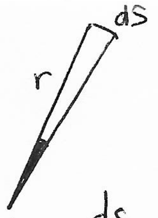
στοιχειώδης επίπεδη γωνία $d\phi$



$$d\phi := \frac{ds}{r} \qquad [d\phi] = 1$$

r: επιβατική ("μετακινούμενη", "περιστρεφόμενη") ακτίνα
ds: στοιχειώδες μήκος τόξου

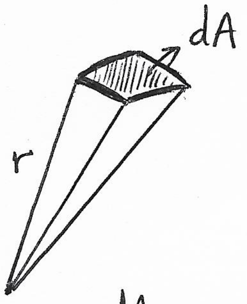
$$\Rightarrow ds = r\,d\phi \Rightarrow$$

$$\int_{\text{κύκλο}} ds = \int_{\text{κύκλο}} r\,d\phi \Rightarrow$$

$$2\pi r = r \int_{\text{κύκλο}} d\phi \Rightarrow$$

$\phi_{ολ}$ = ολική επίπεδη γωνία $= 2\pi$

στοιχειώδης στερεά γωνία $d\Omega$



$$d\Omega := \frac{dA}{r^2} \qquad [d\Omega] = 1$$

r: επιβατική ακτίνα
dA: στοιχειώδης επιφάνεια

$$\Rightarrow dA = r^2 d\Omega \Rightarrow$$

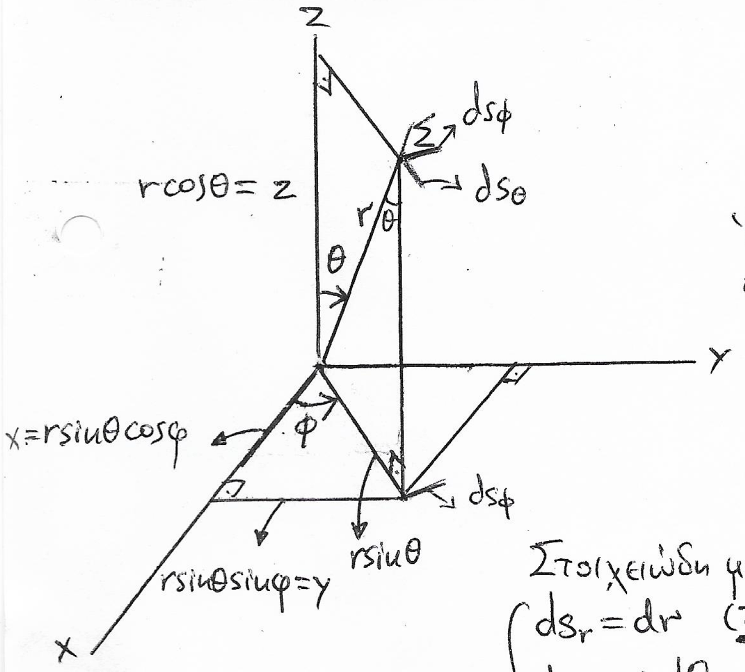
$$\int_{\text{σφαίρα}} dA = \int_{\text{σφαίρα}} r^2 d\Omega \Rightarrow$$

$$4\pi r^2 = r^2 \int_{\text{σφαίρα}} d\Omega \Rightarrow$$

$\Omega_{ολ}$ = ολική στερεά γωνία $= 4\pi$

ΣΦΑΙΡΙΚΕΣ ΣΥΝΤΕΤΑΓΜΕΝΕΣ (r, θ, φ)

r: ακτινική απόσταση (radial distance)
θ: πολική γωνία (polar angle)
φ: αζιμουθιακή γωνία (azimuthal angle) ή αζιμούθιο or azimuth



Η σχέση μεταξύ καρτεσιανών συντεταγμένων & σφαιρικών συντεταγμένων είναι

$$x = r\sin\theta\cos\varphi \quad (1) \qquad r \in [0, \infty) \quad (4)$$
$$y = r\sin\theta\sin\varphi \quad (2) \qquad \theta \in [0, \pi] \quad (5)$$
$$z = r\cos\theta \quad (3) \qquad \varphi \in [0, 2\pi) \quad (6)$$

Στοιχειώδη μήκη σε σφαιρικές συντεταγμένες

$$\left.\begin{aligned} ds_r &= dr \quad (7) \\ ds_\theta &= r\,d\theta \quad (8) \\ ds_\varphi &= r\sin\theta\,d\varphi \quad (9) \end{aligned}\right\} \Rightarrow dV = r^2 \sin\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi \quad (13)$$

στοιχειώδης όγκος

$$\Leftarrow \left.\begin{aligned} dA_{r\theta} &= r\,dr\,d\theta \quad (10) \\ dA_{r\varphi} &= r\sin\theta\,dr\,d\varphi \quad (11) \\ dA_{\theta\varphi} &= r^2\sin\theta\,d\theta\,d\varphi \quad (12) \end{aligned}\right\}$$

στοιχειώδεις επιφάνειες

ΣΗΜΕΙΩΣΗ: $d\Omega_{\theta\varphi} := \frac{dA_{\theta\varphi}}{r^2} \overset{(12)}{=} \sin\theta\,d\theta\,d\varphi \Rightarrow$

$$\int d\Omega_{\theta\varphi} = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \sin\theta\,d\theta\,d\varphi = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta\,d\theta = 2\pi\left[-\cos\theta\right]_0^{\pi} = 2\pi \cdot 2$$

$\Rightarrow$ ολική στερεά γωνία $\Omega_{ol} = 4\pi$

I) Να αποδείξετε ότι η αντικατάσταση ενός ανύσματος θέσεως $\vec{r} \xrightarrow{\vec{r}\,'=} -\vec{r}$ ισοδυναμεί στις σφαιρικές συντεταγμένες με τις αντικαταστάσεις
$r \to r$
$\theta \to \pi - \theta$
$\varphi \to \pi + \varphi$

