), δεν μπορεί πριν ανιχνευτεί (εντοπισθεί) να είναι εντοπισμένο σε κάποιο σημείο του χώρου, αλλά υπάρχει καθορισμένη πιθανότητα να εντοπισθεί μέσα σε ένα δεδομένο χώρο.

2.4.2 Η εξίσωση Schrödinger

Ένα κβαντικό αντικείμενο χαρακτηρίζεται από μία κυματοσυνάρτηση, η οποία είναι μια συνάρτηση που εξαρτάται από τη θέση και το χρόνο και συμβολίζεται ως εξής: $\psi = \psi(x, y, z, t)$, επειδή αναφερόμαστε στο χώρο. Περιέχει όλες τις πληροφορίες που μπορεί να γίνουν γνωστές γι' αυτό, είναι η λύση μιας εξίσωσης, που πρότεινε ο Schrödinger τον Ιανουάριο του 1926 και φέρει το όνομά του.

Δεν μπορούμε να αποδείξουμε την εξίσωση αυτή από τις αρχές της φυσικής, είναι μια νέα αρχή. Συνδέεται όμως με τις σχέσεις του De Broglie και οι προβλέψεις της επαληθεύονται από τα πειραματικά αποτελέσματα. Αν τα σωματίδια ευρίσκονταν μόνο σε ελεύθερες από αλληλεπιδράσεις περιοχές με σταθερές την κινητική ενέργεια και την ορμή τους, η κατάστασή τους θα περιγράφονταν απλά από μια κυματοσυνάρτηση με τη μορφή ημιτονοειδούς ή συνημιτονοειδούς κύματος, που το μήκος του θα καθοριζόταν από την ορμή του σωματίου ($\lambda = h/p$).

Ο Schrödinger προσπάθησε να συμπεριλάβει την αλγεβρική εξίσωση του De Broglie ($\lambda = h/p$), που είναι κατάλληλη για ένα ορισμένο μήκος κύματος, σε μια διαφορική εξίσωση. Σε ένα ορισμένο σημείο η κυματοσυνάρτηση έχει ως λύση το ημιτονοειδές κύμα με λ που ικανοποιεί τις σχέσεις:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{(2mK)^{1/2}}, \text{ όπου } K \text{ είναι η κινητική ενέργεια του σωματίου.}$$

Για να περιγράψουμε κβαντικά αντικείμενα, που κινούνται σε μια διάσταση κάτω από την επίδραση ενός τυχαίου δυναμικού $V(x)$ και δεδομένου ότι $K + U = E$ (U είναι η δυναμική ενέργεια του κβαντικού αντικειμένου), η εξίσωση Schrödinger παίρνει την μορφή της ανεξάρτητης του χρόνου εξίσωσης Schrödinger σε μία διάσταση, η οποία μπορεί να θεωρηθεί σαν το κβαντικό ανάλογο της κλασικής εξίσωσης της διατήρησης της μηχανικής ενέργειας:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)] = 0$$

Αφού ο Erwin Schrödinger ανακάλυψε την ομώνυμη εξίσωσή του, το ερώτημα που έπρεπε να απαντηθεί ήταν η φυσική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης ψ , την οποία ο ίδιος λανθασμένα ερμήνευσε ως πυκνότητα του ηλεκτρικού φορτίου. Στο τέλος του 1926 ο Max Born διατύπωσε την στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης ψ , σύμφωνα με την οποία η κυματοσυνάρτηση δεν αντιπροσωπεύει ένα φυσικά παρατηρήσιμο κλασικό κύμα αλλά ένα ‘κύμα πιθανότητας’. Το τετράγωνο της απόλυτης τιμής της κυματοσυνάρτησης, $|\psi|^2$, μας δίνει την *πυκνότητα πιθανότητας* (την πιθανότητα ανά μονάδα όγκου) να βρούμε το σωματίδιο σε μια περιοχή του χώρου σε απόσταση r από τον πυρήνα. Η $|\psi|^2$ ονομάζεται και *συνάρτηση κατανομής πιθανότητας*. Σύμφωνα με την ερμηνεία αυτή το ηλεκτρόνιο και κάθε κβαντικό αντικείμενο δεν οφείλει να ‘διαχυθεί’ σε όλο τον όγκο του κύματος. Το κύμα περιγράφει απλώς την πιθανότητα να το βρούμε εδώ ή εκεί, αλλά ποτέ εδώ και εκεί ταυτόχρονα (Τραχανάς 2005).

Η εξίσωση του Schrödinger είναι μια εξίσωση ιδιοτιμών και από αυτό προκύπτει ότι για κάθε πρόβλημα μπορεί να έχει φυσικά παραδεκτές λύσεις, που μηδενίζονται στο $\pm\infty$ μόνο για μια διακριτή ακολουθία τιμών της E , που ονομάζονται *ιδιοτιμές* ενώ οι αντίστοιχες λύσεις ψ_n *ιδιοσυναρτήσεις* του προβλήματος.

Η κβάντωση της ενέργειας προκύπτει με τον καθορισμό των συνοριακών συνθηκών για την κυματοσυνάρτηση σε μία *δέσμια* κατάσταση. Δέσμιες καταστάσεις για φορτισμένα ή μη σωματίδια έχουμε όταν μπορούν να κινηθούν σε περιορισμένο χώρο. Για φορτισμένα σωματίδια το δυναμικό είναι αυτό που καθορίζει τον χώρο μέσα στον οποίο μπορούν να βρεθούν.

Αντίθετα το φάσμα των τιμών της θέσης x και της ορμής p δεν είναι διακριτό, αλλά συνεχές. Η θέση είναι μια συνεχής μεταβλητή για την κλασική αλλά και την Κβαντική φυσική και το ίδιο συμβαίνει με τη ορμή. Επίσης συνεχές είναι και το φάσμα της ενέργειας όταν η κυματοσυνάρτηση δε μηδενίζεται στο $\pm\infty$, δηλαδή αν θεωρηθεί ότι το κβαντικό αντικείμενο φτάνει στο άπειρο με κάποια ορμή (διαφορετική από το μηδέν).

2.4.3 Η αρχή της αβεβαιότητας ή της απροσδιοριστίας

Όταν αναφερόμαστε στο μικρόκοσμο, στον οποίο η κλίμακα των μεγεθών είναι πολύ μικρότερη από αυτή της καθημερινής μας εμπειρίας ($\sim 10^{-10}$ m), υπάρχουν θεμελιώδεις ενδογενείς περιορισμοί ως προς την ακρίβεια με την οποία μπορούμε να προσδιορίσουμε τη θέση και την ταχύτητα του σωματιδίου. Οι περιορισμοί αυτοί δεν αφορούν την ακρίβεια της πειραματικής μας διάταξης. Έτσι πολλά χαρακτηριστικά της συμπεριφοράς ενός κβαντικού αντικειμένου διατυπώνονται μόνο συναρτήσει πιθανοτήτων.

Η γνωστή αρχή της αβεβαιότητας ή της απροσδιοριστίας αποτελεί μια *αναγκαστική συνέπεια* της αρχής του κυματοσωματικού δυϊσμού. Ας θυμηθούμε ότι τα κβαντικά αντικείμενα δεν μπορούν να έχουν τροχιά όπως την εννοούμε στην κλασική θεωρία. Αυτό θα σήμαινε ότι θα μπορούσαμε να προσδιορίσουμε την θέση τους και την ταχύτητά τους με απόλυτη ακρίβεια ($\Delta x = 0$ και $\Delta v = 0$). Άρα θα πρέπει να υπάρχει κάποια θεμελιώδης ανισότητα που να εξασφαλίζει ότι δεν συμβαίνει αυτό. Η ανισότητα αυτή, αποκαλύφθηκε από τον Heisenberg και είναι από τις πιο χρήσιμες ιδέες στην Κβαντική θεωρία. Είναι μια γενική αρχή και γράφεται με διάφορες μορφές μία από τις οποίες είναι:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar, \Delta y \Delta p_y \geq \hbar, \Delta z \Delta p_z \geq \hbar \quad (1)$$

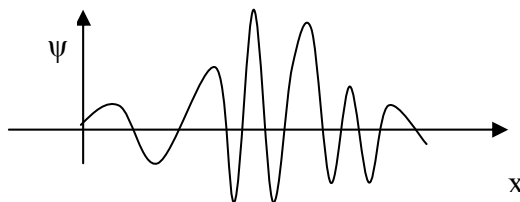
Δx , Δy και Δz : η αβεβαιότητα στη θέση κατά τους τρεις άξονες και Δp_x , Δp_y , Δp_z : η αβεβαιότητα των x , y , z συνιστωσών της ορμής. Μια άλλη μορφή της ίδιας αρχής είναι:

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (2)$$

Από αυτήν προκύπτει ότι η ενέργεια ενός συστήματος δεν μπορεί να καθοριστεί με απόλυτη ακρίβεια. Η αβεβαιότητά της εξαρτάται από το χρονικό διάστημα κατά το οποίο το σύστημα παραμένει στην κατάσταση αυτή (Young 1994). Οι σχέσεις (1) και (2) διαφέρουν στο ότι τα Δx , Δy , Δz και Δp_x , Δp_y , Δp_z , όπως και το ΔE είναι ενδογενείς ιδιότητες του σωματιδίου, ενώ το Δt είναι ένδειξη χρονομέτρου (Μπακάλης, προσωπική επικοινωνία).

Μπορούμε τώρα να προσπαθήσουμε να συνδέσουμε τα κβαντικά αντικείμενα, όπως το ηλεκτρόνιο, με την αδυναμία πλήρους εντοπισμού στο χώρο και την έννοια της πιθανότητας, η οποία είναι απαραίτητη για να περιγράψουμε τα χαρακτηριστικά τους:

Η εξίσωση De Broglie: $p = h/\lambda$ συνδέει το μήκος κύματος με την ορμή. Ένα κύμα έχει σαφώς καθορισμένο μήκος κύματος μόνο όταν είναι τέλεια ημιτονοειδές ή συνημιτονοειδές. Άρα ένα κβαντικό αντικείμενο που χαρακτηρίζεται από ένα τέτοιο κύμα έχει μια επακριβώς καθορισμένη ορμή, αλλά καθόλου καθορισμένη θέση, οπότε ισχύει $\Delta x = \infty$ και $\Delta p = 0$, δεδομένα που συμφωνούν και με την αρχή της αβεβαιότητας. Ένα κύμα όμως μπορεί να έχει πολλές άλλες μορφές, όπως για παράδειγμα του σχήματος 2.1, οπότε ονομάζεται κυματοπακέτο και είναι εντοπισμένο στο χώρο. Προκύπτει από την επαλληλία πολλών ημιτονοειδών κυμάτων (κυματοσυναρτήσεων ψ) με διαφορετικά μήκη κύματος και κατάλληλα πλάτη.



Σχήμα 2.1 – Κυματοπακέτο, που προκύπτει από την επαλληλία μεγάλου αριθμού κυματοσυναρτήσεων σε μία διάσταση.

Για ένα τέτοιο κύμα το μήκος μπορεί να ορισθεί κατά προσέγγιση, το ίδιο και η ορμή του. Εδώ έχουμε μια εκδήλωση πιθανότητας, η οποία συνδέεται στενά με το κύμα που χαρακτηρίζει το κβαντικό αντικείμενο, το οποίο έχει μεγαλύτερη πιθανότητα να βρεθεί σε κάποιες περιοχές παρά σε άλλες, αλλά και η ορμή του δεν έχει πλέον καθορισμένη τιμή. Το κύμα αυτό ή καλύτερα η κυματοσυνάρτηση αυτής της μορφής έχει προέλθει από υπέρθεση μεγάλου αριθμού ημιτονοειδών κυμάτων με διαφορετικά μήκη κύματος και κατάλληλα πλάτη. Για το κβαντικό αντικείμενο που περιγράφεται από αυτήν ισχύει:

$$\Delta x \approx \lambda \approx \frac{h}{\Delta p} \rightarrow \Delta x \Delta p \approx h$$

Η αρχή της αβεβαιότητας επαληθεύεται και μπορούμε να πούμε ότι υπάρχει μια αβεβαιότητα στη θέση του σωματίου και βέβαια μια αβεβαιότητα στην ορμή του. Μια στενή περιοχή μηκών κύματος λ σημαίνει στενή περιοχή ορμών και συνεπώς μικρό Δp , αλλά μεγάλο Δx (Young 1994), όπως προκύπτει από τους πιο κάτω συλλογισμούς:

Για την κατασκευή ενός κυματοπακέτου με χωρική έκταση Δx χρησιμοποιείται ένα φάσμα κυματαριθμών εύρους Δk , για το οποίο απαιτείται να ισχύει:

$$\Delta x \Delta k \approx 1$$

Δηλαδή χρησιμοποιούμε τόσο περισσότερα μήκη κύματος, όσο στενότερο κυματοπακέτο θέλουμε να κατασκευάσουμε και επομένως το κβαντικό αντικείμενο είναι περισσότερο εντοπισμένο. Μεγάλο όμως εύρος για το Δk σημαίνει μεγάλη διασπορά ορμών Δp που μπορεί να προκύψουν από μια μέτρηση. Τούτο συμφωνεί και με την παρατήρηση ότι το καθαρό ημιτονοειδές κύμα έχει *ταχύτητα φάσεως* μεγαλύτερη από την ταχύτητα του φωτός ($v_\phi > c$), ενώ το κυματοπακέτο έχει *ταχύτητα ομάδας* μικρότερη από αυτήν ($v_g < c$). Άρα το σωματίο πρέπει να είναι κυματοπακέτο, επομένως με ασαφή ορμή και ασαφή θέση (Μπακάλης, προσωπική επικοινωνία).

Η αρχή της αβεβαιότητας αναδεικνύεται ως μια ‘οικεία ιδιότητα’ γνωστή από τα κλασικά κύματα, που όμως το φυσικό περιεχόμενό της είναι διαφορετικό στην κβαντομηχανική λόγω του πιθανοκρατικού της χαρακτήρα (Τραχανάς 2005). Έχει γίνει πολλή συζήτηση, για το εάν η αρχή της αβεβαιότητας είναι εγγενής στην φύση ή μόνο μια συνέπεια των προσπαθειών μας να κάνουμε μετρήσεις στη φύση, δηλαδή να επεμβαίνουμε σ’ αυτήν (ο Einstein υποστήριζε τη δεύτερη άποψη). Η αναζήτηση απάντησης αφορά την φιλοσοφική προσέγγιση του θέματος.

Ο Johnston και οι συνεργάτες του (1998) διακρίνουν την έννοια της *αβεβαιότητας* (uncertainty) από αυτήν της *απροσδιοριστίας* (indeterminacy), θεωρώντας ότι η πρώτη είναι μια μετρήσιμη ιδιότητα, ενώ η δεύτερη μια ερμηνευτική έννοια κατανοήσιμη πλήρως από αυτούς που θεμελίωσαν την Κβαντική Θεωρία. Αποδίδουν δε σε κάθε μια από αυτές τις πιο κάτω ιδιότητες:

Απροσδιοριστία

- Ένα εγγενές γνώρισμα των νόμων της φύσης, ακριβώς όπως π.χ. μία καμπύλη Gauss ή εκθετική δεν έχει καθορισμένη έκταση.
- Εκφράζει το γεγονός ότι δεν μπορείς να προβλέψεις χωρίς αμφιβολία τι θα συμβεί σε κάθε περίπτωση στο μικροσκοπικό επίπεδο, εκτός από ειδικές περιπτώσεις.

- Το μόνο που μπορείς να προβλέψεις είναι η πιθανότητα με την οποία διαφορετικά επιτρεπόμενα αποτελέσματα μπορεί να συμβούν.

Αβεβαιότητα

- Αυτή αφορά ειδικά μια μέτρηση σε μικροσκοπική και μακροσκοπική κλίμακα.
- Κάθε τέτοια μέτρηση θα δώσει μια διασπορά αποτελεσμάτων.
- Εάν η ίδια μέτρηση επαναληφθεί κάτω από τις ίδιες ακριβώς συνθήκες, ένα διαφορετικό αποτέλεσμα (μεταξύ της διασποράς των αποτελεσμάτων) είναι πιθανό να βρεθεί.