ΑΣΚΗΣΗ 2

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Χωρίς βλάβη της γενικότητας θεωρούμε σημείο Σ στο 1ο ογδοημόριο (ΣΧΗΜΑ), οπότε $\theta \in [0, \pi/2]$ κ $\varphi \in [0, \pi/2]$

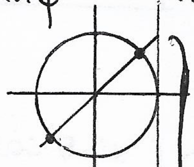
Η αντικατάσταση $\vec{r} \to -\vec{r} \equiv \vec{r}\,' \iff$
$x' = -x \overset{(1)}{\iff} r'\sin\theta'\cos\varphi' = -r\sin\theta\cos\varphi$ (15)
$y' = -y \overset{(2)}{\iff} r'\sin\theta'\sin\varphi' = -r\sin\theta\sin\varphi$ (16)
$z' = -z \overset{(3)}{\iff} r'\cos\theta' = -r\cos\theta$ (17)

(14) $\Downarrow$

$\boxed{r' = r}$ (18)

ή (17)(18) $\cos\theta' = -\cos\theta$, $\theta', \theta \in [0, \pi]$ $\Big\}$ $\boxed{\theta' = \pi - \theta}$

Διαιρώντας κατά μέλη τις (15) κ (16) $\Rightarrow \tan\varphi' = \tan\varphi$



$\varphi' = \varphi + k\pi$, $k \in \mathbb{Z}$ γενική λύση

αλλά $\varphi, \varphi' \in [0, 2\pi)$
$\Rightarrow k = 1$ ή 0

$\Rightarrow \varphi' = \varphi$ ή $\varphi + \pi$

αν όμως $\varphi' = \varphi$ (19')

(15) $\Rightarrow \sin\theta' = -\sin\theta$
ή (16)
(17) $\Rightarrow \cos\theta' = -\cos\theta$ $\Big\} \Rightarrow$

$\tan\theta' = \tan\theta$

$\theta' = \theta + k\pi$
$\theta', \theta \in [0, \pi]$ $\Big\} \Rightarrow k = 0$ δηλ $\theta' = \theta$ (20')

κ (18)
(19')(20') $\Big\} \Rightarrow \vec{r} = -\vec{r} \Rightarrow \vec{r} = \vec{0}$

$\theta' = \pi - \theta$

$\sin\theta'\cos\varphi' = -\sin\theta\cos\varphi$ $\cancel{\sin\theta'}\cos\varphi' = -\cancel{\sin\theta}\cos\varphi$
$\cos\varphi' = -\cos\varphi$
$\cancel{\sin\theta'}\sin\varphi' = -\cancel{\sin\theta}\sin\varphi$
$\sin\varphi' = -\sin\varphi$
$\varphi' = \varphi + \pi$

Άρα $\boxed{\varphi' = \varphi + \pi}$ (19)

π.χ. (15) $\Rightarrow r'\sin\theta'\cos(\varphi + \pi) = -r\sin\theta\cos\varphi$

$\xrightarrow[(18)]{(19)} \sin\theta' = \sin\theta$
$\theta', \theta \in [0, \pi]$ $\Big\} \Rightarrow \boxed{\theta' = \pi - \theta}$ (20)

$\varphi' = \varphi \Rightarrow \sin\theta' = -\sin\theta$
$\theta', \theta \in [0, \pi]$

$\Rightarrow \theta' = \theta = 0$
$\theta' = \pi - \theta$ $\Big\} \Rightarrow \pi = 0$

Άτοπο

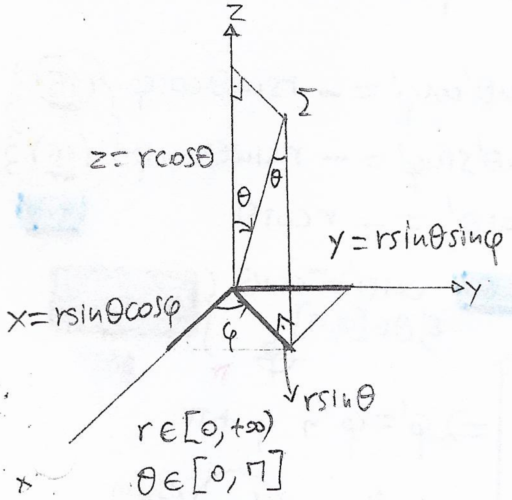
ΑΣΚΗΣΗ 5

$\vec{r} \to \vec{r}' = -\vec{r} \Rightarrow r' = r$

$\theta' = \pi - \theta$

$\varphi' = \pi + \varphi$

ΛΥΣΗ



$r \in [0, +\infty)$
$\theta \in [0, \pi]$
$\varphi \in [0, 2\pi)$

Χωρίς βλάβη της γενικότητας, θεωρούμε σημείο Σ στο 1ο ογδοημόριο, όπότε $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}]$, $\varphi \in [0, \frac{\pi}{2}]$

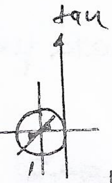
$$\vec{r}' = -\vec{r} \Leftrightarrow \begin{cases} x' = -x \\ y' = -y \\ z' = -z \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} r'\sin\theta'\cos\varphi' = -r\sin\theta\cos\varphi \\ r'\sin\theta'\sin\varphi' = -r\sin\theta\sin\varphi \\ r'\cos\theta' = -r\cos\theta \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Downarrow$$

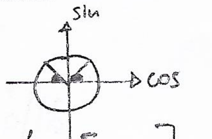
$$\boxed{r' = r}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \sin\theta'\cos\varphi' = -\sin\theta\cos\varphi \\ \sin\theta'\sin\varphi' = -\sin\theta\sin\varphi \\ \boxed{\cos\theta' = -\cos\theta} \end{cases}$$

$\Rightarrow \tan\varphi' = +\tan\varphi$, $\varphi' \in [0, 2\pi)$



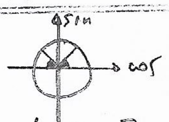
$\Rightarrow \boxed{\varphi' = \varphi \text{ ή } \varphi' = \pi + \varphi}$



$\theta \in [0, \pi]$

$\Rightarrow \boxed{\theta' = \pi - \theta}$

αν $\varphi' = \varphi$, από τις $\underbrace{}_{}$ δύο πρώτες (διαδοχικά από) προκύπτει $\sin\theta' = -\sin\theta$ $\Rightarrow$ ΑΤΟΠΟ

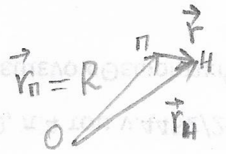


$\theta' \in [0, \pi]$

Άρα $\boxed{\varphi' = \pi + \varphi}$

ΕΠΙΤΡΕΠΟΜΕΝΕΣ και ΑΠΑΓΟΡΕΥΜΕΝΕΣ ΟΠΤΙΚΕΣ ΜΕΤΑΒΑΣΕΙΣ εντός της ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΕΩΣ ΔΙΠΟΛΟΥ

$$\left.\begin{array}{l}\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_a \exp\left[i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}_H - \omega t + \phi\right)\right] \\ \vec{r}_H \simeq \vec{R}\end{array}\right\} \Rightarrow \vec{\mathcal{E}}(t) = \vec{\mathcal{E}}_0\, e^{-i\omega t}$$



↓ ομογενές χρονικώς μεταβαλλόμενο

$$\left.\begin{array}{l}\vec{\mathcal{E}} = -\vec{\nabla} V \\ dV = \vec{\nabla} V\cdot d\vec{r}\end{array}\right\} dV = -\vec{\mathcal{E}}\cdot d\vec{r} \Rightarrow \overset{\text{δυναμικό}}{V} = -\underset{\text{ομογενές}}{\vec{\mathcal{E}}}\cdot\vec{r} \Rightarrow$$

$$U = e\,\vec{\mathcal{E}}\cdot\vec{r} = -\vec{p}\cdot\vec{\mathcal{E}}$$

δυναμική ενέργεια της διαταραχής

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = \int d^3r\, \Phi^*_{k'}(\vec{r})\, U_{\mathcal{E}}(\vec{r},t)\, \Phi_k(\vec{r})$$

$$= -\vec{\mathcal{E}}\cdot\int d^3r\, \Phi^*_{k'}(\vec{r})\, \vec{p}\, \Phi_k(\vec{r}) = -\vec{\mathcal{E}}\cdot\vec{p}_{k'k}$$

$$= e\,\vec{\mathcal{E}}\cdot\underline{\int d^3r\, \Phi^*_{k'}(\vec{r})\, \vec{r}\, \Phi_k(\vec{r})} = e\,\vec{\mathcal{E}}\cdot\underline{\vec{r}_{k'k}}$$

$$\vec{p} = -e\vec{r} \Rightarrow \vec{p}_{k'k} = -e\,\vec{r}_{k'k}$$

Εν τέλει όλα ανάγονται στη συμμετρία των ιδιοσυναρτήσεων του αδιατάρακτου προβλήματος.

$\vec{r}$ περιττή συνάρτηση

__Ποιές__ $\Phi_k(\vec{r})$ άρτιες ή περιττές;

⟶ καθορίζει το αν θα μηδενίζεται το $\vec{r}_{k'k}$ και άρα το $U_{\mathcal{E}k'k}(t)$

Αν $U_{\mathcal{E}k'k}(t) = 0 \Rightarrow$ η διαταραχή δεν συζευγνύει τις καταστάσεις k' και k

οπότε αν το ηλεκτρόνιο ήταν στην k δεν θα μεταβεί στην k' και αντιστρόφως.

Τότε λέμε ότι "απαγορεύεται" η μετάβαση $k \leftrightarrow k'$

ΚΑΤΑ ΜΕΣΟ ΟΡΟ ΟΙ ΙΔΙΟΕΝΕΡΓΕΙΕΣ του αδιατάρακτου συστήματος ΔΕΝ ΕΠΗΡΕΑΖΟΝΤΑΙ ΑΠΟ ΤΗ ΔΙΑΤΑΡΑΧΗ

$$\left.\begin{array}{l} \hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\,\Psi(\vec{r}) \\ \hat{H} = \hat{H}_0 + U_\varepsilon(\vec{r},t) \\ \text{έστω} \quad \Psi(\vec{r}) = \sum_k g_k \Phi_k(\vec{r}) \end{array}\right\} \Rightarrow \left.\begin{array}{l} \left[\hat{H}_0 + U_\varepsilon(\vec{r},t)\right]\left[\sum_k g_k \Phi_k(\vec{r})\right] = E\sum_k g_k \Phi_k(\vec{r}) \\ \text{επί } \int d^3r\, \Phi^*_{k'}(\vec{r}) \ldots \end{array}\right\}$$

$$\int d^3r\, \Phi^*_{k'}(\vec{r})\, \hat{H}_0 \sum_k g_k \Phi_k(\vec{r}) + \int d^3r\, \Phi^*_{k'}(\vec{r})\, U_\varepsilon(\vec{r},t) \sum_k g_k \Phi_k(\vec{r}) = \int d^3r\, \Phi^*_{k'}(\vec{r})\, E \sum_k g_k \Phi_k(\vec{r}) \Rightarrow$$

$$\sum_k g_k \int d^3r\, \Phi^*_{k'}(\vec{r})\, \hat{H}_0\, \Phi_k(\vec{r}) + \sum_k g_k \int d^3r\, \Phi^*_{k'}(\vec{r})\, U_\varepsilon(\vec{r},t)\, \Phi_k(\vec{r}) = E\sum_k g_k \int d^3r\, \Phi^*_{k'}(\vec{r})\, \Phi_k(\vec{r}) \Rightarrow$$