Επειδή η Κβαντική θεωρία είναι μια θεμελιώδης φυσική θεωρία ισχύει στον μικρόκοσμο για τον οποίο επινοήθηκε αλλά και στον μακρόκοσμο για την πλήρη περιγραφή του οποίου επαρκεί η κλασική θεωρία. Για να μην υπάρχει σύγκρουση των δύο θεωριών η εφαρμογή των κβαντικών νόμων στις διαστάσεις του μακρόκοσμου πρέπει να δίνει τα κλασικά αποτελέσματα σύμφωνα και με την αρχή της ‘αντιστοιχίας’, που διατύπωσε ο Bohr. Εφαρμόζοντας επομένως, την αρχή της αβεβαιότητας ορμής – θέσης σε αντικείμενα μεγάλης μάζας ή σε κβαντικά αντικείμενα που κινούνται σε τροχιές μακροσκοπικών διαστάσεων, όπως τα ηλεκτρόνια σε κύκλοτρο, δεν θα έχει μετρήσιμες συνέπειες (Τραχανάς 2005), όπως φαίνεται και από τη σχέση:

$$\lambda = h/mv,$$

$$\text{όπου } m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \approx m_0, \text{ για μικρές ταχύτητες.}$$

2.4.4 Το άτομο του υδρογόνου

Το άτομο του υδρογόνου είναι το μοναδικό άτομο, για το οποίο η εξίσωση του Schrödinger επιλύεται ακριβώς, εάν αγνοήσουμε όλες τις άλλες επιδράσεις πλην της ηλεκτροστατικής μεταξύ πρωτονίου και ηλεκτρονίου. Για την περιγραφή της κατάστασης ενός ατομικού ηλεκτρονίου η Κβαντική Θεωρία δέχεται ότι χρειάζονται τέσσερις κβαντικοί αριθμοί (n, ℓ, m_ℓ, m_s). Οι αριθμοί αυτοί είχαν ήδη θεωρηθεί απαραίτητοι πριν ο Schrödinger προτείνει την εξίσωσή του. Από την επίλυσή της προκύπτουν οι τρεις πρώτοι και οι σχέσεις μεταξύ τους. Ο τέταρτος κβαντικός αριθμός προκύπτει από την γραμμικοποίηση της εξίσωσης του Schrödinger, την αναγωγή της δηλαδή σε εξίσωση 1^{ου} βαθμού, που πρωτοεμφανίστηκε κατά την επίλυση της σχετικιστικής γενίκευσης της εξίσωσης, η οποία εισήχθη από τον Paul Dirac αργότερα το 1928 και αφορά σωματίδια με ταχύτητες κοντά στην ταχύτητα του φωτός (100 φορές μεγαλύτερες) και παίρνει υπόψη και την ιδιοπεριστροφή του ηλεκτρονίου.

Είναι πολύ χρήσιμο να μελετήσουμε το άτομο του υδρογόνου, διότι εκτός από την ιστορική του σημασία για την οικοδόμηση της Κβαντικής θεωρίας, αποτελεί ένα ιδανικό φυσικό σύστημα για την μελέτη της. Εργαζόμενοι προς αυτήν την κατεύθυνση πρέπει να επιλύσουμε την τρισδιάστατη εξίσωση Schrödinger με την ακόλουθη μορφή:

$$\nabla^2 \psi = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi,$$

$$\text{όπου } V = -\frac{e^2}{r} \text{ και } \nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

Αν η κυματοσυνάρτηση ψ θεωρείται συνάρτηση των σφαιρικών συντεταγμένων r, θ και ϕ : $\psi = \psi(r, \theta, \phi)$, τότε μπορεί να δειχθεί ότι η εξίσωση Schrödinger μπορεί να επιλυθεί με χωρισμό μεταβλητών:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi)$$

Στην περίπτωση αυτή το δεξί μέρος της εξίσωσης χωρίζεται σε επιμέρους εξισώσεις.

Οι γωνιακές συναρτήσεις $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ είναι γνωστές ως σφαιρικές αρμονικές, κοινές για όλα τα κεντρικά δυναμικά και υπολογίζονται από τον τύπο $Y_{\ell m} \sim P_{\ell m}(\cos \theta) e^{im\phi}$, όπου $P_{\ell m}(\cos \theta)$ τα λεγόμενα συναφή πολυώνυμα Legendre.

Από φυσικής πλευράς οι $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ είναι ιδιοσυναρτήσεις των κβαντομηχανικών τελεστών $\ell_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$ και $\ell^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$ με ιδιοτιμές $\hbar m$ και $\hbar^2 l(l+1)$ αντίστοιχα.

Επομένως θα ισχύουν οι σχέσεις: $\ell_z Y_{\ell m} = \hbar m Y_{\ell m}$ και $\ell^2 Y_{\ell m} = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}$.

Τα ℓ και ℓ_z είναι οι τελεστές της στροφορμής και της προβολής της στον άξονα z και πρέπει να επανερμηνευτούν κβαντομηχανικά, εφ' όσον δεν μπορούμε να αναφερόμαστε στην κλασική περιστροφική κίνηση σε καθορισμένη τροχιά ενός σωματιδίου γύρω από κάποιο άξονα.

Ο κβαντικός αριθμός της στροφορμής ή αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός ℓ , επιτρέπεται να παίρνει μόνο τιμές: 0,1,2, ... ∞ , ως βαθμός πολωνύμου, του πολωνύμου Legendre.

Η μαθηματική σχέση που εκφράζει το μέτρο του διανύσματος της στροφορμής L είναι:

$$|L| = \hbar [\ell(\ell+1)]^{1/2}$$

Από αυτήν προκύπτει ότι υπάρχουν καταστάσεις με κβαντικό αριθμό $\ell = 0$, οπότε η στροφορμή είναι μηδέν. Το αποτέλεσμα αυτό δεν συμφωνεί με το μοντέλο του Bohr, όπου το ηλεκτρόνιο κινείται πάντα σε κάποια κυκλική τροχιά και για την στροφορμή του ισχύει $|L| \neq 0$.

Σύμφωνα με το μοντέλο του Bohr το ηλεκτρόνιο θα πρέπει να ταλαντώνεται μπρος πίσω πάνω σε ένα ευθύγραμμο τμήμα που περνά από τον πυρήνα ώστε $|L| = 0$. Αυτό φυσικά δεν συμβαίνει.

Η απαίτηση να είναι η ψ μονότιμη συνάρτηση οδηγεί στον περιορισμό να είναι η εκθετική συνάρτηση $\Phi(\varphi)$ περιοδική ως προς φ με περίοδο 2π . Άρα ισχύει

$$e^{im\varphi} = e^{im(\varphi+2\pi)} \text{ και επομένως } e^{2im\pi} = 1 \text{ από την οποία προκύπτει}$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Δηλαδή η κβάντωση του προσανατολισμού της στροφορμής προκύπτει από την απαίτηση η $\Phi(\varphi)$ να είναι περιοδική με περίοδο 2π .

Επίσης $|m| \leq \ell \Rightarrow -\ell \leq m \leq \ell$, που επιβάλλεται από την σχέση που συνδέει τα συναφή πολυώνυμα Legendre, με τα κοινά.

Συνεπώς ο τρίτος κβαντικός αριθμός του προσανατολισμού στροφορμής ή μαγνητικός κβαντικός αριθμός m ή m_ℓ όπως επίσης συμβολίζεται παίρνει τις τιμές:

$$m = -\ell, -\ell+1, \dots, 0, \dots, \ell-1, \ell$$

Καθορίζει την συνιστώσα της στροφορμής κατά τον άξονα z. Ο άξονας z επιλέγεται (αυθαίρετα) να ταυτίζεται με την διεύθυνση εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Στην περίπτωση αυτή το μέτρο της προβολής της στροφορμής του ηλεκτρονίου στον άξονα z παίρνει τιμές που καθορίζονται από την σχέση: $|L_z| = m_l \hbar$

Από την σχέση αυτή προκύπτει ότι η συνιστώσα της στροφορμής κατά μία οποιαδήποτε διεύθυνση στο χώρο που καθορίζουμε αυθαίρετα ως z, είναι περιορισμένη, έτσι ώστε οι γειτονικές επιτρεπόμενες να διαφέρουν ακριβώς κατά \hbar από αυτή.

Κατά την κβαντική θεώρηση του ατόμου για $\ell = 0$ και $m=0$, υπάρχει πιθανότητα το ηλεκτρόνιο να βρεθεί μέσα σε μια σφαίρα, οπότε όλες οι κατευθύνσεις στο χώρο είναι ισοδύναμες, δηλαδή η $\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi)$, παρουσιάζει σφαιρική συμμετρία – οι $\Theta(\theta) \Phi(\phi)$ είναι σταθερές: $Y(\theta, \phi) = Y(0, 0) = c$.

Για να προχωρήσουμε στην πλήρη λύση της εξίσωσης Schrödinger, θα λάβουμε υπ' όψη μας ότι το δυναμικό V μέσα στο οποίο βρίσκεται το ηλεκτρόνιο είναι ένα κεντρικό δυναμικό, δηλαδή $V = V(r)$. Ακόμη, αν θεωρήσουμε την ψ συνάρτηση μόνο της ακτινικής συντεταγμένης, δηλαδή $\psi = \psi(r)$, τότε δεν έχει γωνιακή εξάρτηση οπότε η κατανομή πιθανότητας του ηλεκτρονίου θα είναι σφαιρικά συμμετρική γύρω από τον πυρήνα. Η θεμελιώδης κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου θα περιγράφεται από την πρώτη από τις λύσεις της εξίσωσης αυτής:

$$\frac{1}{r}(r\psi)'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E + \frac{e^2}{r})\psi = 0 \text{ με } 0 < r < \infty$$

Η κβάντωση της ενέργειας προκύπτει από την ανάγκη να ικανοποιούνται οι συνοριακές συνθήκες, δηλαδή το γινόμενο του r επί την κυματοσυνάρτηση ψ πρέπει να μηδενίζεται ($r\psi = 0$) για $r = 0$ και για μεγάλες αποστάσεις από τον πυρήνα ($r \rightarrow \infty$), διότι περιγράφουμε δέσμιες καταστάσεις του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα. Θέτοντας ως συνοριακές συνθήκες τις

$$r\psi(0) = 0 \text{ και } r\psi(\infty) = 0$$

και αναζητώντας τις πολυωνυμικές ρίζες της εξίσωσης, καταλήγουμε στη σχέση:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{2n^2} \text{ με } n = 1, 2, \dots$$

Ο κύριος κβαντικός αριθμός n , καθορίζει την ενέργεια, που είναι κβαντισμένη, διότι το ηλεκτρόνιο είναι περιορισμένο στο χώρο.

Για την θεμελιώδη κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου η κυματοσυνάρτηση ψ , για $n = 1$, δίνεται από την σχέση

$$\psi_1(r) = \frac{1}{a_0 \sqrt{\pi a_0}} e^{-r/a_0}, \text{ όπου } a_0 = \hbar^2 / me^2, \text{ η ακτίνα του Bohr.}$$

Αντικαθιστώντας την αριθμητική τιμή των $\hbar = h/2\pi$, m η μάζα του ηλεκτρονίου και e το φορτίο του, υπολογίζουμε την ακτίνα του Bohr και την ενέργεια του ατόμου στην θεμελιώδη κατάσταση: $a_0 = 0,529 \text{ \AA}$ και $E_1 = -13,6 \text{ eV}$. Οι τιμές αυτές συμφωνούν με αυτές που υπολογίζονται από τη θεωρία του Bohr.

Αναζητώντας τις πολυωνυμικές λύσεις της ακτινικής συνάρτησης για το δυναμικό Coulomb ($V \propto -1/r$) στο άτομο του υδρογόνου για $\ell \geq 0, m \neq 0$, η απαίτηση να μηδενίζεται η $R(r)$ καθώς το r πλησιάζει το άπειρο οδηγεί στον περιορισμό:

$$\ell + 1 \leq n \text{ και επομένως για το } \ell \text{ θα ισχύει ότι: } \ell = 0, 1, \dots, n - 1$$

Τότε οι ακτινικές κυματοσυναρτήσεις θα εξαρτώνται και από τους δύο κβαντικούς αριθμούς n και ℓ και θα συμβολίζονται ως $R_{n\ell}(r)$.

Στους πίνακες 2.1, 2.2, 2.3 φαίνονται οι σφαιρικές αρμονικές μέχρι $\ell = 2$, οι ακτινικές συναρτήσεις $R_{n\ell}$ μέχρι $n = 3$ και οι ιδιοσυναρτήσεις της θεμελιώδους και της πρώτης διεγερμένης κατάστασης του ατόμου (Τραχανάς 2005). Οι συναρτήσεις του πρώτου πίνακα προκύπτουν πολλαπλασιάζοντας μεταξύ τους τις αντίστοιχες σφαιρικές και ακτινικές από το δεύτερο και τον τρίτο πίνακα.

Πίνακας 2.1 - Οι ιδιοσυναρτήσεις της θεμελιώδους και της πρώτης διεγερμένης κατάστασης του ατόμου του υδρογόνου (Τραχανάς 2005)

	$\ell=0$	$\ell=1$
$n=1$	$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}$	
$n=2$	$\psi_{200} = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(1 - \frac{r}{2}\right) e^{-r/2}$	$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} r e^{-r/2} \cos \theta$ $\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} r e^{-r/2} \sin \theta e^{\pm i\phi}$

Πίνακας 2.2 - Οι σφαιρικές αρμονικές μέχρι $\ell=2$ (Τραχανάς 2005)

	$\ell=0$	$\ell=1$	$\ell=2$
$m=2$			$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$
$m=1$		$Y_{11} = \frac{3}{\sqrt{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$	$Y_{21} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{i\phi}$
$m=0$	$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$Y_{10} = \frac{3}{\sqrt{4\pi}} \cos \theta$	$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2 \theta - 1)$
$m=-1$		$Y_{1,-1} = -\frac{3}{\sqrt{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}$	$Y_{2,-1} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{-i\phi}$
$m=-2$			$Y_{2,-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\phi}$

Πίνακας 2.3 - Οι ακτινικές συναρτήσεις $R_{n\ell}$ μέχρι $n = 3$ (Τραχανάς 2005)

	$\ell=0$	$\ell=1$	$\ell=2$
$n=1$	$R_{10} = 2e^{-r}$		
$n=2$	$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{r}{2}\right) e^{-r/2}$	$R_{21} = \frac{r}{2\sqrt{6}} e^{-r/2}$	
$n=3$	$R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \left(1 - \frac{2r}{3} + \frac{2r^2}{27}\right) e^{-r/3}$	$R_{31} = \frac{8r}{27\sqrt{6}} \left(1 - \frac{r}{6}\right) e^{-r/3}$	$R_{32} = \frac{4r^3}{81\sqrt{30}} e^{-r/3}$

Για τον τέταρτο κβαντικό αριθμό του μέτρου του σπιν s , αναφέρουμε ότι η ύπαρξή του επιβεβαιώνεται πειραματικά, αφορά τον μικρόκοσμο επομένως και το άτομο του υδρογόνου. Παίρνει πάντα την τιμή $\frac{1}{2}$. Το μέτρο του διανύσματος του σπιν $|S|$ δίνεται από τη σχέση:

$$S = [s(s+1)]^{1/2} \hbar = [1/2 (1/2+1)]^{1/2} \hbar$$

Ο κβαντικός αριθμός του προσανατολισμού του σπιν m_s παίρνει τις τιμές $\pm 1/2$ και συνδέεται με την προβολή του διανύσματος S στον άξονα z . Το μέτρο της προβολής του διανύσματος S στον άξονα z δίνεται από τη σχέση:

$$S_z = m_s \hbar$$

Επειδή ο τέταρτος κβαντικός αριθμός δεν προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης Schrödinger σε δυναμικό Coulomb, δεν συμμετέχει στην διαμόρφωση της τιμής της ενέργειας ούτε βεβαίως στην μορφή του ηλεκτρονικού νέφους πιθανότητας.

Η άποψη ότι το σπιν του ηλεκτρονίου συνδέεται με την περιστροφή του περί τον άξονά του είναι απολύτως λανθασμένη για δύο κυρίως λόγους:

- Αν το σπιν οφείλονταν σε περιστροφή του ηλεκτρονίου περί τον άξονά του, η ταχύτητα περιφοράς ενός σημείου στον ισημερινό του θα ήταν πολύ μεγαλύτερη από την ταχύτητα του φωτός.
- Αν δεχτούμε το σπιν ως ιδιοπεριστροφή του ηλεκτρονίου, τότε κατά τις συγκρούσεις με άλλα σωματίδια ή άλλα ηλεκτρόνια, θα μπορούν να διεγερθούν ανώτερες καταστάσεις ιδιοπεριστροφής, οπότε ο κβαντικός αριθμός s θα εμφανιζόταν και με άλλες ανώτερες τιμές, το οποίο δεν συμβαίνει ποτέ.

Η πραγματική κατανόηση του σπιν αρχίζει από αυτό ακριβώς το σημείο: Την απόρριψη της κλασικής εικόνας (Τραχανάς 2005).

2.4.5 Η έννοια του τροχιακού

Έχει ήδη αναφερθεί ότι ένα κβαντικό αντικείμενο χαρακτηρίζεται από μία κυματοσυνάρτηση ψ . Η κυματοσυνάρτηση ενός ηλεκτρονίου που ανήκει σε άτομο, αν θεωρηθεί ότι δεν αλληλεπιδρά με άλλα ηλεκτρόνια, είναι συνάρτηση των θέσεών του και ονομάζεται ατομικό τροχιακό. Ο όρος είναι αρκετά περιγραφικός γιατί θυμίζει αφ' ενός τις κβαντωμένες τροχιές του Bohr, αφ' εταίρου μας προειδοποιεί ότι δεν πρόκειται για την τροχιά, αλλά το κβαντομηχανικό της ανάλογο. Θα μπορούσε να θεωρηθεί επίσης έννοια ισοδύναμη της κβαντικής κατάστασης του ηλεκτρονίου.

Μπορούμε να πούμε ότι οι γωνιακές συναρτήσεις καθορίζουν το σχήμα των τροχιακών στο χώρο, δηλαδή τον χώρο όπου εκτείνεται το ηλεκτρονικό νέφος και μπορούν να ταξινομηθούν σε ομάδες, κάθε μία από τις οποίες χαρακτηρίζεται από την τιμή του αζιμουθιακού κβαντικού αριθμού ℓ .

Για $\ell = 0$ ($m_\ell = 0$, ένα τροχιακό) η συνάρτηση είναι σφαιρικά συμμετρική και αντιστοιχεί στην κατάσταση που ονομάζεται s, για $\ell = 1$ ($m_\ell = -1, 0, 1$), προκύπτουν τρεις συναρτήσεις (τρία τροχιακά) που ονομάζονται p ενώ για $\ell = 2$ ($m_\ell = -2, -1, 0, 1, 2$) προκύπτουν πέντε συναρτήσεις (πέντε τροχιακά) που ονομάζονται d.