$$\sum_k g_k E_k \delta_{k'k} + \sum_k g_k U_{\varepsilon k'k}(t) = E\sum_k g_k \delta_{k'k} \Rightarrow$$

$$g_{k'} E_{k'} + \sum_k g_k U_{\varepsilon k'k}(t) = E\, g_{k'}$$

Εάν έχουμε προσέγγιση διπόλου $U = -\vec{p}\cdot\vec{\mathcal{E}} = +e\vec{r}\cdot\vec{\mathcal{E}}_0\, e^{-i\omega t} = U_\varepsilon(\vec{r},t)$

$$U_{\varepsilon k'k}(t) = e\, e^{-i\omega t}\, \vec{\mathcal{E}}_0 \cdot \vec{r}_{k'k}$$

Αν λάβουμε τη μέση χρονική τιμή του $\langle U_{\varepsilon k'k}(t)\rangle = 0$

διότι $\langle e^{-i\omega t}\rangle = 0$

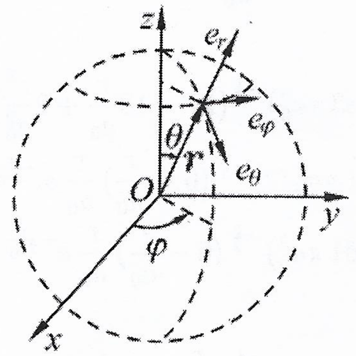
$$\langle g_{k'} E_{k'}\rangle + \sum_k g_k \cancel{\langle U_{\varepsilon k'k}(t)\rangle} = \langle E g_{k'}\rangle$$

$$g_{k'}\langle E_{k'}\rangle = g_{k'}\langle E\rangle$$

$$\Rightarrow \langle E\rangle = E_{k'} \quad \text{δηλαδή} \Longrightarrow$$

3.10 Άτομο Υδρογόνου: Μορφή ατομικών τροχιακών.

Στο Σχήμα 3.8 φαίνονται οι σφαιρικές συντεταγμένες (r, θ, φ) όπως συνήθως χρησιμοποιούνται στη φυσική: η απόσταση r από την αρχή των αξόνων O, η πολική γωνία θ, η αζιμουθιακή γωνία φ. Σημειώνονται και τα μοναδιαία ανύσματα $\hat{e}_r, \hat{e}_\theta, \hat{e}_\varphi$.



Σχήμα 3.8: Οι σφαιρικές συντεταγμένες (r, θ, φ): η απόσταση από το κέντρο r, η πολική γωνία θ, η αζιμουθιακή γωνία φ. Σημειώνονται και τα μοναδιαία ανύσματα $\hat{e}_r, \hat{e}_\theta, \hat{e}_\varphi$.

Οι ιδιοσυναρτήσεις του ατόμου του Υδρογόνου σε σφαιρικές συντεταγμένες έχουν τη μορφή

$$\Psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r)\Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\varphi)$$

οι οποίες είναι δηλαδή τα $\Phi_k(\vec{r})$ του γενικού συμβολισμού, όπου $k = \{n, \ell, m\}$ είναι ο συλλογικός κβαντικός αριθμός. Αναλυτικότερα

- $n = 1, 2, 3, \ldots$ είναι ο **κύριος κβαντικός αριθμός**
- $\ell = 0, 1, 2, \ldots, n-1$ είναι ο **τροχιακός κβαντικός αριθμός**, και
- $m = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell-1, \ell$ είναι ο **μαγνητικός κβαντικός αριθμός**

Συγκεκριμένα παρατίθενται παρακάτω τα ατομικά τροχιακά $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ [30].

$$\Psi_{100}(r,\theta,\varphi) = \left(\pi a_0^3\right)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \qquad \Psi_{100} := 1s$$

$$\Psi_{200}(r,\theta,\varphi) = \left(32\,\pi a_0^3\right)^{-\frac{1}{2}} (2 - \frac{r}{a_0}) e^{-\frac{r}{2a_0}} \qquad \Psi_{200} := 2s$$

$$\Psi_{210}(r,\theta,\varphi) = \left(32\,\pi a_0^3\right)^{-\frac{1}{2}} \frac{r}{a_0} \cos\theta\, e^{-\frac{r}{2a_0}} \qquad \Psi_{210} := 2p_z$$

$$\Psi_{21\pm1}(r,\theta,\varphi) = \left(64\,\pi a_0^3\right)^{-\frac{1}{2}} \frac{r}{a_0} \sin\theta\, e^{\pm i\varphi} e^{-\frac{r}{2a_0}} \qquad (\Psi_{21+1} + \Psi_{21-1})/\sqrt{2} := 2p_x$$

$$(\Psi_{21+1} - \Psi_{21-1})/(i\sqrt{2}) := 2p_y$$

$$\Psi_{300}(r,\theta,\varphi) = \left(19683\,\pi a_0^3\right)^{-\frac{1}{2}} (27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2}) e^{-\frac{r}{3a_0}} \qquad \Psi_{300} := 3s$$

$$\Psi_{310}(r,\theta,\varphi) = \left(6561\,\pi a_0^3/2\right)^{-\frac{1}{2}} (6 - \frac{r}{a_0}) \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{3a_0}} \cos\theta \qquad \Psi_{310} := 3p_z$$

$$\Psi_{31\pm1}(r,\theta,\varphi) = \left(6561\,\pi a_0^3\right)^{-\frac{1}{2}} (6 - \frac{r}{a_0}) \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin\theta\, e^{\pm i\varphi} \qquad (\Psi_{31+1} + \Psi_{31-1})/\sqrt{2} := 3p_x$$

$$(\Psi_{31+1} - \Psi_{31-1})/(i\sqrt{2}) := 3p_y$$

$$\Psi_{320}(r,\theta,\varphi) = \left(39366\,\pi a_0^3\right)^{-\frac{1}{2}} (\frac{r}{a_0})^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} (3\cos^2\theta - 1) \qquad \Psi_{320} := 3d_{z^2}$$

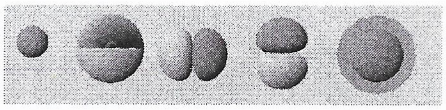
$$\Psi_{32\pm1}(r,\theta,\varphi) = \left(6561\,\pi a_0^3\right)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin\theta\, \cos\theta\, e^{\pm i\varphi} \qquad (\Psi_{32+1} + \Psi_{32-1})/\sqrt{2} := 3d_{xz}$$

$$(\Psi_{32+1} - \Psi_{32-1})/(i\sqrt{2}) := 3d_{yz}$$

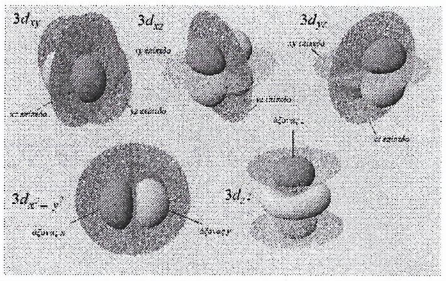
$$\Psi_{32\pm2}(r,\theta,\varphi) = \left(26244\,\pi a_0^3\right)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin^2\theta\, e^{\pm 2i\varphi} \qquad (\Psi_{32+2} + \Psi_{32-2})/\sqrt{2} := 3d_{x^2-y^2}$$

$$(\Psi_{32+2} - \Psi_{32-2})/(i\sqrt{2}) := 3d_{xy}$$

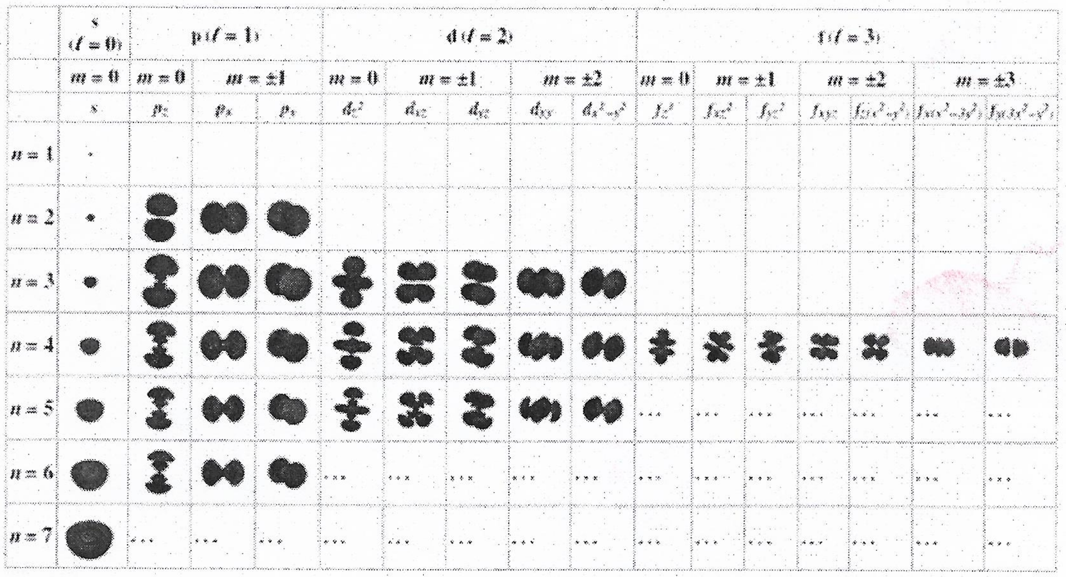
Εννοείται ότι οι ιδιοσυναρτήσεις μπορούν να πολλαπλασιαστούν με ένα παράγοντα e^{ia}, όπου a μια αυθαίρετη φάση, παραμένοντας ιδιοσυναρτήσεις. Οι αντίστοιχες ιδιοενέργειες είναι $E_k = \hbar\Omega_k = -\frac{R_E}{n^2} = E_n$, δηλαδή υπάρχει εκφυλισμός ως προς ℓ, m. $R_E = 13.6$ eV είναι η ενέργεια Rydberg και a_0 είναι η ακτίνα Bohr. Τα πέντε πρώτα ατομικά τροχιακά $1s, 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ απεικονίζονται στο Σχήμα 3.9, τα πέντε ατομικά τροχιακά $3d$ στο Σχήμα 3.10, ενώ όλα τα ατομικά τροχιακά υδρογονοειδών κυματοσυναρτήσεων έως το $7s$, απεικονίζονται στο Σχήμα 3.11.



Σχήμα 3.9: Τα πέντε πρώτα ατομικά τροχιακά $1s, 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ [31]. Τα χρώματα (πορτοκαλί, γαλανό) αντιστοιχούν σε διαφορετικά πρόσημα, αν π.χ. η πορτοκαλί περιοχή είναι θετική, η γαλανή είναι αρνητική. Θεωρούμε τον παράγοντα $e^{ia} = 1$.



Σχήμα 3.10: Τα πέντε ατομικά τροχιακά 3d [31]. Τα χρώματα (πορτοκαλί, γαλανό) αντιστοιχούν σε διαφορετικά πρόσημα, αν π.χ. η πορτοκαλί περιοχή είναι θετική, η γαλανή είναι αρνητική. Θεωρούμε τον παράγοντα $e^{ia} = 1$.