Κάθε πλήρες τροχιακό (ακτινική και γωνιακή συνάρτηση πολλαπλασιασμένες μαζί) περιγράφεται από την τιμή του n και του συμβόλου για την τιμή του ℓ : 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d,... Σ' αυτόν τον συμβολισμό συχνά περιλαμβάνονται και δείκτες, όπως 2p_x, 2p_y, 2p_z, που είναι τα τρία τροχιακά 2p και προκύπτουν συνδυασμοί των $\psi_{2,1,\pm 1}$.

Το τροχιακό 2p_z είναι η κυματοσυνάρτηση

$$\psi_{n\ell m} = \psi_{210} = Nre^{-r/2} \cos \theta \text{ ή } \psi_{2pz} = Nze^{-r/2},$$

N είναι μία σταθερά ποσότητα, που εξασφαλίζει ότι η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε όλο το χώρο είναι p=1 και αντιπροσωπεύει μια κατάσταση με $|L_z| = 0$.

Ομοίως τα τροχιακά 2p_x και 2p_y είναι οι κυματοσυναρτήσεις

$$\psi_{2px} = Nxe^{-r/2} \text{ και } \psi_{2py} = Nye^{-r/2}$$

Για να αντιπροσωπεύουν ομοίως καταστάσεις με $|L_x| = 0$ και $|L_y| = 0$, θα πρέπει να αποτελούν γραμμικό συνδυασμό των $\psi_{2,1,1}$ και $\psi_{2,1,-1}$, όπως ήδη αναφέρθηκε.

Αν λάβουμε υπόψη ότι $\psi_{2,1,\pm 1} = Nr e^{-r/2} \sin \theta e^{\pm i\phi}$, προκύπτει ότι:

$$\psi_{2px} = Nxe^{-r/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2,1,1} + \psi_{2,1,-1})$$

$$\psi_{2py} = Nye^{-r/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2,1,1} - \psi_{2,1,-1})$$

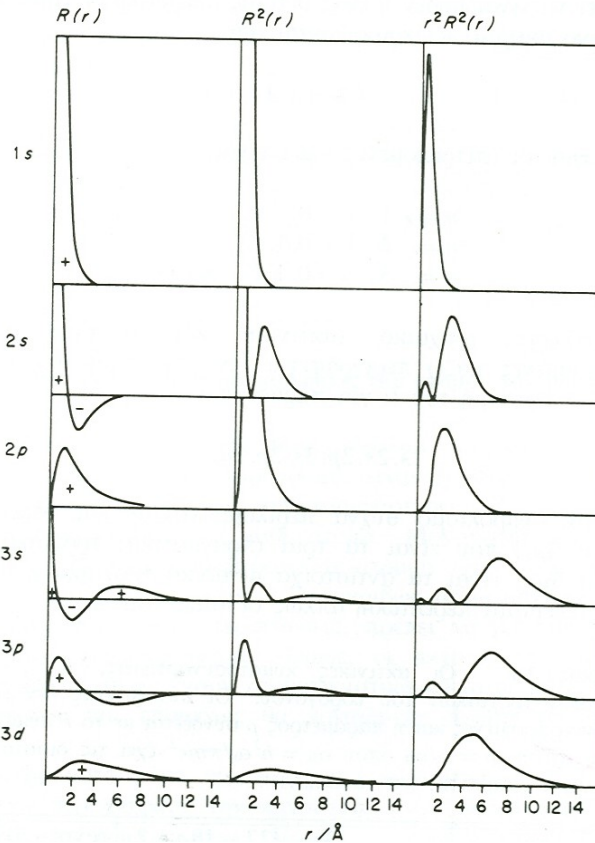
Επομένως το τροχιακό $2p_z$ αντιστοιχεί σε $m_\ell = 0$, ενώ τα $2p_x$ και $2p_y$ σε γραμμικούς συνδυασμούς των αντίστοιχων κυματοσυναρτήσεων με $m_\ell = \pm 1$, αντίθετα από ότι γράφεται σε πολλά σχολικά και πανεπιστημιακά ακόμα εγχειρίδια.

Όμως σύμφωνα με την αρχή της απροσδιοριστίας δεν είναι ταυτόχρονα καθορισμένη η τιμή της στροφορμής στους τρεις άξονες: Όταν $|L_z| = 0$, τα $|L_x|$ και $|L_y|$ δεν είναι καθορισμένα (Μπακάλης, προσωπική επικοινωνία).

Η $|\psi|^2$ ονομάζεται πυκνότητα πιθανότητας και εκφράζει την πιθανότητα να βρεθεί το κβαντικό αντικείμενο σε στοιχειώδη όγκο dV ή σημείο σε απόσταση r από τον πυρήνα. Για ένα φορτισμένο κβαντικό αντικείμενο η $|\psi|^2$ είναι ανάλογη της πυκνότητας φορτίου ρ , όταν το αντικείμενο κατανέμεται στον τρισδιάστατο χώρο. Δηλαδή $\rho = e|\psi|^2$ είναι η πυκνότητα φορτίου σε κάθε σημείο του χώρου, δηλ. το φορτίο ανά μονάδα όγκου, που μετριέται σε C/m^3 . Η τιμή της πυκνότητας φορτίου θα είναι μεγαλύτερη στα σημεία που η πιθανότητα να ανιχνευτεί το σωματίδιο είναι μεγαλύτερη, επομένως ισχύει: $\rho \sim |\psi|^2$.

Οι παρατηρήσιμες ιδιότητες του ηλεκτρονίου σχετίζονται όλες με την συνάρτηση πυκνότητας ηλεκτρονιακής πιθανότητας $|\psi|^2$ και αυτή είναι παντού θετική. Για τις ακτινικές συναρτήσεις η απεικόνιση της $|\psi|^2$ είναι περίπου της ίδιας μορφής με την ψ , αλλά με θετικό πρόσημο. Η ποσότητα $e|\psi|^2$ απεικονίζεται με σχήμα της ίδιας μορφής στο χώρο. Εκεί όπου είναι μεγαλύτερη το ηλεκτρόνιο έχει μεγαλύτερη πιθανότητα να ανιχνευτεί και περνάει μεγαλύτερο μέρος του χρόνου του.

Στις γραφικές παραστάσεις του σχήματος 2.2 φαίνεται η ακτινική κυματοσυνάρτηση R_{nl} , η πυκνότητα πιθανότητας που βρίσκεται αν υψώσουμε στο τετράγωνο την κυματοσυνάρτηση (R_{nl}^2), δηλαδή το ακτινικό μέρος της ψ και η συνάρτηση ακτινικής κατανομής πιθανότητας $4\pi r^2 R_{nl}^2$ για το άτομο του υδρογόνου. Στη θεμελιώδη κατάσταση (τροχιακό $1s$) και γενικά για s – τροχιακά, δεδομένου ότι οι σφαιρικές αρμονικές συναρτήσεις είναι σταθερές, η $|\psi|^2 = |R_{nl}|^2$ δείχνει ότι η πυκνότητα πιθανότητας είναι μέγιστη στον πυρήνα (πιθανότητα σε στοιχειώδη χώρο dn ή σε σημείο με απόσταση r).

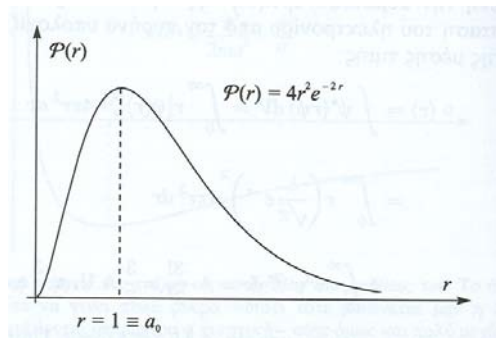


Σχήμα 2.2 - Ακτινικές κυματοσυναρτήσεις, πυκνότητες πιθανότητας και συναρτήσεις ακτινικής κατανομής πιθανότητας για διαφορετικές καταστάσεις του υδρογόνου (Murell et al. 1992).

Η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε απόσταση r , ανεξαρτήτως γωνίας, είναι διαφορετική από την *πυκνότητα πιθανότητας*, διότι τώρα δεν μας απασχολεί ένα σημείο, αλλά το σύνολο των σημείων που βρίσκονται σε μια επιφάνεια με ακτίνα r ή ακριβέστερα το σύνολο των σημείων που βρίσκονται σε σφαιρικό φλοιό μεταξύ r και $r + dr$. Για να βρούμε την πιθανότητα αυτή υπολογίζουμε την *συνάρτηση ακτινικής κατανομής πιθανότητας* $4\pi r^2 R_{nl}^2$ για την θεμελιώδη κατάσταση, διότι $\ell = 0$ και $m=0$, οπότε υπάρχει πιθανότητα το ηλεκτρόνιο να βρεθεί μέσα σε μια σφαίρα, αφού όπως έχει ήδη επισημανθεί η $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$, παρουσιάζει σφαιρική συμμετρία. Για τις διεγερμένες καταστάσεις του ατόμου του υδρογόνου ή τα πολυηλεκτρονικά άτομα υπολογίζουμε τη *συνάρτηση κατανομής πιθανότητας* $4\pi r^2 |\psi|^2$. Ισχύει δηλαδή

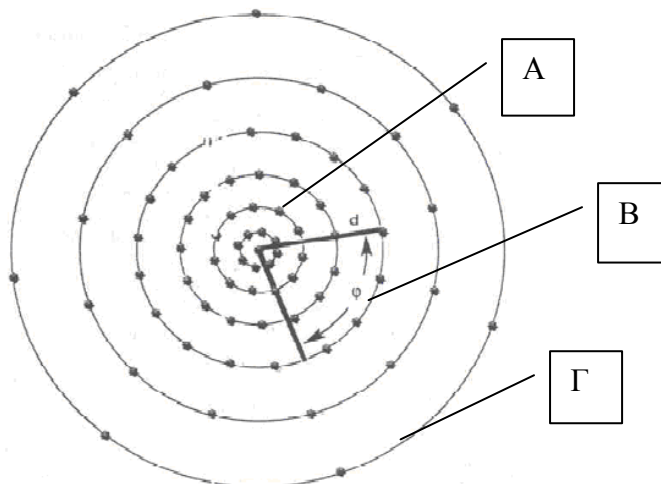
Πιθανότητα εντοπισμού του ηλεκτρονίου = Πυκνότητα πιθανότητας x Όγκο.

Αν υπολογίσουμε αυτήν την πιθανότητα στο χώρο φαίνεται ότι το ηλεκτρόνιο βρίσκεται τον περισσότερο χρόνο σε απόσταση 0.528 \AA από τον πυρήνα όση δηλαδή είναι η ακτίνα του Bohr, όπως φαίνεται στο σχήμα 2.3 (Justi and Gilbert 2000, Παπαφώτης 2001).



Σχήμα 2.3 - Η συνάρτηση ακτινικής κατανομής πιθανότητας στη θεμελιώδη κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου (Τραχανάς 2005)

Μια παραστατική αναλογία για την κατανόηση αυτής της διαφοράς φαίνεται στο σχήμα 2.4, η οποία παριστάνει την κάτοψη ενός δάσους που είναι πυκνότερο στο κέντρο και αραιώνει όσο απομακρύνεται κανείς από αυτό. Αν κάποιος κινείται κυκλικά γύρω από το κέντρο τότε τα περισσότερα δένδρα θα τα συναντήσει κινούμενος σε μια ακτίνα d από το κέντρο του δάσους, την ακτίνα του Bohr (Lagorio 2000, Παπαφώτης 2002). Η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στο φλοιό A είναι μικρότερη από αυτή του φλοιού B επειδή ο όγκος του φλοιού είναι μικρός. Η πιθανότητα να βρεθεί στο φλοιό Γ είναι μικρότερη του B, επειδή η πυκνότητα πιθανότητας στο Γ είναι μικρή.



Σχήμα 2.4 - Η αναλογία ‘του δάσους’, που αφορά τη συνάρτηση της κατανομής της πιθανότητας, για την κυματοσυνάρτηση ψ_{1s} , του υδρογόνου (Lagorio 2000).

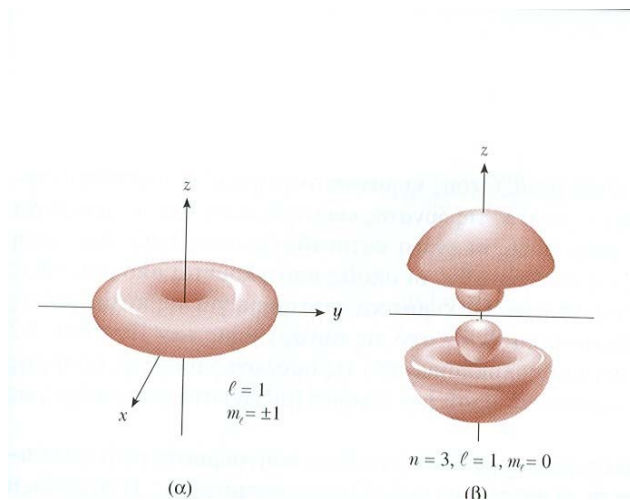
Διαπιστώνουμε επίσης ότι τα ατομικά τροχιακά έχουν θετική και αρνητική περιοχή. Το πρόσημο αυτό είναι σημαντικό για να κατανοήσουμε το χημικό δεσμό γιατί περιλαμβάνει επικάλυψη ή συμβολή των δύο ατομικών τροχιακών. Τα πρόσημα καθορίζουν αν αυτή είναι ενισχυτική ή καταστρεπτική.

Υπάρχουν τέσσερις ‘πρώτες’ διεγερμένες καταστάσεις για το άτομο του υδρογόνου οι $\psi_{2,0,0}$, $\psi_{2,1,0}$, $\psi_{2,1,1}$ και $\psi_{2,1,-1}$, οι οποίες έχουν όλες την ίδια ενέργεια $-3,4$ eV. Οι τρεις για τις οποίες ισχύει $\ell = 1$ αφορούν την κατάσταση p του ατόμου και δεν είναι σφαιρικά συμμετρικές. Όλες περιγράφονται από την ίδια ακτινική συνάρτηση $R_{n\ell}$ αλλά πολλαπλασιασμένη με διαφορετικές σφαιρικές αρμονικές $Y_{\ell m}$, άρα εξαρτώνται με διαφορετικό τρόπο από τις γωνίες φ , θ .

Οι συναρτήσεις $\psi_{2,1,\pm 1}$ έχουν τη μορφή: $\psi_{2,1,\pm 1} = N r e^{-r/2} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$ και επομένως η πυκνότητα πιθανότητας $|\psi_{2,1,\pm 1}|^2$ είναι ανεξάρτητη από την φ και επομένως συμμετρικές κατά τον άξονα z ως προς το επίπεδο xy.

Η $|\psi_{2,1,\pm 1}|^2$ απεικονίζεται στο σχήμα 2.5 (Serway et al. 2001). Η διεγερμένη αυτή κατάσταση προκύπτει με απορρόφηση δεξιόστροφα ή αριστερόστροφα κυκλικά πολωμένου φωτός που οδεύει κατά μήκος του άξονα z, με στροφορμή $+1$ ή -1 αντίστοιχα.

Η $2p_x$ κατάσταση προκύπτει από απορρόφηση γραμμικά πολωμένου φωτός (ηλεκτρικό πεδίο E_x) που οδεύει κατά μήκος του z άξονα, η $2p_y$ κατάσταση προκύπτει από γραμμικά πολωμένο φως (ηλεκτρικό πεδίο E_y) που οδεύει κατά μήκος του z άξονα, ενώ η $2p_z$, κατάσταση προκύπτει από γραμμικά πολωμένο φως (ηλεκτρικό πεδίο E_z) που οδεύει καθέτως προς τον z άξονα, κατά οποιαδήποτε ευθεία του xy επιπέδου και στέλνει το ηλεκτρόνιο στην $2p_z$ κατάσταση.



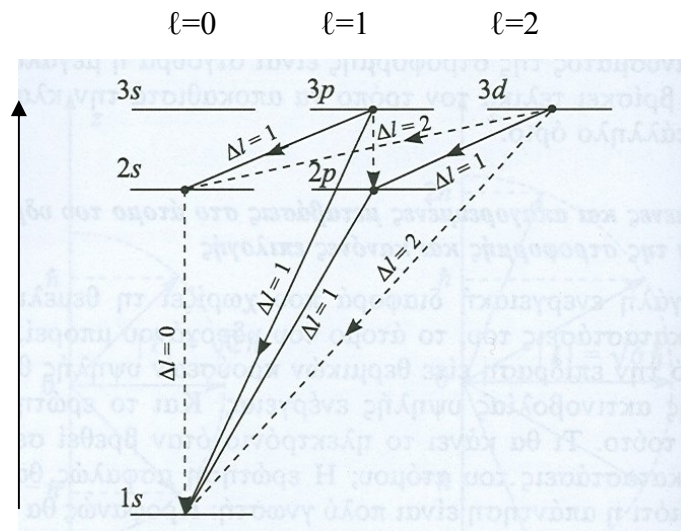
Σχήμα 2.5 - Η πυκνότητα πιθανότητας για διαφορετικές καταστάσεις του υδρογόνου, συμμετρική ως προς τον άξονα z (Serway et all. 2001).

Για να απεικονίσουμε και τους δύο κβαντικούς αριθμούς n , ℓ μαζί κατασκευάζουμε το διάγραμμα του σχήματος 2.6, που αναφέρεται στο άτομο του υδρογόνου. Η ενέργεια απεικονίζεται κατακόρυφα και η στροφορμή οριζόντια. Τα βέλη δείχνουν τυπικά κβαντικά άλματα που συνοδεύονται από εκπομπή φωτονίων. Στην Κβαντική θεωρία οι κβαντικές μεταβάσεις αντίθετα από το μοντέλο του Bohr διακρίνονται σε εκείνες που μπορούν να πραγματοποιηθούν (επιτρεπόμενες μεταβάσεις) και σε εκείνες που δε επιτρέπονται τουλάχιστον μέσα στα όρια της προσέγγισης εκπομπής διπόλου (απαγορευμένες μεταβάσεις) και έχουν πολύ μικρότερη πιθανότητα να πραγματοποιηθούν τελικά.

Στο άτομο του υδρογόνου οι κανόνες επιλογής που ορίζουν τις επιτρεπόμενες μεταβάσεις είναι οι ακόλουθοι:

$$\Delta\ell = \pm 1, \Delta m = 0, \pm 1, \Delta n = \text{τυχόν.}$$

Επειδή τα φωτόνια έχουν μια μονάδα στροφορμής οι ατομικές μεταπτώσεις γίνονται μεταξύ καταστάσεων που διαφέρουν κατά μια μονάδα στροφορμής.



Σχήμα 2.6 - Επιτρεπόμενες και απαγορευμένες μεταβάσεις στο άτομο του υδρογόνου (Τραχανάς 2005).

2.4.6 Το άτομο του υδρογόνου: Σχόλια για την εξίσωση Schrödinger και την κβαντική θεώρηση του ατόμου

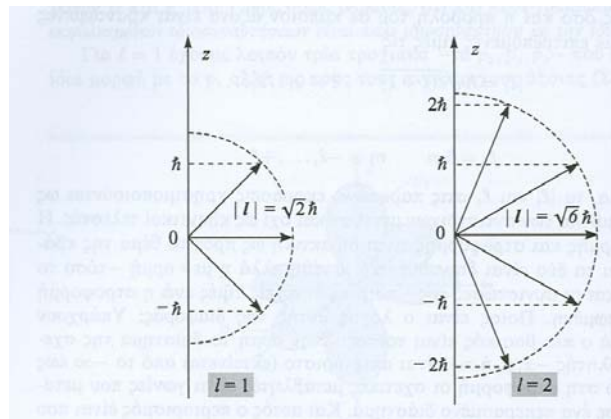
Ανακεφαλαιώνοντας και εστιάζοντας την προσοχή μας στο άτομο του υδρογόνου θα μπορούσαμε να επισημάνουμε τα εξής:

- Οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger για το άτομο του υδρογόνου περιγράφονται όπως ήδη αναφέραμε από διαχωριζόμενες κυματοσυναρτήσεις και ονομάζονται *στάσιμες*. Περιγράφουν δηλαδή καταστάσεις του ατόμου του υδρογόνου για τις οποίες η πυκνότητα πιθανότητας δεν αλλάζει με το χρόνο. Έτσι διατηρείται και στην Κβαντική Θεωρία η ιδέα της *στάσιμης κατάστασης*, την οποία εισήγαγε ο Bohr.
- Το πιο ‘αντικλασικό’ χαρακτηριστικό της κβαντικής στροφορμής ως διανύσματος είναι η απόλυτη αδυναμία της να ευθυγραμμιστεί με έναν άξονα, αφού η μέγιστη προβολή της $|L_z|_{\max}$ είναι πάντα μικρότερη από το μέτρο της:

$$|L_z|_{\max} = \ell \hbar < |L| = \hbar[\ell(\ell + 1)]^{1/2},$$

όπως προκύπτει από την γωνιακή διαφορική εξίσωση του Schrödinger. Εξάλλου οι συνιστώσες της στροφορμής δεν είναι δυνατό να μετρηθούν ταυτόχρονα και οι τρεις με απόλυτη ακρίβεια, όπως έχει ήδη αναφερθεί. Δεν είναι επομένως δυνατό να μάθουμε την ακριβή κατεύθυνση του διανύσματος της στροφορμής. Μπορεί να έχει οποιαδήποτε κατεύθυνση πάνω στην κωνική επιφάνεια, που σχηματίζει με τον άξονα z γωνία θ και το γεγονός είναι απαίτηση της αρχής της αβεβαιότητας.

Αν υποθέσουμε ότι θα μπορούσαμε να μάθουμε την ακριβή κατεύθυνση του διανύσματος της στροφορμής και ότι για παράδειγμα $|L_z| = |L|$, τότε το διάνυσμα L βρίσκεται κατά μήκος του z. Η κατάσταση αυτή αντιστοιχεί σε κβαντικό αντικείμενο, το οποίο βρίσκεται στο επίπεδο xy, οπότε η συνιστώσα z της ορμής του θα είναι μηδέν. Στην περίπτωση αυτή, σύμφωνα με την αρχή της αβεβαιότητας, θα έπρεπε η συντεταγμένη z του κβαντικού αντικειμένου να ήταν τελείως απροσδιόριστη. Αυτό όμως είναι αδύνατον, εφ’ όσον είναι σε δέσμια κατάσταση (ανήκει στο άτομο). Επομένως δεν μπορούμε να γνωρίζουμε με ακρίβεια την κατεύθυνση του L και το μέτρο της προβολής του σε μια ορισμένη θα είναι πάντα μικρότερο από το μέτρο του L (εκτός και αν το L μηδενίζεται) (σχήμα 2.7).

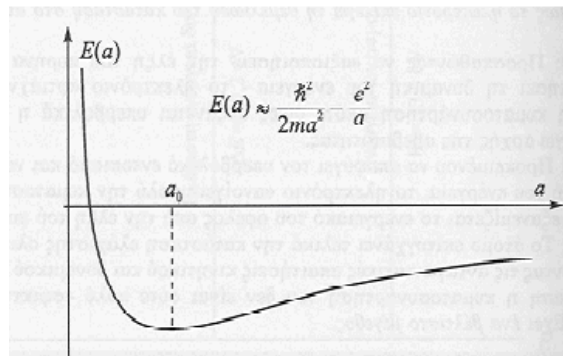


Σχήμα 2.7 - Το κβαντωμένο διάνυσμα της στροφορμής για $l=1$ και $l=2$ (Τραχανάς 2005).

- Από την επίλυση της εξίσωσης Schrödinger για σφαιρικά συμμετρικές ιδιοσυναρτήσεις καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι η ατομική ακτίνα a_0 , είναι ίση με την ακτίνα του Bohr. Όμως το μέγεθος του ατόμου του υδρογόνου στην κβαντομηχανική δεν μπορεί να οριστεί μονοσήμαντα με βάση το μέγεθος της ακτίνας, διότι η συνάρτηση ακτινικής πυκνότητας πιθανότητας μειώνεται εκθετικά σε συνάρτηση με την ακτίνα (σχήμα 2.3).
- Υπολογίζοντας την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο μέσα στην σφαίρα ακτίνας $0,529 \text{ \AA}$, βρίσκουμε ότι περνάει 32,3% του χρόνου του μέσα σ' αυτήν και το 90% του χρόνου του μέσα σε σφαίρα μεγαλύτερης ακτίνας ίσης με $2,66 a_0$ (Τραχανάς 2005).
- Δεδομένου ότι η ενέργεια του ηλεκτρονίου είναι κβαντωμένη, το άτομο στην θεμελιώδη κατάσταση θα είναι σταθερό, διότι δεν υπάρχει χαμηλότερη ενεργειακά επιτρεπόμενη κατάσταση και η ενεργειακή διαφορά μεταξύ αυτής και της πρώτης διεγερμένης είναι σημαντικά υψηλότερη από αυτές που ανταλλάσσονται μεταξύ των ατόμων κατά τις θερμικές κρούσεις σε θερμοκρασία δωματίου:

$$\Delta E = (-3,4\text{eV}) - (-13,6\text{eV}) = 10,2 \text{ eV}, \text{ ενώ } kT \Big|_{T \approx 300 \text{ K}} = 1/40 \text{ eV}$$

- Άμεσα συνδεδεμένο με τη σταθερότητα του ατόμου είναι και το μέγεθός του ώστε να επιτευχθεί η ελαχιστοποίηση της συνολικής ενέργειάς του: Κοντά στον πυρήνα ελαχιστοποιείται η δυναμική του ενέργεια λόγω της έλξης του από αυτόν, αλλά αυξάνεται η κινητική του ενέργεια λόγω της αρχής της αβεβαιότητας, ενώ μακριά από αυτόν συμβαίνει το αντίθετο (Σχήμα 2.8). Η μέση κινητική ενέργεια του ηλεκτρονίου λόγω της αρχής της αβεβαιότητας είναι ίση με $\bar{E} \approx \frac{\hbar^2}{2m\alpha^2}$, όπου α η ακτίνα του. Άρα το ηλεκτρόνιο ‘αντιστέκεται’ στον εντοπισμό του και ταυτόχρονα ‘εξασφαλίζεται’ η σταθερότητα του ατόμου.



Σχήμα 2.8 - Η ολική ενέργεια του ατόμου ως συνάρτηση του μεγέθους του (Τραχανάς 2005).

- Το άτομο είναι ασυμπίεστο. Ενώ ‘συμπεριφέρεται’ σαν να είναι συμπαγές, είναι τελείως κενό, διότι αν περιοριστεί σε μικρό χώρο θα αυξηθεί η κινητική του ενέργεια. Μπορεί να αποδειχθεί ότι για να συμπιεστεί ένα άτομο στο μισό του μέγεθος απαιτείται μια εξωτερική πίεση της τάξης των δέκα εκατομμυρίων ατμοσφαιρών (Τραχανάς 2005).

2.4.7 Η μέτρηση στην κβαντομηχανική

Ο ρόλος της μέτρησης στην Κβαντική Φυσική είναι τελείως διαφορετικός από αυτόν στην Κλασική Φυσική, κατά την οποία η επίδραση της μετρητικής συσκευής και της μεθόδου μέτρησης στο μετρούμενο σύστημα και επομένως στο αποτέλεσμα μπορεί να βελτιωθούν εκ των προτέρων ή να υπολογισθούν και να διορθωθούν εκ των υστέρων.

Σύμφωνα με την *αρχή της διέλευσης από φίλτρο*, που αποτελεί θεμελιώδη αρχή της Κβαντικής Μέτρησης, η επίδραση της μετρητικής συσκευής πάνω στο μετρούμενο σύστημα δεν μπορεί να είναι αμελητέα. Η πρώτη μέτρηση – πάνω στην κατάσταση επαλληλίας $\psi = \sum_n c_n \psi_n$ – μπορεί να δώσει όλα τα δυνατά αποτελέσματα E_n ($n = 1, 2, \dots$) με ‘a priori’ πιθανότητες $P_n = |c_n|^2$. Όμως κάθε φορά που η μέτρηση δίνει ένα από αυτά, η κυματοσυνάρτηση που ‘βγαίνει’ από τη συσκευή είναι η *ιδιοσυνάρτηση* της ιδιοτιμής που μετρήθηκε. Οπότε, λόγω αυτού, μια δεύτερη ίδια συσκευή, τοποθετημένη αμέσως μετά την προηγούμενη, θα επιβεβαιώνει το αποτέλεσμα της πρώτης κατά 100%.

Όταν μια κατάσταση, ως επαλληλία καταστάσεων, εισέρχεται στη μετρητική συσκευή κανείς δεν μπορεί να προβλέψει ποια από τις ιδιοσυναρτήσεις ψ_n θα επιλεγεί και άρα ποιο από τα πιθανά αποτελέσματα της μέτρησης θα προκύψει. *Η έκβαση μιας μετρητικής διαδικασίας είναι θεμελιωδώς μη προβλέψιμη στην κβαντομηχανική*. Στην πραγματικότητα η κβαντική μέτρηση – αυτό είναι το ουσιώδες περιεχόμενο της αρχής της διέλευσης από φίλτρο – καθορίζει την κατάσταση του κβαντικού συστήματος μετά την μέτρηση (Τραχανάς 2005). Αλλά αυτή δεν δίνει πληροφορία για την κατάσταση του συστήματος πριν τη μέτρηση με τον ίδιο τρόπο που ένα κυκλικό, ελλειπτικό ή γραμμικό πολωμένο κύμα, μετά την διέλευση από ένα πολωτικό φίλτρο είναι γραμμικά πολωμένο, αλλά αυτό δεν δίνει πληροφορία για το τι ήταν πριν περάσει από τον πολωτή (Μπακάλης, προσωπική επικοινωνία).

Η διαφορετικότητα και ο κεντρικός ρόλος της κβαντικής μέτρησης εκδηλώνεται και στην προσπάθειά μας να απαντήσουμε στα ερωτήματα τι είναι πραγματικά το σπιν (εσωτερική στροφορμή) ή η (τροχιακή) στροφορμή ενός κβαντικού αντικειμένου. Η δυσκολία να δοθεί μια άμεση και απόλυτα κατανοητή απάντηση στα ερωτήματα αυτά δεν οφείλεται στην ιδιόμορφη φύση των μεγεθών αυτών και ιδιαίτερος του σπιν, αλλά στην ίδια τη φύση της κβαντομηχανικής περιγραφής της φυσικής πραγματικότητας.

Ο κβαντομηχανικός φορμαλισμός, που είναι ιδιαίτερα ανεπτυγμένος, δε μας δίνει πληροφορίες για την αντικειμενική φύση των κβαντικών συστημάτων, αλλά για το τι θα δούμε αν τα παρατηρήσουμε, ποια είναι τα δυνατά αποτελέσματα των μετρήσεων μας και οι πιθανότητες εμφάνισής τους. Η διαδικασία επομένως της μέτρησης πρέπει να θεωρείται συστατικό στοιχείο της περιγραφής ενός κβαντομηχανικού συστήματος, συστατικό στοιχείο της ίδιας της κατανόησης του τι είναι ένα φυσικό μέγεθος ή μια φυσική κατάσταση, αφού αποκτούμε αντίληψη γι' αυτό μόνον αφότου το μετρήσουμε. Στην *Κβαντομηχανική επομένως τα φυσικά μεγέθη ορίζονται με τον τρόπο που μετριούνται*.

Ως εκ τούτου τα ερωτήματα που ετέθησαν πιο πάνω πρέπει να διατυπωθούν διαφορετικά. Τι σημαίνει ότι ένα κβαντικό αντικείμενο έχει spin s ; Τι σημαίνει ότι βρίσκεται σε μια κατάσταση με τροχιακή στροφορμή που καθορίζεται από τον κβαντικό αριθμό l ; Στο πρώτο ερώτημα η απάντηση είναι ότι το πέρασμα μιας δέσμης όμοιων με αυτό συστημάτων ως προς τη μάζα και το φορτίο, από την συσκευή Stern – Gerlach έδωσε $2s+1$ ίχνη. Στο δεύτερο ότι το πέρασμα μιας δέσμης όμοιων με αυτό συστημάτων από την συσκευή Stern – Gerlach έδωσε $2l+1$ ίχνη, υπό τον όρο ότι δε διαθέτει και εσωτερική στροφορμή, διότι τότε θα μετρήσουμε τη συνολική στροφορμή ως διανυσματικό άθροισμα των δύο. Άρα τα δύο μεγέθη έχουν τα ίδια φαινομενολογικά χαρακτηριστικά, την ίδια πειραματική υπογραφή (Τραχανάς 2005).

2.4.8 Μοντέλο περί ατόμου στην προσέγγιση κεντρικού πεδίου

Το μοντέλο του ατόμου που εισάγει η Κβαντική Θεωρία αρχικά κατασκευάστηκε για το άτομο του υδρογόνου. Το πολυηλεκτρονικό άτομο είναι ένα εξαιρετικά πολύπλοκο φυσικό σύστημα. Τα ηλεκτρόνιά του, πέρα από την έλξη του πυρήνα, υφίστανται και τις αμοιβαίες ηλεκτροστατικές απώσεις και αυτός είναι ένας από τους λόγους που η ακριβής επίλυση της εξίσωσης Schrödinger είναι αδύνατη. Για να κατανοήσουμε τα βασικά χαρακτηριστικά των στοιχείων κυρίως, όπως αυτά είναι τοποθετημένα στο περιοδικό σύστημα, προτάθηκε η προσέγγιση του κεντρικού πεδίου. Προχωρούμε έτσι σε μια προσεγγιστική λύση της εξίσωσης Schrödinger για την περιγραφή του ατόμου, σύμφωνα με την οποία όλα μαζί τα ηλεκτρόνια σχηματίζουν ένα νέφος αρνητικού φορτίου που είναι κατά μέσο όρο σφαιρικά συμμετρικό και περιβάλλει τον θετικά φορτισμένο πυρήνα.

Στην προσέγγιση αυτή υποθέτουμε ότι κάθε ηλεκτρόνιο βρίσκεται στο ολικό ηλεκτρικό πεδίο που οφείλεται στον πυρήνα και στο φορτισμένο νέφος που σχηματίζουν κατά μέσο όρο τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια. Σε πολύ μικρές αποστάσεις από τον πυρήνα το εξεταζόμενο ηλεκτρόνιο (που μπορεί να είναι οποιοδήποτε) 'βλέπει' το πλήρες φορτίο Ze^+ του ακάλυπτου πυρήνα. Καθώς όμως απομακρύνεται από τον πυρήνα, αυτός καλύπτεται βαθμιαία από τα $Z-1$ ηλεκτρόνια, τα οποία στο όριο $r \rightarrow \infty$ ουδετεροποιούν όλο το φορτίο εκτός από αυτό του ενός πρωτονίου (που αντιστοιχεί στο εξεταζόμενο ηλεκτρόνιο. Στην περίπτωση αυτή η κατάσταση του ηλεκτρονίου χαρακτηρίζεται πάλι από τους ίδιους κβαντικούς αριθμούς, αλλά η ενέργειά του δεν εξαρτάται μόνο από τον κβαντικό αριθμό n , αλλά και τον l .