Σχήμα 3.11: Όλα τα ατομικά τροχιακά υδρογονοειδών κυματοσυναρτήσεων έως το 7s. Τα χρώματα (κόκκινο, μπλε) αντιστοιχούν σε διαφορετικά πρόσημα, αν π.χ. η κόκκινη περιοχή είναι θετική, η μπλε είναι αρνητική. Θεωρούμε τον παράγοντα $e^{ia} = 1$. Εικόνα από wikipedia [32].

$$\begin{bmatrix}\hat{e}_r\\ \hat{e}_\theta\\ \hat{e}_\phi\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin\theta\cos\phi & \sin\theta\sin\phi & \cos\theta\\ \cos\theta\cos\phi & \cos\theta\sin\phi & -\sin\theta \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{e}_x\\ \hat{e}_y\\ \hat{e}_z\end{bmatrix}$$

ΑΣΚΗΣΗ Ίσως για εξετάσεις... Δίνεται $\int_0^\infty e^{-\gamma r} r^n dr = \gamma^{-(n+1)} \cdot n!$, $n = 1,2,3,\dots$ $\gamma > 0$

Δίνονται τα ατομικά τροχιακά του ατόμου Η, της σελ. 112

1. Να αποδειχθεί ότι η αλλαγή $\vec{r} \to \vec{r}' = -\vec{r} \Rightarrow r' = r$, $\theta' = \pi - \theta$, $\varphi' = \pi + \varphi$

   r ακτινική απόσταση $r \in [0, +\infty)$

   θ πολική γωνία $\theta \in [0, \pi]$

   φ αζιμουθιακή γωνία $\varphi \in [0, 2\pi)$

2. Να αποδειχθεί ότι $\vec{r} = \frac{r}{2}\sin\theta\left[(\hat{x} - i\hat{y})e^{i\varphi} + (\hat{x} + i\hat{y})e^{-i\varphi}\right] + r\cos\theta\,\hat{z}$

3. Να εξετασθούν ως προς την ομοτιμία (άρτιες ή περιττές). Δικαιολόγηση

4. Να βρεθεί πόσες και ποιες κομβικές επιφάνειες έχει το κάθε ατομικό τροχιακό. Δικαιολόγηση.

5. Να φτιαχτεί πίνακας όπως αυτός της σελ. 117 και να ελεγχθεί αν ισχύουν οι κανόνες επιλογής $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m = 0, \pm 1$.

π.χ.

6. Να συγκριθούν οι ισχείς των οπτικών μεταβάσεων στα πλαίσια της προσεγγίσεως διπόλου $1s \to 2p_z$ $1s \to 3p_z$

Διαφορετική ακτινική εξάρτηση

$$\psi_{100}(r,\theta,\varphi) = (\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$d^3r = r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi$

$$\psi_{210}(r,\theta,\varphi) = (32\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \frac{r}{a_0} \cos\theta\, e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$\vec{r} = r\hat{e}_r$

$$\psi_{310}(r,\theta,\varphi) = (6561\pi a_0^3/2)^{-\frac{1}{2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{3a_0}} \cos\theta$$

$$\vec{r}_{1s\,2p_z} = (32\pi^2 a_0^6)^{-\frac{1}{2}} \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi\; e^{-\frac{r}{a_0}}\, \frac{r}{a_0} \cos\theta\, e^{-\frac{r}{2a_0}}\, r\, \hat{e}_r$$

$$= (32\pi^2 a_0^6)^{-\frac{1}{2}} \underbrace{\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, \hat{e}_r \cos\theta}_{K} \int_0^{\infty} dr\, r^2 e^{-\frac{r}{a_0}}\, \frac{r}{a_0}\, e^{-\frac{r}{2a_0}}\, r$$

$$= (32\pi^2 a_0^6)^{-\frac{1}{2}}\, K\, a_0^4 \int_0^{\infty} d\left(\frac{r}{a_0}\right) \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}}\, \frac{r}{a_0}\, e^{-\frac{r}{2a_0}}\, \frac{r}{a_0}$$

$\mu := \frac{r}{a_0}$

Διαφορετική ακτινική εξάρτηση

$$\vec{r}_{1s\,2p_z} = (32\pi^2 a_0^6)^{-1/2} K a_0^4 \underbrace{\int_0^{\infty} d\mu\, \mu^4 e^{-\frac{3}{2}\mu}}$$

Το $\hat{e}_r$ εξαρτάται από τα θ, φ

$$I_1 = \frac{256}{81} \simeq 3.16$$

$$\vec{r}_{1s\,3p_z} = \left(\frac{6561\,\pi^2 a_0^6}{2}\right)^{-1/2} \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi\, \cos\theta\, \hat{e}_r\, e^{-\frac{r}{a_0}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0}\, e^{-\frac{r}{3a_0}}\, r$$

$$= \left(\frac{6561\,\pi^2 a_0^6}{2}\right)^{-1/2} \underbrace{\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, d\varphi \cos\theta\, \hat{e}_r}_{K} \int_0^{\infty} dr\, r^2 e^{-\frac{r}{a_0}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0}\, e^{-\frac{r}{3a_0}}\, r$$

$$= \left(\frac{6561\,\pi^2 a_0^6}{2}\right)^{-1/2} K\, a_0^4 \int_0^{\infty} d\left(\frac{r}{a_0}\right) \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0}\, e^{-\frac{r}{3a_0}}\, \frac{r}{a_0}$$

$$= \left(\frac{6561\,\pi^2 a_0^6}{2}\right)^{-1/2} K a_0^4 \underbrace{\int_0^{\infty} d\mu\, \mu^4 (6 - \mu)\, e^{-\frac{4}{3}\mu}}$$

$$I_2 = \frac{2187}{64} - \frac{10935}{512} \simeq 34.17 - 21.36 \simeq 12.81$$

Άρα,
$$\frac{|\vec{r}_{1s\,2p_z}|}{|\vec{r}_{1s\,3p_z}|} = \left(\frac{6561\,\pi^2 a_0^6}{32\pi^2 a_0^6 \cdot 2}\right)^{1/2} \frac{I_1}{I_2} \simeq \left(\frac{6561}{64}\right)^{1/2} \frac{3.16}{12.81} \simeq 2.5$$