Άρα οι κβαντικοί αριθμοί που χρησιμοποιούμε για να περιγράψουμε τις κβαντικές καταστάσεις (πιθανές ενεργειακές καταστάσεις) του ατόμου του υδρογόνου, μπορούν να χρησιμοποιηθούν προσεγγιστικά, για να δηλώσουν καταστάσεις ενός μοναδικού ηλεκτρονίου σε οποιοδήποτε άτομο, ανεξάρτητα από πόσα ηλεκτρόνια περιέχει. Οι ενέργειες και οι κυματικές συναρτήσεις είναι διαφορετικές, αλλά το χαρακτηριστικό σχήμα, η ταξινόμηση των καταστάσεων μέσα στις στιβάδες και τις υποστιβάδες και οι σχέσεις μεταξύ των κβαντικών αριθμών παραμένουν κατά το μάλλον ή ήττον, αμετάβλητα.

Για το ατομικό τροχιακό σε ένα πολυηλεκτρονικό άτομο θα μπορούσαμε να πούμε ότι είναι η κυματοσυνάρτηση ενός ηλεκτρονίου το οποίο βρίσκεται υπό την επίδραση του φορτίου του πυρήνα και όλων των άλλων ηλεκτρονίων. Για την μορφή της πρέπει να πάρουμε υπ' όψη και το βασικό αξίωμα της Κβαντικής θεωρίας, ότι όλα τα ταυτόσημα κβαντικά αντικείμενα, αυτά δηλαδή που έχουν απαράλλαχτες φυσικές ιδιότητες, όπως μάζα, φορτίο, σπιν κλπ. είναι μη διακριτά.

Στην Κλασική Μηχανική τα ταυτόσημα σωματίδια ξεχωρίζουν το καθένα από την πλήρως καθορισμένη τροχιά του. Στη Κβαντική Θεωρία αντίστοιχα η έννοια της τροχιάς δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί. Ούτε όμως και μέσω των κυματοσυναρτήσεων τους μπορούμε να τα διακρίνουμε. Αυτό θα ήταν δυνατόν αν το κάθε ηλεκτρόνιο είχε το δικό του 'νέφος πιθανότητας' ή η κυματοσυνάρτησή του ήταν εντοπισμένο κυματοπακέτο. Τότε θα μπορούσαμε να το ξεχωρίσουμε από όλα τα υπόλοιπα. Γενικά όμως τα 'νέφη πιθανότητας' των σωματιδίων που ανήκουν στο ίδιο φυσικό σύστημα αλληλεπικαλύπτονται. Για το λόγο αυτό, η κατάστασή τους πρέπει να περιγραφεί μέσω μιας ενιαίας κυματοσυνάρτησης ψ , ώστε ο τρόπος αρίθμησης τους να μην έχει καμιά

σημασία. Ακριβώς όπως στην περίπτωση που δύο κύματα κάνουν ένα διακρότημα και αυτό μετράμε (ακούμε), ενώ η διάκριση των δύο συνιστωσών είναι αδύνατη (Μπακάλης, προσωπική επικοινωνία). Επομένως στην Κβαντική Θεωρία, σε αντίθεση με την Κλασική Φυσική, η διάκριση των ταυτόσημων σωματιδίων είναι αδύνατη. Όχι μόνο η έννοια της τροχιάς, που επιτρέπει την αναγνώριση στην κλασική περίπτωση δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί, αλλά ούτε και ο εντοπισμός των κυματοπακέτων, αφού καταστρέφεται σχεδόν ακαριαία.

Υπενθυμίζουμε ακόμη την άποψη ότι στην πραγματικότητα τα ατομικά τροχιακά για τα πολυηλεκτρονικά άτομα δεν υπάρχουν, αλλά εξακολουθούμε να τα χρησιμοποιούμε γράφοντας την ηλεκτρονική δομή των ατόμων (Tsaparlis and Pappas 2002). Το σημαντικό σημείο είναι όχι μόνο ότι η Κβαντική θεωρία απαγορεύει την οπτική αναπαράσταση των ατομικών τροχιακών αλλά ότι επίσης απαγορεύει ακόμη και να ορίσεις ένα τροχιακό μαθηματικά, μέσω των κβαντικών αριθμών για κάθε ηλεκτρόνιο, εκτός από το άτομο του υδρογόνου. Με αυτό το ιδιαίτερο νόημα η Κβαντική Θεωρία μας λέει ότι τα τροχιακά και οι ηλεκτρονιακές δομές αυστηρά δεν υπάρχουν, αυτό σημαίνει ότι αυτά δεν αναφέρονται σε πραγματικές οντότητες στον φυσικό κόσμο (Scerri 2000a). Μπορούμε βέβαια να σημειώσουμε ότι τα παραπάνω ισχύουν, διότι οι κυματοσυναρτήσεις (καταστάσεις) των ηλεκτρονίων για τα πολυηλεκτρονικά άτομα προκύπτουν ως γραμμικοί συνδυασμοί συναρτήσεων διαφορετικών καταστάσεων με διαφορετική συνεισφορά καθεμίας.

Όταν λέμε, παραδείγματος χάρη, ότι ένα ηλεκτρόνιο πολυηλεκτρονικού ατόμου είναι στην 2s κατάσταση, αυτό σημαίνει ότι μεγαλύτερη συνεισφορά στον γραμμικό συνδυασμό έχει η κυματοσυνάρτηση της κατάστασης 2s. Άλλωστε αυτή η προσεγγιστική – πιθανολογική αντιμετώπιση αφορά τα εσωτερικά ηλεκτρόνια περισσότερο και λιγότερο τα ηλεκτρόνια των εξωτερικών φλοιών που καθορίζουν τα είδη των δεσμών και γενικότερα την χημική συμπεριφορά των στοιχείων. Είναι επομένως φυσικό αυτά να παρέχουν μια καλή εποπτεία.

2.4.9 Η απαγορευτική αρχή του Pauli

Η αρχή διατυπώθηκε από τον Αυστριακό Wolfrang Pauli το 1924. Σε ένα πολυηλεκτρονικό άτομο δεν μπορούν να υπάρχουν περισσότερα από ένα ηλεκτρόνια σε οποιαδήποτε δοσμένη κβαντική κατάσταση, που θα χαρακτηρίζεται από τους κβαντικούς αριθμούς n , l , m_l , m_s .

Αποδεικνύεται ότι η απαγορευτική αρχή του Pauli προκύπτει ως απαίτηση από την αρχή της μη διακρισιμότητας των ταυτόσημων σωματιδίων που έχει ήδη αναφερθεί. Η εξαγγελία της απαγορευτικής αρχής του Pauli έθεσε το πρόβλημα του κβαντικού αριθμού, που θα περιγράφει μια νέα ιδιότητα του ηλεκτρονίου πέραν της ενεργειακής του κατάστασης και της στροφορμής. Στο πρόβλημα αυτό δόθηκε απάντηση τον επόμενο χρόνο από τους Uhlenbeck και Goudsmit, που υπέθεσαν ότι το ηλεκτρόνιο διαθέτει και μια ιδιοστροφορμή, με δύο μόνο δυνατές τιμές προβολής σε κάποιο άξονα, που περιγράφονται από τον κβαντικό αριθμό m_s .

Πρέπει όμως να υπογραμμίσουμε ότι η αρχή αυτή ισχύει για τα φερμιόνια, όπως ονομάζονται τα σωματίδια με ημιακέραιο περιττό σπιν σαν απαίτηση της αρχής της μη διακρισιμότητας των ταυτόσημων σωματιδίων, δεν ισχύει όμως για σωματίδια όπως τα φωτόνια και τα μεσόνια με ακέραιο σπιν ($0, h/2\pi, 2h/2\pi, \dots$), τα οποία ονομάζονται μποζόνια. Αν τυχόν τα ηλεκτρόνια ήταν μποζόνια τότε η θεμελιώδης κατάσταση ενός πολυηλεκτρονικού ατόμου θα ήταν εκείνη στην οποία όλα τα ηλεκτρόνια θα βρισκόνταν στην χαμηλότερη ενεργειακή στάθμη. Έτσι οι ατομικές ακτίνες θα μίκραιναν και μάλιστα αντίστροφα με τον ατομικό αριθμό Z . Σαν αποτέλεσμα οι πυκνότητες της μακροσκοπικής ύλης θα εκτείνονταν σε έξη διαφορετικές τάξεις μεγέθους, από g/cm^3 σε tn/cm^3 . Ένας τέτοιος κόσμος θα ήταν αβίωτος, άρα τα ηλεκτρόνια είναι σίγουρα φερμιόνια.

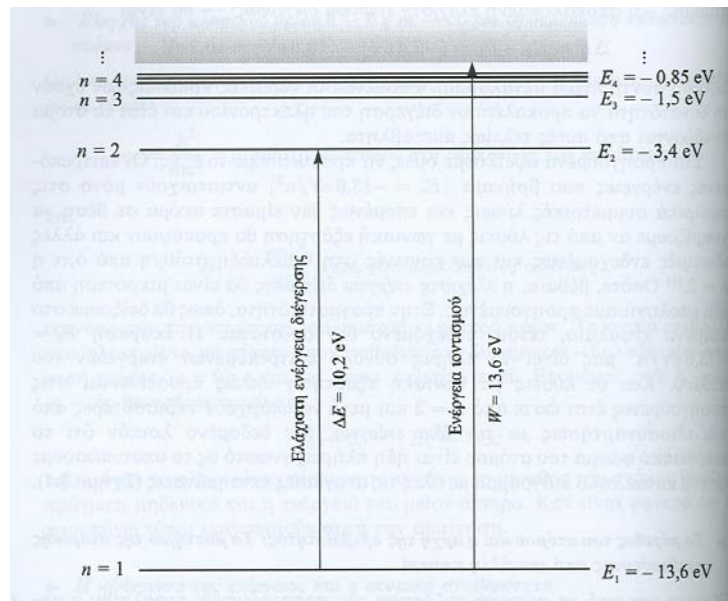
Στο σημείο αυτό θα πρέπει να διευκρινίσουμε ότι, επειδή η αρχή της μη διακρισιμότητας των ταυτόσημων σωματιδίων ισχύει δεν μπορούμε να αποδώσουμε μία τετράδα κβαντικών αριθμών σε συγκεκριμένο ηλεκτρόνιο (και γενικότερα φερμιόνιο). Μπορούμε όμως να θεωρήσουμε ότι η τετράδα αυτή αντιστοιχεί σίγουρα σε κάποιο ηλεκτρόνιο του πολυηλεκτρονικού ατόμου, που δεν μπορούμε να το διακρίνουμε από τα υπόλοιπα.

2.4.10 Η αρχή της ελάχιστης ενέργειας

Για να συμπληρωθούν οι υποστοιβάδες με ηλεκτρόνια κατά τη δόμηση των ατόμων ακολουθείται η ακόλουθη αρχή: Όταν μία υποστοιβάδα συμπληρωθεί, το επόμενο ηλεκτρόνιο τοποθετείται σε οποιοδήποτε άλλον κενό, ώστε το άτομο να βρίσκεται στη χαμηλότερη ενέργεια. Οι ηλεκτρονιακές απώσεις δημιουργούν μία θωράκιση, η οποία επιδρά στη διάταξη των ενεργειακών επιπέδων. Αν ξέρουμε την και-

νούρια τους διάταξη τότε μπορούμε να τα ‘εποικίσουμε’ διαδοχικά με ηλεκτρόνια βάσει των περιορισμών της αρχής του Pauli.

Στο άτομο του υδρογόνου, όπου λόγω της ύπαρξης ενός μόνο ηλεκτρονίου επιδρά μόνο το φορτίο του πυρήνα, σ’ αυτό τα ενεργειακά επίπεδα διατάσσονται όπως στο σχήμα και εξαρτώνται μόνο από την τιμή του κύριου κβαντικού αριθμού n (Σχήμα 2.9).



Σχήμα 2.9 - Ενεργειακό φάσμα του ατόμου του υδρογόνου

Γενικά μπορούμε να πούμε ότι από την σκοπιά της Κβαντική θεωρίας τα άτομα δεν έχουν πια μυστικά. Η ΚΘΑ από το 1927 περίπου που δημιουργήθηκε, κατόρθωσε να ερμηνεύσει όλα τα πειραματικά δεδομένα. Η ακρίβεια των πληροφοριών που μας δίνει περιορίζονται μόνο από τις υπολογιστικές μας δυνατότητες.

2.5 Πρέπει να διδαχθεί η Κβαντική Θεώρηση του Ατόμου;

Αρκετοί συγγραφείς, κυρίως στις προηγούμενες δεκαετίες, αλλά και σήμερα ακόμη υποστηρίζουν ότι η Κβαντική Θεώρηση του Ατόμου, δεν θα πρέπει να διδαχθεί στο Λύκειο, διότι:

- Πολλοί μαθητές βρίσκονται ακόμη στο στάδιο των συγκεκριμένων συλλογισμών κατά Piaget και αυτό σημαίνει ότι κατανοούν μόνο τις συγκεκριμένες διαδικασίες μοντελοποίησης (Mac Kinnon 1999), ενώ αδυνατούν να κατανοήσουν τον μαθηματικό φορμαλισμό και τις εμπλεκόμενες έννοιες της Κβαντικής Θεωρίας που

απαιτούν αφαιρετική ικανότητα.

- Οι μαθητές δεν έχουν τις απαραίτητες μαθηματικές γνώσεις και έτσι δεν μπορούν να κατανοήσουν τις μαθηματικές λύσεις της εξίσωσης Schrödinger και την φυσική σημασία των κβαντικών αριθμών. Αλλά όταν η παρουσίαση παραμένει ποιοτική πολλές έννοιες εμφανίζονται αυθαίρετα (Bent 1984, MacKinnon 1999, Mashadi 1994).
- Τα τροχιακά είναι μαθηματικές συναρτήσεις, ανθρώπινες επινοήσεις και βεβαίως δεν είναι υπαρκτές οντότητες, επομένως δεν σχετίζονται άμεσα με την επιστήμη των υλικών, των χρωμάτων και των οσμών που προκαλούν το ενδιαφέρον των μαθητών (Bent 1984, Olivigie 1990, Scerri 2000b, Simons 1991).
- Οι καθηγητές δεν έχουν την απαιτούμενη γνώση, πολλές φορές και λόγω των βασικών τους σπουδών να την διδάξουν, με αποτέλεσμα να επιτείνουν την δημιουργία αυθόρμητων νοητικών παραστάσεων εκ μέρους των διδασκομένων (Mashadi 1994, Morwick 1979).
- Τα διδακτικά εγχειρίδια παρουσιάζουν πολλές ασάφειες στους ορισμούς των βασικών εννοιών και ανακολουθίες στην συλλογιστική πορεία που παρουσιάζουν. Ένα παράδειγμα είναι ότι το μεθάνιο έχει τετραεδρική δομή λόγω του sp^3 υβριδισμού (Mashadi 1994, Olivigie 1990).

Είναι όμως γενικά αποδεκτό ότι η ΚΘΑ είναι αυτή, που σήμερα ερμηνεύει πλήρως τις ιδιότητες των χημικών ουσιών και πολλών φυσικών φαινομένων που αφορούν την συμπεριφορά των υλικών και όποιος μπορεί να το χρησιμοποιεί 'είναι επικεφαλής του παιχνιδιού' (Bent 1984, Tsaparlis 1997b). Εξάλλου, τα τροχιακά και οι ηλεκτρονικές δομές είναι εξαιρετικά χρήσιμα διότι παρέχουν μια θεωρητική βάση για την ενοποίηση όλων των χημικών γεγονότων (Scerri 1998).

Ο Hobson (2001), επίσης υπογραμμίζει το γεγονός ότι κεφάλαια της Σύγχρονης Φυσικής, όπως η Κβαντική Θεωρία, είναι απαραίτητο να διδαχθούν σήμερα με την χρήση ελάχιστων ή καθόλου μαθηματικών, δεδομένου ότι αποτελούν θέματα που κεντρίζουν το ενδιαφέρον όλων των φοιτητών.

Παρόμοια άποψη εκφράζεται και από τον Lawrence (2001), που θεωρεί ότι η εισαγωγή των μαθητών στην Κβαντική Φυσική πρέπει να αρχίσει από νωρίς (μετά την ηλικία των 16 ετών), για να μπορούν να αφομοιώσουν τις έννοιες σε συνδυασμό και με τα άλλα κεφάλαια της Φυσικής. Επιπλέον θα μπορούν να κρίνουν τις σχετικές πληροφορίες που παρέχονται σε εκλαϊκευμένα άρθρα και περικλείουν πολλές φορές

ασάφειες και παραλείψεις.

Όσον αφορά τις ελλείψεις των μαθητών και φοιτητών στα μαθηματικά αντιπαραθέτουμε την άποψη του Styer: 'Μαθαίνω πολλά τόσο μέσω της έρευνας όσο και διδάσκοντας τεχνικής φύσεως μαθήματα σε προχωρημένους σπουδαστές που ακολουθούν την κατεύθυνση της Φυσικής. Όμως μαθαίνω περισσότερα αποστάζοντας την ουσία των ιδεών της Φυσικής στην προσπάθειά μου να προετοιμάσω μια αυστηρά ειλικρινή αλλά μη τεχνική παρουσίαση για κάποιο γενικό ακροατήριο. Προκειμένου να επικοινωνήσω με ένα τέτοιο κοινό, δεν μπορώ να αποκρύψω την άγνοιά μου πίσω από ένα προπέτασμα μαθηματικών τύπων και τεχνικής ορολογίας' (2000).

Επιπλέον οι φοιτητές στο πανεπιστήμιο θα διευκολυνθούν στο να συνεχίσουν να εμβαθύνουν στην ΚΘΑ, εάν φτάσουν χωρίς λανθασμένες ιδέες και απλοϊκές αντιλήψεις για το πώς είναι στην πραγματικότητα το άτομο (Olsen 2002, Pospiech 1999). Οι μαθητές μπορεί να θεωρήσουν ενδιαφέρον ότι η επιστήμη δεν μπορεί να εντοπίσει το ηλεκτρόνιο Αρχίζουν να διαμορφώνουν την άποψη ότι η επιστήμη δεν είναι ένα παιχνίδι όπου όλα περιγράφονται με ακρίβεια. Από την έρευνα των Petri και Niedderer (1998) φαίνεται να διαμορφώνεται αυτή η επιστημολογική – μη ντετερμινιστική – στάση.

Ο Pospiech (2001) προτείνει τρόπους ώστε να συμπεριληφθούν τα αποτελέσματα των νέων ερευνών για την Κβαντική Θεωρία στα τμήματα επιμόρφωσης των διδασκόντων και αυτά να φθάσουν τελικά στους μαθητές ή τους φοιτητές.

Έχει διαπιστωθεί ότι γενικά η παρουσίαση των θεωριών και των μοντέλων που προκύπτουν από αυτές, συνδέεται με την βελτίωση της κατανόησης των εννοιών από τους μαθητές και τους φοιτητές, όμως μεγάλο μέρος των αυθόρμητων νοητικών τους παραστάσεων παραμένει και οφείλεται στην παιδαγωγική τους χρησιμοποίηση ή στην έλλειψη αυτής (MacKinnon 1999). Είναι έργο της έρευνας στον χώρο της Διδακτικής των Φυσικών Επιστημών να εντοπίσει τις δυσκολίες και να προτείνει τις μεθόδους παρουσίασης των αφηρημένων εννοιών στους μαθητές, αλλά πρωτίστως είναι έργο της διασαφήνισης των εννοιών από τους φυσικούς.

2.6 Η συμβολή της τρισδιάστατης οπτικοποίησης του ατόμου στην κατανόηση των βασικών εννοιών για την ΚΘΑ

Ανακεφαλαιώνοντας στην παράγραφο αυτή όσα αναφέρθηκαν στις προηγούμενες σχετικά με την ΚΘΑ παρουσιάζουμε συνοπτικά τις βασικές έννοιες που όπως προέκυψε από τη βιβλιογραφική ανασκόπηση στο πρώτο κεφάλαιο δυσκολεύουν τους μαθητές, τους φοιτητές και τους διδάσκοντες. Αναφερόμαστε στο άτομο του υδρογόνου για το οποίο η εξίσωση Shrödinger έχει ακριβείς λύσεις, τις κυματοσυναρτήσεις ψ που το περιγράφουν.

1. Οι κβαντικοί αριθμοί

- Ο *πρώτος ή κύριος κβαντικός αριθμός* (n) καθορίζει την ενέργεια του ατόμου, που είναι κβαντισμένη. Για $n = 1$ το άτομο βρίσκεται στη θεμελιώδη κατάσταση. Γενικότερα παίρνει τις τιμές: $n = 1, 2, 3, \dots$
- Ο *δεύτερος κβαντικός αριθμός ή κβαντικός αριθμός της στροφορμής ή αξιμουθιακός κβαντικός αριθμός* ℓ συνεισφέρει στον υπολογισμό του μέτρου του διανύσματος της στροφορμής L του ηλεκτρονίου και στον καθορισμό του σχήματος του ηλεκτρονιακού νέφους. Για το ℓ ισχύει: $\ell = 0, 1, \dots, n - 1$
- Ο *τρίτος κβαντικός αριθμός του προσανατολισμού στροφορμής ή μαγνητικός κβαντικός αριθμός* m ή m_ℓ παίρνει τις τιμές: $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, 0, \dots, \ell - 1, \ell$
Καθορίζει το μέτρο της συνιστώσας της στροφορμής L_z .
- Ο *τέταρτος κβαντικός αριθμός του μέτρου του σπιν* s παίρνει την τιμή $1/2$, ενώ ο *κβαντικός αριθμός του προσανατολισμού του σπιν* m_s παίρνει τις τιμές $\pm 1/2$.

Για την ΚΘΑ χρησιμοποιούνται πέντε κβαντικοί αριθμοί (n, ℓ, m_ℓ, s, m_s), ενώ στο μοντέλο του Bohr εμφανίζεται μόνο ο πρώτος με την ίδια φυσική σημασία και ο δεύτερος εμπεριέχεται, αλλά με λανθασμένο τρόπο, όπως έχει ήδη διευκρινισθεί. Η δυσκολία κατανόησης της φυσικής σημασίας των ℓ, m_ℓ, s, m_s προέρχεται κυρίως από το γεγονός ότι αυτή συνδέεται με την κβαντική μέτρηση. Οι τέσσερις αυτοί κβαντικοί αριθμοί συνδέονται με τα μεγέθη της στροφορμής και του σπιν για τα οποία μία μέτρηση δίνει μόνο πληροφορίες αφού έχουν μετρηθεί. Όπως δε έχει σχολιασθεί στην παράγραφο 2.4.7, τα ερωτήματα που αφορούν στα μεγέθη αυτά πρέπει να επαναδιατυπωθούν αναφερόμενα στις τιμές των μεγεθών και των αντίστοιχων κβαντικών αριθμών μετά τη μέτρηση.

Μια τέτοια προσέγγιση που απαιτείται από την ΚΘΑ είναι εντελώς διαφορετική από αυτή με την οποία έχουν εξοικειωθεί οι διδασκόμενοι και για το λόγο αυτό δυσκολεύονται να την αφομοιώσουν. Έτσι δεν μπορούν να κατανοήσουν την φυσική σημασία των κβαντικών αριθμών, ακόμη και στην περίπτωση που έχουν διδαχθεί τον μαθηματικό φορμαλισμό της Κβαντικής Θεωρίας (Johnston et al. 1998, Petri and Niedderer 1998, 2001)

2. Έννοιες που συνδέονται με την κυματοσυνάρτηση ψ

➤ Το ατομικό τροχιακό ψ

Ατομικό τροχιακό ονομάζεται η κυματοσυνάρτηση ψ ενός ηλεκτρονίου συγκεκριμένου ατόμου, προκύπτει ως λύση της εξίσωσης Schrödinger και περιγράφει την κατάσταση του ηλεκτρονίου. Δεν έχει φυσική σημασία.

➤ Η πυκνότητα πιθανότητας $|\psi|^2$

Η $|\psi|^2$ ονομάζεται *πυκνότητα πιθανότητας* ή *ηλεκτρονιακή πυκνότητα πιθανότητας* και εκφράζει την πιθανότητα να βρεθεί το κβαντικό αντικείμενο σε στοιχειώδη όγκο dV ή σημείο σε απόσταση r από τον πυρήνα.

➤ Η συνάρτηση κατανομής πιθανότητας $4\pi r^2 |\psi|^2$

Η πιθανότητα εντοπισμού του ηλεκτρονίου σε απόσταση r από τον πυρήνα προκύπτει από την συνάρτηση ακτινικής κατανομής πιθανότητας $4\pi r^2 R_{nl}^2$ για την θεμελιώδη κατάσταση ή γενικότερα την συνάρτηση κατανομής πιθανότητας $4\pi r^2 |\psi|^2$ για τις διεγερμένες καταστάσεις του ατόμου του υδρογόνου.

➤ Το ‘ηλεκτρονιακό νέφος’ ή ‘ηλεκτρονιακό νέφος πιθανότητας’ ή ‘νέφος πιθανότητας των ηλεκτρονίων’

Το ‘ηλεκτρονιακό νέφος’ αποτελείται από τις πιθανές θέσεις εντοπισμού του ηλεκτρονίου σε ένα άτομο και η τρισδιάστατη οπτικοποίησή του προκύπτει από τις τιμές της συνάρτησης $4\pi r^2 |\psi|^2$.

➤ Η επιφάνεια ίσης ή σταθερής πιθανότητας (isodensity surface plot)

Η τρισδιάστατη *επιφάνεια ίσης ή σταθερής πιθανότητας* είναι η επιφάνεια που προκύπτει ως γραφική παράσταση της συνάρτησης $4\pi r^2 |\psi|^2$, με τον περιορισμό αυτή να έχει την ίδια σταθερή τιμή σε όλα τα σημεία της επιφάνειας. Θα μπορούσε να θεωρηθεί ως η οπτικοποίηση του ατόμου στη συγκεκριμένη ενεργειακή κατάσταση που περιγράφεται από την ψ , με την παραδοχή ότι περικλείει ένα χώρο μέσα στον οποίο μπορεί να βρεθεί κατά 90% το ηλεκτρόνιο του ατόμου του υδρογόνου.

Οι διδασκόμενοι διαθέτουν αυθόρμητες νοητικές παραστάσεις για τις πιο πάνω έννοιες και πολλές φορές συγχέουν μεταξύ τους κάποιες από αυτές, όπως έχει ήδη καταγραφεί. Εφόσον δεν αφομοιώνουν την έννοια του τροχιακού, είναι αναμενόμενο να εκφράζουν αυθόρμητες νοητικές παραστάσεις για τις υπόλοιπες οι οποίες συνδέονται με αυτήν.

3. Το ηλεκτρόνιο ως κβαντικό αντικείμενο

Είναι γνωστό ότι το ηλεκτρόνιο εκδηλώνει την κυματική ή την σωματιδιακή του φύση κάτω από διαφορετικές πειραματικές συνθήκες σύμφωνα με την αρχή της συμπληρωματικότητας που διατύπωσε ο Bohr. Επομένως για να τονίσουμε αυτήν την ιδιαιτερότητα στις ιδιότητες, που το χαρακτηρίζουν θα το ονομάζουμε *κβαντικό αντικείμενο*.

4. Η αρχή της αβεβαιότητας και η κβαντική μέτρηση

Η αρχή της αβεβαιότητας συνδέεται με την έννοια του ‘ηλεκτρονιακού νέφους πιθανότητας’ δεδομένου ότι εκφράζει την εγγενή αδυναμία ακριβούς προσδιορισμού της θέσης και της ορμής του ηλεκτρονίου και κάθε κβαντικού αντικειμένου. Σύμφωνα με αυτήν μπορούμε μόνο να προσδιορίσουμε την διακύμανση των μεγεθών αυτών μεταξύ κάποιου εύρους τιμών. Η διαπίστωση αυτή βρίσκεται σε πλήρη συμφωνία με το γεγονός ότι μπορούμε μόνο να προσδιορίσουμε την πιθανότητα εντοπισμού του ηλεκτρονίου σε κάποιο χώρο.

Επομένως η οπτικοποίηση του ηλεκτρονιακού νέφους αναπαριστά ακριβώς αυτή την αδυναμία πλήρους προσδιορισμού της θέσης και της ορμής του ηλεκτρονίου και κατά συνέπεια την αδυναμία χάραξης της τροχιάς του. Εκφράζει επίσης με σαφήνεια την εικόνα ενός μη ντετερμινιστικού κόσμου, του μικρόκοσμου, όπου μπορούμε μόνο να υπολογίσουμε την πιθανότητα να συμβεί ένα γεγονός.

Η οπτικοποίηση του ‘ηλεκτρονιακού νέφους’ συνδέεται επίσης με την κβαντική μέτρηση. Με τη μέτρηση καθορίζεται η κατάσταση του κβαντικού συστήματος μετά από αυτή, επομένως μόνο μετά από αυτήν είναι δυνατόν να γνωρίζουμε με βεβαιότητα τη θέση του ηλεκτρονίου. Θα μπορούσαμε λοιπόν να περιγράψουμε το ‘ηλεκτρονιακό νέφος πιθανότητας’ ως την απεικόνιση των αποτελεσμάτων πολλών ανεξάρτητων μετρήσεων της θέσης του ηλεκτρονίου.

Το ερώτημα που προκύπτει στην συνέχεια είναι με ποιο τρόπο θα μπορούσε να γίνει η εισαγωγή στη διδασκαλία της ΚΘΑ λαμβάνοντας υπόψη τις αυθόρμητες νοητικές παραστάσεις των μαθητών και των φοιτητών, όπως προκύπτουν από τη βιβλιογραφική ανασκόπηση. Προς την κατεύθυνση αυτή πρέπει να αναρωτηθούμε εάν η παρουσίαση του μοντέλου του Bohr πριν από αυτήν της ΚΘΑ συνεισφέρει θετικά στην κατανόησή της ή δυσκολεύει τους διδασκόμενους. Τελικά ποια είναι η συμβολή της τρισδιάστατης οπτικοποίησης του ατόμου στην κατανόηση των βασικών εννοιών για την ΚΘΑ και πώς αυτή μπορεί να υλοποιηθεί;

Όσον αφορά την διδασκαλία του ατομικού μοντέλου του Bohr πριν από την ΚΘΑ οι περισσότεροι από τους ερευνητές εκφράζουν την άποψη πως το μοντέλο του Bohr, αν διδαχθεί πρώτο, αποτελεί εμπόδιο επειδή είναι μηχανιστικό με ρίζες στην κλασική σκέψη. Η μετάβαση από τη Νευτωνική Μηχανική στην Κβαντομηχανική απαιτεί μία σημαντική επανεξέταση κρίσιμων εννοιών (Olsen 2002, Pospiech 1999). Ίσως δεν είναι ανάγκη να εισάγονται στο σχολείο όλες οι αντιφάσεις και οι δυσκολίες, με τις οποίες ακόμη και οι πιο διακεκριμένοι φυσικοί της ημικλασικής εποχής έπρεπε να παλέψουν. Κάθε επιχείρημα που ενισχύει τη χρησιμότητα της τροχιάς του ατόμου καθυστερεί τη διαδικασία της νοητικής αλλαγής για την αποδοχή του κβαντικού ατομικού μοντέλου. Οι έρευνες για τη σταθερότητα των αντιλήψεων των μαθητών το αποδεικνύουν (Fletcher and Johnston 1999, Johnston et al. 1998, Petri and Niedderer 1998, 2001, Tsaparlis and Papaphotis 2002).

Η διδασκαλία δε θα πρέπει επίσης να βασίζεται στον δυϊσμό σωματίο – κύμα, γιατί έχει αποδειχθεί ότι δυσκολεύει τους μαθητές, δεν εισάγει καμία καινούρια έννοια και εμποδίζει την οικοδόμηση νέων εννοιών (Feynman 1985, Fischler and Lichtfeldt 1992, Jones 1991, Kidd et al. 1989, Olsen 2002, Strnad 1981).

Αυτό που προτείνεται είναι να θέσουμε από ωρίς τα θεμέλια για την κατανόηση των εννοιών που θα διδαχθούν αργότερα, αποφεύγοντας να ενθαρρύνουμε την εξοικείωση με αυτές που θα δυσκολέψουν τους μαθητές, όταν θα παρουσιάσουμε την καινούρια θεωρία (Fischler 1999, Olsen 2001, Tsaparlis and Papafotis 2002, Unal and Zollman 2000). Για να αντιμετωπισθούν οι δυσκολίες που αφορούν στη φύση των ηλεκτρονίων ή των φωτονίων είναι προτιμότερο να τα περιγράψουμε ως ‘κβαντικά αντικείμενα’ με ιδιότητες που απορρέουν από τις αρχές της κβαντομηχανικής χωρίς να αναφερθούμε στη σωματιδιακή ή την κυματική τους φύση: ‘Το φωτόνιο ή το ηλεκτρόνιο δεν είναι σχιζοφρενικό διαρκώς ανάκατο να αποφασίσει αν είναι κύμα ή

σωματίδιο. Έχει μια δική του κβαντική φύση' (Lawrence 2001).

Αντίθετη άποψη εκφράζεται από τον Καλκάνη και τους συνεργάτες του (Kalkanis et al. 2003, Dimopoulos and Kalkanis 2005) που επέλεξαν να αντιπαραθέσουν τα ατομικά μοντέλα που έχουν οικοδομηθεί από την Κλασική Μηχανική αφ' ενός και την κβαντομηχανική αφ' εταίρου, ώστε να προκαλέσουν νοητική σύγκρουση στους εκπαιδευόμενους. Ως εκ τούτου φαίνεται ότι η απάντηση δεν είναι μονοσήμαντη και πρέπει να διερευνηθεί περισσότερο.