$$\boxed{\int d^3r\, \psi^*_{100}\, \vec{r}\, \psi_{210}} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi\, (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-\frac{r}{a_0}}\, r\hat{e}_r\, (32\pi a_0^3)^{-1/2} \frac{r}{a_0} \cos\theta\, e^{-\frac{r}{2a_0}}$$ 1

$$= (32\pi^2 a_0^6)^{-1/2} \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, \hat{e}_r \cos\theta \quad a_0^4 \int_0^{\infty} d\left(\frac{r}{a_0}\right) \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}} \frac{r}{a_0}\frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$= \frac{\cancel{a_0^4}}{4\sqrt{2}\,\pi \cancel{a_0^3}} \underbrace{\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, \hat{e}_r \cos\theta}_{K_A(\theta,\varphi)} \quad \underbrace{\int_0^{\infty} d\mu\, \mu^4 e^{-\frac{3\mu}{2}}}_{I(\mu)} \qquad \mu := \frac{r}{a_0}$$

ΣΥΓΚΡΙΣΗ
$1s \leftrightarrow 2p_z$
$1s \leftrightarrow 2p_x$ ή $2p_y$

$$\boxed{\int d^3r\, \psi^*_{100}\, \vec{r}\, \psi_{21\pm1}} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi\, (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-\frac{r}{a_0}}\, r\hat{e}_r\, (64\pi a_0^3)^{-1/2} \frac{r}{a_0} \sin\theta\, e^{\pm i\varphi} e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$= (64\pi^2 a_0^6)^{-1/2} \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, \hat{e}_r \sin\theta\, e^{\pm i\varphi}\, a_0^4 \int_0^{\infty} d\left(\frac{r}{a_0}\right) \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}} \left(\frac{r}{a_0}\right)\left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$= \frac{\cancel{a_0^4}}{8\pi \cancel{a_0^3}} \underbrace{\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, \hat{e}_r \sin\theta\, e^{\pm i\varphi}}_{K_B(\theta,\varphi)} \quad \underbrace{\int_0^{\infty} d\mu\, \mu^4 e^{-\frac{3\mu}{2}}}_{I(\mu)}$$

Διαφορετική γωνιακή εξάρτηση

Αλλά $I_A(\mu) = I_B(\mu) = I(\mu)$

$$\hat{e}_r = \sin\theta\cos\varphi\, \hat{e}_x + \sin\theta\sin\varphi\, \hat{e}_y + \cos\theta\, \hat{e}_z$$

$$K_A(\theta,\varphi) = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \sin^2\theta\, d\theta\, d\varphi \cos\theta \cos\varphi\, \hat{e}_x + \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \sin^2\theta\, d\theta\, d\varphi \cos\theta \sin\varphi\, \hat{e}_y + \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, d\varphi \cos^2\theta\, \hat{e}_z$$

$$= \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \cos\varphi}_{0} \int_0^{\pi} d\theta \sin^2\theta \cos\theta\, \hat{e}_x + \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \sin\varphi}_{0} \int_0^{\pi} d\theta \sin^2\theta\cos\theta\, \hat{e}_y + \int_0^{2\pi} d\varphi \underbrace{\int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\cos^2\theta\, \hat{e}_z}_{\left[-\frac{\cos^3\theta}{3}\right]_0^{\pi}} \Rightarrow$$

$$K_A(\theta,\varphi) = 2\pi\left[-\frac{(-1)^3}{3} + \frac{1^3}{3}\right]\hat{e}_z = \frac{4\pi}{3}\hat{e}_z$$

$$K_B(\theta,\varphi) = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \sin^3\theta\, d\theta\, d\varphi\, e^{\pm i\varphi} \cos\varphi\, \hat{e}_x + \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \sin^3\theta\, d\theta\, d\varphi\, e^{\pm i\varphi} \sin\varphi\, \hat{e}_y + \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \sin^2\theta\, d\theta\, d\varphi\, e^{\pm i\varphi} \cos\theta\, \hat{e}_z$$

$$= \int_0^{2\pi} d\varphi \cos\varphi\, e^{\pm i\varphi} \underbrace{\int_0^{\pi} d\theta \sin^3\theta}_{\left[\frac{\cos^3\theta}{3} - \cos\theta\right]_0^{\pi}} \hat{e}_x + \int_0^{2\pi} d\varphi \sin\varphi\, e^{\pm i\varphi} \underbrace{\int_0^{\pi} \sin^3\theta\, d\theta}\, \hat{e}_y + \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi\, e^{\pm i\varphi}}_{0} \int_0^{\pi} d\theta \sin^2\theta\cos\theta\, \hat{e}_z$$

$$= \frac{(-1)^3}{3} - (-1) - \frac{1}{3} + 1 = -\frac{2}{3} + 2 = \frac{6-2}{3} = \frac{4}{3}$$

$$K_B(\theta,\varphi) = \int_0^{2\pi} d\varphi \cos\varphi\, e^{\pm i\varphi} \frac{4}{3}\hat{e}_x + \int_0^{2\pi} d\varphi \sin\varphi\, e^{\pm i\varphi} \frac{4}{3}\hat{e}_y = \frac{4}{3}\pi(\hat{e}_x \pm i\,\hat{e}_y)$$ δίνει ....>

$$\dots \to \frac{4}{3}\int_0^{2\pi} d\varphi \left\{ \cos\varphi\cos\varphi \pm i\cos\varphi\sin\varphi \right\} \hat{e}_x$$

$$+ \frac{4}{3}\int_0^{2\pi} d\varphi \left\{ \sin\varphi\cos\varphi \pm i\sin\varphi\sin\varphi \right\} \hat{e}_y = \frac{4}{3}\cdot\pi\left(\hat{e}_x \pm i\hat{e}_y\right)$$

$$\underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi\cos^2\varphi\,\hat{e}_x}_{\int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1+\cos(2\varphi)}{2} = \pi} \pm \frac{i}{2}\underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi\sin(2\varphi)\,\hat{e}_x}_{0} + \frac{1}{2}\underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi\sin(2\varphi)\,\hat{e}_y}_{0} \pm i\underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi\sin^2\varphi\,\hat{e}_y}_{\int_0^{2\pi} d\varphi\frac{1-\cos(2\varphi)}{2} = \pi}$$