Πρέπει λοιπόν να βρεθούν νέοι τρόποι για να ξεπεραστούν οι θεμελιώδεις μαθησιακές δυσκολίες (Pospiech 2001). Πολλές από αυτές προέρχονται από τη χρήση του μαθηματικού πλαισίου της Κβαντικής Θεωρίας που διασφαλίζει την ακρίβεια και την σαφήνεια της περιγραφής της μεταξύ των επιστημόνων, όμως για τους μαθητές και τους φοιτητές μας είμαστε υποχρεωμένοι να χρησιμοποιήσουμε μια διαφορετική γλώσσα. Ο Niels Bohr σωστά υπογράμμισε ότι 'η αλήθεια και η σαφήνεια είναι συμπληρωματικές έννοιες'. Είμαστε υποχρεωμένοι να δώσουμε με κατανοητό τρόπο ποιες είναι οι συνέπειες της κβάντωσης (quantisation), ποια είναι η σημασία της αρχής της αβεβαιότητας και να αναπτύξουμε μοντέλα που θα χρησιμοποιούν αυτά τα χαρακτηριστικά και θα είναι κατανοητά από τους διδασκόμενους (Olsen 2001). Επιπλέον, εάν δοθεί έμφαση στη μαθηματική επεξεργασία μπορεί να χαθεί η φυσική σημασία των υπολογισμών και των δεδομένων (Tsaparlis and Papaphotis 2002).

Επομένως κατά τη διδασκαλία της ΚΘΑ συχνά αναδεικνύεται το πρόβλημα της ποιοτικής ερμηνείας των εννοιών (Johnston et al. 1998, Olsen 2001, Petri and Niedderer 1998), δεδομένου ότι όταν γίνονται τέτοιες προσπάθειες χρησιμοποιείται συχνά μια γλώσσα με ρίζες στην Κλασική Θεωρία (Olsen 2001).

Οφείλουμε ακόμη να πάρουμε υπόψη κάποια ιδιαίτερα γνωρίσματα της Κβαντικής Θεωρίας, όπως ότι οι οντότητες ενώ υπάρχουν και μετρούνται σε συγκεκριμένες ποσότητες, είναι έξω από τη διαίσθησή μας (τροχιακή στροφορμή, σπιν) όπως και οι αρχές που διέπουν τον κβαντικό κόσμο (αρχή της αβεβαιότητας, κβαντική μέτρηση). Είναι συνεπώς απαραίτητο να αναζητήσουμε νέες μεθόδους διδακτικής παρέμβασης, που υπαγορεύονται από τις ιδιαιτερότητες του ίδιου του διδακτικού αντικειμένου.

Εάν επιλέξουμε την ποιοτική προσέγγιση της ΚΘΑ αυτή θα πρέπει να βασισθεί στην αξιοποίηση της οπτικοποίησης ως την πλέον κατάλληλη μέθοδο για να ενισχυθεί η κατανόηση εκ μέρους των διδασκόμενων των πιο σημαντικών εννοιών. Οι οπτικοποιήσεις όμως αυτές εάν παρουσιάζονται αποσπασματικά και χωρίς να συνδέον-

ται με την εικόνα του ατόμου συνολικά συνεισφέρουν στην δημιουργία νοητικών παραστάσεων ασύμβατων προς τις επιστημονικά αποδεκτές. Η σημαντικότερη από αυτές είναι ότι παραμένει ως νοητική εικόνα του ατόμου στους μαθητές και στους φοιτητές αυτή του πλανητικού προτύπου, όπου το ηλεκτρόνιο απεικονίζεται να έχει ιδιότητες κλασικού σωματιδίου, δηλαδή εντελώς διαφορετικές από αυτές ενός κβαντικού αντικειμένου. Αναλυτική παρουσίαση διδακτικών παρεμβάσεων που βασίζονται σε τέτοιες οπτικοποιήσεις και απευθύνθηκαν σε μαθητές και φοιτητές παρουσιάζονται αναλυτικά στο τρίτο κεφάλαιο, καθότι αυτές έχουν δημιουργηθεί με την χρήση των ΤΠΕ.

Επιπλέον, η τρισδιάστατη οπτικοποίηση του ατόμου σύμφωνα με την Κβαντική Θεωρία συνεισφέρει στην κατανόηση της μορφής στο χώρο των διαφορετικών γραφημάτων, καθώς πολλοί από αυτούς δεν μπορούν να τις παραστήσουν και να τις περιστρέψουν νοητικά. Επειδή οι περισσότεροι έχουν έρθει σε επαφή κυρίως με δισδιάστατες απεικονίσεις μαθηματικών μοντέλων, δεν έχουν αναπτύξει την αντίληψη του βάθους και της προοπτικής στο χώρο (Hurwitz et al. 1999, Cataloglou and Robinett 2002).

Επομένως, για να οδηγηθούμε σε μια διδακτική παρέμβαση που θα συνεισφέρει θετικά στην ποιοτική προσέγγιση της ΚΘΑ, θα πρέπει προηγουμένως να αποφασίσουμε πώς θα απεικονίσουμε το άτομο σύμφωνα με αυτή, αφού λάβουμε υπόψη μας ότι όλες οι παρατηρήσιμες ιδιότητες του ηλεκτρονίου σχετίζονται με την πυκνότητα πιθανότητας $|\psi|^2$ και κυρίως με τη συνάρτηση κατανομής της πιθανότητας $4\pi^2 |\psi|^2$.

Μπορούμε να υποθέσουμε ότι οι γραφικές παραστάσεις των τροχιακών (κυματοσυναρτήσεων ψ) δεν συνεισφέρουν σημαντικά σε μια ποιοτική πρώτη προσέγγιση της ΚΘΑ, εφόσον αυτά δεν αναφέρονται σε πραγματικές οντότητες στον φυσικό κόσμο. Αντίθετα, η σύνδεση της οπτικοποίησης συνολικά του ατόμου με την οπτικοποίηση της επιφάνειας ίσης ή σταθερής πιθανότητας και του 'ηλεκτρονιακού νέφους' όπως ορίστηκαν πιο πάνω, θα οδηγήσει τους διδασκόμενους να επεξεργαστούν τα εννοιολογικά εμπόδια που συνδέονται με την ΚΘΑ και να οικοδομήσουν νοητικές παραστάσεις που θα προσεγγίζουν τις επιστημονικές.

2.7 Σύνοψη

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάστηκαν αφ' ενός τα βασικά γνωρίσματα της Κβαντικής Θεωρίας και ειδικότερα της ΚΘΑ και αφ' εταίρου οι απόψεις των ερευνητών της Διδακτικής των Φυσικών Επιστημών για τη διδακτική του προσέγγιση. Προκύπτει δε το συμπέρασμα ότι οι περισσότεροι από αυτούς υποστηρίζουν την άποψη να διδαχτεί η ΚΘΑ με ποιοτικό τρόπο, χωρίς να περιγράφεται ο μικρόκοσμος και τα χαρακτηριστικά του με κλασικές έννοιες. Θεωρούν επίσης ότι η παρουσίαση μηχανικών κλασικών ατομικών προτύπων εμποδίζει τους φοιτητές στην κατανόηση της ΚΘΑ.

Με την αξιοποίηση των ΤΠΕ, η οποία διευκολύνει μεταξύ άλλων την οπτικοποίηση των επιστημονικών εννοιών η μοντελοποίηση της ΚΘΑ μπορεί να βοηθήσει τους διδασκόμενους στην κατανόηση των χαρακτηριστικών του ατομικού μοντέλου και του ρόλου των μοντέλων γενικότερα, καθώς και στην αλλαγή επιστημολογικής στάσης αντιλαμβανόμενοι την διαφορετικότητα της Κβαντικής Θεωρίας. Στην παρούσα διατριβή θα κατασκευαστεί τρισδιάστατη αναπαράσταση του ατόμου του υδρογόνου σε Εικονικό Περιβάλλον σύμφωνα με την Κβαντική Θεωρία, ώστε να μελετηθεί η συνεισφοράς της στα μαθησιακά αποτελέσματα σχετικά με την ΚΘΑ.

Για το κβαντικό ατομικό πρότυπο οι δυσκολίες των διδασκομένων εντοπίζονται κυρίως στη μη αφομοίωση του ρόλου των επιστημονικών μοντέλων και των εννοιών, των αρχών και των συμβόλων που εμπλέκονται στην περιγραφή του, όπως και στην αδυναμία ερμηνείας των οπτικών αναπαραστάσεων που αναφέρονται σ' αυτό.

Οι προτάσεις των ερευνητών για τη διδακτική προσέγγιση της ΚΘΑ στις τελευταίες τάξεις του Λυκείου και τα πρώτα Πανεπιστημιακά έτη, συνοψίζονται σε μια ποιοτική περιγραφή των σημαντικών εννοιών και αρχών της Κβαντικής Θεωρίας με την χρήση τρισδιάστατων δυναμικών οπτικοποιήσεων αξιοποιώντας τις δυνατότητες των ΤΠΕ και κυρίως των εικονικών περιβαλλόντων.

Η αντιμετώπιση του μικρόκοσμου από τις ΦΕ με ενιαία παρουσίαση της ΚΘΑ στα μαθήματα Φυσικής και Χημείας, θεωρήθηκε ότι συμβάλλει στα θετικά μαθησιακά αποτελέσματα και καθιστά εμφανές στους διδασκόμενους, ότι το ατομικό αυτό μοντέλο, ερμηνεύει φυσικά και χημικά φαινόμενα.

- Albanese, A. and Vicentini, M. (1997), Why do we believe that an atom is Colorless? Reflections about the teaching of Particle model, *Science and Education*, 6, 251 – 261
- Andersson, B. (1990), Pupil's conceptions of matter and its transformation (age 12 – 16), *Studies in Science Education*, 18, 53-85
- Ardac, D. (2002), Solving Quantum Number Problems: An examination of Novice Performance in terms of conceptual Base requirements, *Journal of Chemical Education*, 79, 510 – 513
- Barfield, W., Kevin, Baird, M. and Bjorneseth J. (1998), Presence in Virtual Environments as a function of type of input device and display update rate, *Displays*, 19, 91-98
- Barnea, N. and Dori, Y. (1999), High – school chemistry students' performance and gender differences in a computerized molecular modeling learning environment, *Journal of Science Education and Technology*, 8, 257 - 271

- Barnea, N. and Dori, Y. (2000), Computerized molecular modeling- the new technology for enhancing model perception among chemistry educators and learners, *Chemical Education Research and Practice (C.E.R.P.)*, 1, 109 – 120, URL:<http://www.uoi.gr/cerp/>
- Becker, G. E. (ed.)(1987), *Planung von Unterricht, Handlungsorientierte Didaktik Teil I*, Beltz Verlag, Basel
- Bent, H. (1984), Uses and abuses of models in teaching Chemistry, *Journal of Chemical Education*, 61, 774 – 777
- Biggs, J. (1996), Enhancing teaching through constructive alignment, *Higher Education*, 32, 347-364
- Bransford, J. D., Brown, A. L., Cocking, R. R. (2000), *How people Learn: Brain, Mind, Experience and School*, National Academy Press
- Budde, M., Niedderer, H., Scott, P. and Leach, J. (2002a), ‘Electronium’: a quantum atomic teaching model, *Physics Education*, 37, 197 – 203
- Budde, M., Niedderer, H., Scott, P. and Leach, J. (2002b), The quantum atomic model “Electronium”: a successful teaching tool, *Physics Education*, 37, 204 –210
- Campbell, E. R. (2000), *Undergraduate chemistry students’ conceptions of atomic structure, molecular structure and chemical bonding*, Unpublished Dissertation, University of Massachusetts Lowell
- Carmichael, P., Driver, R., Holdings, B., Phillips, I., Twigger, D. and Watts, M. (1990), *Research on students’ conceptions in science: a bibliography*, Leeds: University of Leeds
- Cataloglou, E. and Robinett, R. W. (2002), Testing the development of student conceptual and visualization understanding in quantum mechanics through the undergraduate career, *American Journal of Physics*, 70, 238 – 251
- Cervellati, R. and Perugini, D. (1981), The understanding of the Atomic Concept by Italian High School Students, *Journal of Chemical Education*, 58, 568 – 569
- Chalmers, A. (1998), Retracing the Ancient Steps to Atomic Theory, *Science and Education*, 7, 69-84
- Cokelez, A. and Dumon, A. (2005), Atom and molecule: upper secondary school French students’ representations in long-term memory, *Chemical Education Research and Practice (C.E.R.P.)*, 6, 119-135

- Coll, R. K. and Treagust, D. F. (2003), Learners' Mental Models of Metallic Bonding: A Cross-Age Study', *Science Education*, 87, 685-707
- Collin, H. (1999), Electrons seen in orbit, *Nature*, 401, 21- 22
- Coulson C.A., Μτφρ 1977. Το σχήμα και η δομή των μορίων. Εκδόσεις Γ. ΠΙΝΕΥΜΑΤΙΚΟΥ
- Cros D., Amouroux R., Chastrette M., Mayol M., Leber J. and Maurin M. (1986), Conceptions of first year university students of the constitution of matter and the notions of acids and bases, *European Journal of Science Education*, 8, 305 – 313
- Dimopoulos, V. and Kalkanis, G. (2005), Simulating Quantum States of the Atom of Hydrogen: A simulation program for non-physics major's students, in R. Pintó and D. Curso, (Eds.), Proceedings of the fifth International ESERA Conference on *Contribution of Research to Enhancing Students' in Learning Science*, 548 – 552, Barcelona, Spain
- Dori, J.Y., and Barak, M. (2001), Virtual and physical molecular modeling: Fostering model perception and spatial understanding, *Educational Technology and Society*, 4, 61 – 74
- Duffy, T. M., Lowyck, J. and Jonassen D. H. (Eds.) (1991), *Designing Environments for Constructive Learning*, NATO ASI Series, Berlin: Springer-Verlag
- Euler, M., Hanselmann, M. and Müller, A. (1999), Students' views of models and concepts in modern physics, in D. Zollman (eds.), *Research on teaching and learning Quantum Mechanics*, NARST, <http://www.phys.ksu.edu/perg/papers/narst>
- Ferk, V., Vrtacnik, M., Blejec, A. and Gril, A. (2003), Students' understanding of molecular structure representations, *International Journal of Science Education*, 25, 1227-1245
- Feynman, R. (1985), *QED: The Strange Theory of Light and Matter* (Alix G. Mautner Memorial Lectures), New Jersey: Princeton University Press
- Fischler, H. & Lichtfeldt, M. (1992), Modern physics and students' conception, *International Journal of Science Education*, 14, 181–190.
- Fischler, H. (1999), Introduction to Quantum physics – Development and evaluation of a new course. Paper presented at the National Association for research in science teaching (NARST), A collection of papers on quantum physics at NARST 1999 is entitled Research on teaching and learning Quantum Mechanics, edited by Zollman, D., <http://www.phys.ksu.edu/perg/papers/narst/>

- Fleming, S., Hart, G. and Savage, P. (2000), Molecular orbital animations for organic chemistry, *Journal of Chemical Education*, 77, 790 – 793
- Fletcher, P. and Johnston I. (1999), Quantum mechanics: Exploring conceptual change. Paper presented at the National Association for research in science teaching (NARST), A collection of papers on quantum physics at NARST 1999 is entitled *Research on Teaching and Learning Quantum Mechanics*, edited by Zollman, D., <http://www.phys.ksu.edu/perg/papers/narst/>
- Ford, K. 1980, “Κλασική και σύγχρονη Φυσική”. Τόμος Τρίτος. Μετάφρ. Γ. Θεοδώρου – Α. Θεοδώρου. Εκδόσεις Γ. Πνευματικού, Αθήνα
- Gillespie R. 2001. Electron densities, atomic charges and ionic, covalent and polar bonds. *Journal of chemical education*.78 (12), 1688 – 1691.
- Griffiths K. A. & Preston R. K. (1992), Grade -12 students’ misconceptions relating to fundamental characteristics of atoms and molecules, *Journal of Research in Science Teaching*, 29, 611 – 628
- Halliday – Resnick, 1989, ΦΥΣΙΚΗ. Κεφάλαια σύγχρονης Φυσικής. Μετάφρ. Γ. Αθανασούλη – Β Γιαννέτας. Εκδόσεις Γ. ΠΝΕΥΜΑΤΙΚΟΥ
- Harding, P. A., and Vining, L. C. (1997), The impact of the knowledge explosion on science education, *Journal of Research in Science Teaching*, 34, 969–975
- Hardwicke, A. (1995a), Using molecular models to teach chemistry, Part 1, Modelling molecules, *School Science Review*, 77, 59 – 64.
- Hardwicke, A. (1995b), Using molecular models to teach chemistry, Part 2, Using models, *School Science Review*, 77, 47 – 56.
- Harrison, A. and Treagust, D. (1996), Secondary students’ mental models of atoms and molecules: implications for teaching chemistry, *Science Education*, 80, 509-534
- Harrison, A. and Treagust, D. (2000), Learning about atoms, molecules and chemical Bonds: A case Study of Multiple-Model use in Grade 11 Chemistry, *Science Education*, 84, 352 –381
- Harrison, A. (2000), A typology of school science models’, *International Journal of Science Education*, 22, 1011–1026
- Hobson, A. (2001), Teach the good stuff: ‘Modern’ physics in introductory courses, In proceedings of *International Conference Physics Teacher Education Beyond 2000*, R. Pinto and S. Surinach (Eds), ELSEVIER, 469-472
- Hobson, A. (2002), Teaching Quantum Physics, *Physics education*, 37, 457
- Holler, J. (2002), Hydrogenlike Orbitals,

URL: http://www.uky.edu/~holler/html/orbitals__1.html

- Hyde, R. T., Shaw, P. N. and Jackson, D. E. (1996), The evaluation of integrated courseware: can interactive molecular modeling help students understand three-dimensional chemistry? *Computers Education*, 26, 233 – 239
- Johnston, K. (1988), Learning and teaching about the particulate theory of matter: a report on teaching scheme in action, in proceeding of a bi-national UK-Israel seminar: *Learning difficulties in chemistry*, Jerusalem, 55 – 79
- Johnston, D., Crawford, K. and Fletcher, P. (1998), Students difficulties in learning quantum mechanics, *International Journal of Science Education*, 20, 427 – 446
- Jones, D. G. C. (1991), Teaching modern physics – misconceptions of the photon that can damage understanding, *Physics Education*, 26, 93–98
- Kalkanis, G., Hadzidaki, P. and Stavrou, D. (2003), An Instructional Model for a Radical Conceptual Change Towards Quantum Mechanics Concepts, *International Journal of Science Education*, 87, 257-280
- Keating, T., Barnett, M., Barab, S. A. and Hay, K. E. (2002), The Virtual Solar System Project: Developing Conceptual Understanding of Astronomical Concepts Through Building Three-Dimensional Computational Models, *Journal of Science Education and Technology*, 11, 261-275
- Keig, F. P. and Rubba, A. P. (1993), Translation of representations of the structure of matter and its relationship to reasoning, gender, spatial reasoning, and specific prior knowledge, *Journal of Research in Science Teaching*, 30, 883 – 903
- Kidd, R., Ardini, J. and Anton, A. (1989), Evolution of the modern photon. *American Journal of Physics*, 57, 27–35
- Lawrence, I. (2001), Quantum physics by many paths, in proceedings of *International Conference Physics Teacher Education Beyond 2000*, in R. Pinto and S. Surinach (Eds.), ELSEVIER, 473 – 474
- Lee, O., Eichinger, D. C., Anderson, C. W., Berkheimer, G. D. and Blakeslee, T. D. (1993), Changing middle school students' conceptions of matter and molecules, *Journal of Research in Science Teaching*, 30, 249-270
- MacKinnon, G. (1999), Students' understanding of Orbitals: A Survey, *Research Report (Service No ED 433 248 ERIC Document reproduction)*, Wolfville, Nova Scotia, Canada
- March, R. (1996), *Φυσική για ποιητές*, Εκδόσεις Τραύλος

- Martinand, J. L. (1986), *Connaître et transformer la matière*, Peter Lang, Berne
- Mashadi A. (1994), Advanced level physics students understanding of quantum physics. Paper presented at BERA annual conference.
- Mashadi, A. (1996), Students' conceptions of quantum physics, in G.Welford, J. Osborne and P. Scott (Eds.), *Science Education in Europe: Current issues and themes*, 254–266, London: Falmer Press
- Moore, B. (2000), Orbital plots using Gnuplot, *Journal of Chemical Education*, 77, 785-789
- Morwick, J. (1979) Should orbitals be taught in High school? *Journal of Chemical Education*, 56, 262 – 263
- Müller, R. and Wiesner, H. (1999), Students conceptions of Quantum Physics, paper presented at the National Association for research in science teaching (NARST), in D. Zollman (eds.), *Research on Teaching and Learning Quantum Mechanics*, URL: <http://www.phys.ksu.edu/perg/papers/narst/>
- Murell, J., Kettle, S. and Tedder, J. (1992), *Ο Χημικός Δεσμός*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης
- Niaz, M. (1998), From Cathode Rays to Alpha Particles to Quantum of Action: A Rational Reconstruction of structure of the atom and its implications for Chemistry textbooks, *Science Education*, 82, 527-552
- Nicoll, G. (2001), A report of undergraduates' bonding misconceptions, *International Journal of Science Education*, 23, 707 - 730
- Niedderer H. and Deylitz S. (1998), Introduction to Atomic Physics. A concept based on the Schrödinger equation, *Institute of Physics Education*, University of Bremen, <http://www.physik.unibremen.de/physics.education/niedderer/projects/quanten/#Pu>
- Niedderer, H. and Deylitz, S. (1999), Evaluation of a new approach in Quantum Atomic Physics in High school, National Association for Research in Science Teaching (NARST), in D. Zollman (eds.), *Research on Teaching and Learning Quantum Mechanics*, <http://www.phys.ksu.edu/perg/papers/narst/>
- Olivigie J. F., (1990), The nature of the chemical Bond – 1990, *Journal of Chemical Education*, 67, 280 –289
- Olsen, R. (2001), A study of Norwegian Upper Secondary Physics Specialists' conception of Atomic Models and the Wave Particle Duality, *Paper presented at ESERA 2001*, Thessalonica, http://folk.uio.no/rolvo/Tessaloniki_paper.pdf/

- Olsen, R. (2002), Introducing quantum mechanics in the upper secondary school: A study in Norway, *International Journal of Science Education*, 24, 565 – 574
- Ortoli, S. and Witkowski, N. (1997), Η γάτα του Shrödinger, Στο βιβλίο: «Η μπανιέρα του Αρχιμήδη», μτφ. Α. Κασσέτας, εκδόσεις Σαββάλας
- Osborne, R. And Freyberg, P. (1985), *Learning in Science: the implications of children's science*, Auckland: Heineman
- Petri, J. and Niedderer, H. (1998), A learning pathway in High – school level quantum atomic physics, *International Journal of Science Education*, 20, 1075 – 1088
- Petri, J. and Niedderer, H. (2001), Atomic physics in upper secondary school – Layers of conceptions in individual Cognitive Structure, in D. Psillos, P. Kariotoglou, V. Tselfes, G. Bisdikian, G. Fassoulopoulos, E. Hatzikraniotis, and M. Kallery (Eds.), *Science Education Research in the Knowledge Based Society*, ESERA 2001, Thessaloniki, 579 – 581
- Pfundt, H. and Duit, R. (1999), *Bibliography: Students' alternative frameworks and science education*, Kiel, Germany: IPN
- Pospiech G. 1999. Teaching the EPR paradox at high school? *Physics Education*, 34, 311 – 316
- Pospiech G. 2000a. Uncertainty and complementarity: the heart of quantum physics, *Physics Education*. 35, 393 – 399.
- Pospiech G. 2000b. Quantum information – A fundamental notion shows new ways, *PHYTEB 2000*, 475 – 478.
- Pospiech, G. (2001), Quantum information – A fundamental notion shows new ways, in proceedings of *International Conference Physics Teacher Education Beyond 2000*, R. Pinto and S. Surinach (Eds.) ELSEVIER, 475 – 478
- Rebello, N. S. and Zollman, D. (1999), Conceptual understanding of Quantum mechanics after using Hands - on and visualization instructional materials, National Association for Research in Science Teaching (NARST), *Research on teaching and learning Quantum Mechanics*, in D. Zollman, <http://www.phys.ksu.edu/perg/papers/narst>
- Rezaei, A. R. and Katz, L. (1998), A cognitive model for conceptual change in science instruction, *Journal of Educational Computing Research*, 19, 153–172.
- Richman R., (1998), In defense of Quantum Numbers, *Journal of Chemical Education*, 75(5), 536

- Roblee, K., Garik, P. and Abegg, G. (1999), Using computer visualization software to teach quantum science: The impact on pedagogical content knowledge, National Association for Research in Science Teaching (NARST), *Research on teaching and learning Quantum Mechanics*, in D. Zollman, <http://www.phys.ksu.edu/perg/papers/narst>
- Sanchez Gomez, P. J., & Martin, F. (2003), Quantum vs. “Classical” Chemistry in University Chemistry Education: A Case Study of the Role of History in Thinking the Curriculum, *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*, 4, 131-148, <http://www.uoi.gr/ceerp>
- Scerri E., 1998. How good is the Quantum Mechanical explanation of the periodic System? *Journal of Chemical Education*, 75, 1384 – 1385
- Scerri, E. (2000a), Have orbitals really been observed? *Journal of Chemical Education*, 77, 1492 – 1494
- Scerri, E. (2000b), The failure of reduction and how to resist disunity of the sciences in the context of Chemical Education, *Science and Education*, 9, 405-425
- Scerri, E R. (2001), The New philosophy of Chemistry and its Relevance to Chemical Education’, *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*, 2, 165-170, <http://www.uoi.gr/ceerp>
- Serway, R. A., Moses, C. J. and Moyer, C. A. (2001), Σύγχρονη φυσική, μτφ. Ζουπάνος Γ., Λιαροκάκης Ευθ., Παπαδόπουλος Σ. και Ράπτης Κ., Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης
- Shiland, T. (1997), Quantum Mechanics and conceptual change in high school chemistry textbooks, *Journal of Research in Science Teaching*, 34, 535 – 545
- Shriver, D. F. and Atkins, P. W. (1999), *Inorganic Chemistry*, 3rd ed., Oxford, 15, <http://www.shef.ac.uk/chemistry/orbitron>
- Shusterman, G. and Shusterman, A. (1997), Teaching chemistry with electron density models, *Journal of Chemical Education*, 74, 771 - 776
- Simons, J. (1991), There are no such things as orbitals – Act two, *Journal of Chemical Education*, 68, 131 – 132
- Solomon, J. (1993), Getting to know about energy in school and society, London: Falmer Press

- Staver, J., (1998), Constructivism: Sound Theory for Explicating the Practice of Science and Science Teaching, *Journal of Research in Science Teaching*, 35, 501 - 520
- Stengers, I and Bensaude-Vincent, B. (1999), *Ιστορία της Χημείας*, Εκδόσεις Τραύλος
- Strnad, J. (1981), Pitfalls in the teaching of introductory quantum physics, *European Journal of Physics*, 2, 250–254
- Styer, D. (2000), *Ο παράξενος κόσμος της Κβαντικής Μηχανικής*, Μτφ. Γ. Κατσιλιέρης, Εκδόσεις ΚΑΤΟΠΤΡΟ
- Taber, K. S. (1998), The sharing-out of nuclear attraction: or ‘I can’t think about physics in chemistry’, *International Journal of Science Education*, 20, 1001-1014
- Taber K. S. (2001), Building the structural concepts of chemistry: Some considerations from educational research, *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*, 2, 123 – 158, <http://www.uoi.gr/cerp>
- Taber, K. S. (2002), Conceptualizing quanta: illuminating the ground state of student understanding of atomic orbitals. *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*, 3, 145-158, <http://www.uoi.gr/cerp>
- Taber, K. S. (2003), Mediating Mental models of Metals: Acknowledging The Priority of the Learner’s Prior Learning, *Science Education*, 87, 732-758
- Taber K. S. (2005), Learning quanta: Barriers to stimulating transitions in student understanding of orbital ideas, *Science Education*, 89, 94 – 116
- Toomey, R. & Garafalo, F. (2003), Linking physics with chemistry – opportunities in a constructivist classroom, *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*, 4, 189-204, <http://www.uoi.gr/cerp>
- Treagust, D. F., Chittleborough, G. and Mamiala, T. L. (2002), Students’ Understanding of the Role of Scientific Models in Learning Science, *International Journal of Science Education*, 24, 357-368
- Tsaparlis G. (1997a), Atomic and molecular structure in chemical education. *Journal of Chemical Education*, 74, 922- 925.
- Tsaparlis G. (1997b) Atomic orbitals, molecular orbitals and related Concepts: Conceptual Difficulties among Chemistry Students, *Research in Science Education*, 27, 271 – 287

- Tsaparlis, G. and Papafotis, G. (2002), Quantum chemical concepts: are they suitable for secondary students? *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*, 3, 129 – 144, <http://www.uoi.gr/cepr/>
- Tuvi, I. and Nachmias, R. (2001), Current state of web sites in science education – Focus on atomic structure, *Journal of Science Education and Technology*, 10, 293 – 303
- Unal R., Zollman D. (2000), Students' description of an atom: A phenomenographic analysis, <http://www.phys.ksu.edu/perg/papers/vqm/AtomModels.PDF>
- Young, H. (1994), *Φυσική*, Τόμος Β', Εκδόσεις ΠΑΠΑΖΗΣΗ.
- Zollman D. 1998. Hands – on Quantum Mechanics. In the proceedings of Hands – on Experiments in Physics Education, *GIREP*, at <http://www.phys.ksu.edu/perg/papers/vqm/HandsOnQM.html>
- Αντωνίου Ν., Βαλαδάκης Α., Δημητριάδης Π., Παπαμιχάλης Κ., Παπατσιμπα Α. *Φυσική Β' Γυμνασίου*, Ο.Ε.Δ.Β
- Γεωργακάκος, Π., Σκαλωμένος Α., Σφάρνας, Ν. και Χριστακόπουλος, Ι. *Φυσική Γενικής Παιδείας*, Γ' Λυκείου, Ο.Ε.Δ.Β.
- Γεωργιάδου Τ., Καφετζόπουλος Κ., Προβής Ν., Σπυρέλης Ν., Χηνιάδης Δ. *Χημεία Β' και Χημεία Γ' Γυμνασίου*, Ο.Ε.Δ.Β
- Κοντογεωργίου Α., 2003, Ποιες αντιλήψεις για τα ατομικά μοντέλα έχουν διαμορφώσει οι μαθητές στο τέλος της Γ' Λυκείου, στα πρακτικά του 12^{ου} επιμορφωτικού σεμιναρίου της Ένωσης Ελλήνων Χημικών, *Διδακτική της Χημείας στην Δευτεροβάθμια εκπαίδευση*, Θεσσαλονίκη, 26 – 28
- Κοντογεωργίου, Α. και Μικρόπουλος, Τ. (2003), Η διδασκαλία του ατομικού μοντέλου της ύλης. Από την κλασική στην κβαντομηχανική θεώρηση, *Θέματα στην Εκπαίδευση*, 4, 25-45
- Κοντογεωργίου Α. και Μικρόπουλος Τ., 2004, Κβαντικό άτομο: Συγκλίνει η διδακτική προσέγγισή του από το φυσικό και το χημικό; Στα πρακτικά του 10^{ου} Πανελληνίου Συνεδρίου Φυσικής: *Εξελίξεις, τάσεις, επιτεύγματα και διδακτική της Φυσικής*, τόμος Α', σελ 93-99
- Κοντογεωργίου Α., Κώτσης Κ. και Μικρόπουλος Τ., (2004), Οπτικές και νοητικές αναπαραστάσεις για την κατανόηση της δομής της ύλης, Στο Β. Τσελφές, Π. Καριώτογλου, Μ. Πατσαδάκης (επιμ), *Φυσικές επιστήμες: Διδασκαλία –Μάθηση και Εκπαίδευση*, τόμος Α', σελ 58-65.

- Κώτσης, Κ. (2006), *Διδασκαλία της Φυσικής και Πείραμα*, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα.
- Λιοδάκης Σ., Γάκης Δ., Θεοδωρόπουλος Δ., Θεοδωρόπουλος Π., Κάλλης Α. *Χημεία Α΄ Λυκείου*, Ο.Ε.Δ.Β
- Λιοδάκης Σ., Γάκης Δ., Θεοδωρόπουλος Δ., Θεοδωρόπουλος Π., Κάλλης Α. *Χημεία Β΄ Λυκείου Γενικής Παιδείας*, Ο.Ε.Δ.Β
- Λιοδάκης Σ., Γάκης Δ., Θεοδωρόπουλος Δ., Θεοδωρόπουλος Π., Κάλλης Α. *Χημεία Β΄ Λυκείου Θετικής Κατεύθυνσης*, Ο.Ε.Δ.Β
- Λιοδάκης Σ., Γάκης Δ., Θεοδωρόπουλος Δ., Θεοδωρόπουλος Π., Κάλλης Α. *Χημεία Γ΄ Λυκείου Θετικής Κατεύθυνσης*, Ο.Ε.Δ.Β
- Οικονόμου Ε. Ν. (1992), *Η φυσική σήμερα*. 3η Έκδοση. Τόμος Ι. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.
- Παπαφώτης, Γ. (2001), *Οι κβαντοχημικές έννοιες στην χημεία Γ΄ Λυκείου Θετικής κατεύθυνσης*, Διατριβή Μεταπτυχιακής Ειδίκευσης στην Χημεία, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων
- Παπαφώτης, Γ. (2004), *Κβαντομηχανικές έννοιες στην χημεία Γ΄ Λυκείου Θετικής. Διδακτορική Διατριβή*, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων
- Στεφανή, Χ. και Τσίπης, Κ. (2002), Το κβαντομηχανικό μοντέλο του ατόμου και οι εναλλακτικές αντιλήψεις των μαθητών του λυκείου, Στα πρακτικά του Συνεδρίου: *Η διδασκαλία των Φ. Ε. στην κοινωνία της πληροφορίας*, Αθήνα, 227
- Τραχανάς, Στ. (1981), *Κβαντομηχανική*, Τόμος Ι, ΙΙ, Εκδόσεις Σύγχρονες Επιστήμες
- Τραχανάς, Στ. (2005), *Κβαντομηχανική Ι*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης
- Φίλιας, Β. (1996), *Εισαγωγή στη Μεθοδολογία και τις τεχνικές των κοινωνικών ερευνών*, Gutenberg, Αθήνα
- Χατζηδάκη, Π. και Καρακώστας, Β. (2003), Ρεαλισμός και κατασκευασιοκρατία στην κβαντική θεωρία. Η σημασία της διαμάχης στη διδασκαλία της σύγχρονης φυσικής, στο Κ. Σκορδούλη και Λ. Χαλκιά (επιμ.) *Ή συμβολή της Ιστορίας και Φιλοσοφίας των Φυσικών Επιστημών στη διδασκαλία των Φυσικών Επιστημών*, 200 – 206, Αθήνα

Εισαγωγή	3
Ο μικρόκοσμος: Θεωρητική προσέγγιση και διδακτική πράξη	7
Το άτομο: Ανάλυση του επιστημονικού περιεχομένου	27
Συμπεράσματα	76
Αναφορές	77