Άρα

$$\boxed{\frac{\left|\vec{r}_{100\,210}\right|}{\left|\vec{r}_{100\,21\pm1}\right|} = \frac{\left|\frac{a_0}{4\sqrt{2}\pi}\cdot\frac{4\pi}{3}\hat{e}_z\, I(\mu)\right|}{\left|\frac{a_0}{8\pi}\cdot\frac{4\pi}{3}\left(\hat{e}_x \pm i\hat{e}_y\right) I(\mu)\right|} = \frac{2}{\sqrt{2}}\frac{\left|\hat{e}_z\right|}{\left|\hat{e}_x \pm i\hat{e}_y\right|} = \frac{2\cdot 1}{\sqrt{2}\cdot\sqrt{2}} = 1}$$

$$\left|e_x \pm i e_y\right|^2 = \left(\hat{e}_x \pm i\hat{e}_y\right)\cdot\left(\hat{e}_x \mp i\hat{e}_y\right)$$

$$1 \mp i\hat{e}_x\hat{e}_y \pm i\hat{e}_x\hat{e}_y + 1 = 2$$

Άρα

$$\boxed{\frac{\left|\vec{p}_{100\,210}\right|}{\left|\vec{p}_{100\,21\pm1}\right|} = 1}$$

δηλαδή οι μεταβάσεις $100\ (1s) \leftrightarrow 210\ (2p_z)$

$100\ (1s) \leftrightarrow 21\pm1\ (\to 2p_x, 2p_y)$

είναι εξ ίσου επιτρεπόμενες

$$2p_x = \frac{\psi_{21+1} + \psi_{21-1}}{\sqrt{2}}$$

$$2p_y = \frac{\psi_{21+1} - \psi_{21-1}}{i\sqrt{2}}$$

$$\boxed{I(\mu) = \int_0^\infty d\mu\,\mu^4 e^{-\frac{3\mu}{2}} = \left(\frac{3}{2}\right)^{-(4+1)} 4! = \frac{2\cdot3\cdot4\cdot2^5}{3^5} = \frac{2^8}{3^4}}$$

$$\int_0^\infty e^{-\gamma r} r^n dr = \gamma^{-(n+1)} n! \quad n = 1,2,3,\dots \quad \gamma > 0$$

$$\boxed{\vec{p}_{100\,210} = -e\,\vec{r}_{100\,210} = -e\frac{a_0}{4\sqrt{2}\cancel{\pi}}\frac{4\cancel{\pi}}{3}\hat{e}_z\cdot\frac{2^8}{3^4} = -ea_0\frac{2^{\frac{15}{2}}}{3^5}\hat{e}_z}$$

$$\boxed{\vec{p}_{100\,21\pm1} = -e\,\vec{r}_{100\,21\pm1} = -e\frac{a_0}{8\cancel{\pi}}\frac{4\cancel{\pi}}{3}\left(\hat{e}_x \pm i\hat{e}_y\right)\frac{2^8}{3^4} = -ea_0\frac{2^7}{3^5}\left(\hat{e}_x \pm i\hat{e}_y\right)}$$

Τομέας Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Τμήμα Φυσικής, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.

Κβαντική Οπτική και Lasers.

Εξέταση της 13ης Ιουνίου 2018. Διδάσκων Κ. Σιμσερίδης

Θέμα Α.

1. Να ελεγχθούν οι $2s, 2p_z, 3d_{xz}$ ως προς την ομοτιμία.

2. Να βρείτε πόσες και ποιες κομβικές επιφάνειες έχει κάθε μία από τις $2s, 2p_z, 3d_{xz}$.

3. Να ελεγχθεί αν μεταβάσεις $1s \leftrightarrow 2p_z$, $1s \leftrightarrow 3p_z$, $2s \leftrightarrow 3p_z$ είναι επιτρεπόμενες ή απαγορευμένες στα πλαίσια της προσεγγίσεως διπόλου κι αν ισχύουν οι κανόνες επιλογής $\Delta l = \pm 1, \Delta m = 0, \pm 1$.

4. Να συγκριθούν οι ισχύες των οπτικών μεταβάσεων, στα πλαίσια της προσεγγίσεως διπόλου, $1s \leftrightarrow 2p_z$, $1s \leftrightarrow 3p_z$.

5. $\boldsymbol{p}_{k_1 k_2} := \int_{\pi\alpha\nu\tau o\acute{\upsilon}} dV\, \Phi^*_{k_1}(\boldsymbol{r})(-e)\boldsymbol{r}\Phi_{k_2}(\boldsymbol{r})$ είναι τα στοιχεία πίνακα της διπολικής ροπής. Εξηγήστε γιατί εάν το στοιχείο πίνακα της διπολικής ροπής μηδενίζεται, δεν υπάρχει τέτοια οπτική μετάβαση.

Θέμα Β.

1. Βρείτε σε τι ενέργεια, συχνότητα, μήκος κύματος αντιστοιχούν οι μεταβάσεις $1s \leftrightarrow 2p_z$, $1s \leftrightarrow 3p_z$, $2s \leftrightarrow 3p_z$. Ποιά από αυτές τις μεταβάσεις θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε για LASER στο ορατό; Ονομάστε τη συχνότητά της ν_0.

2. Έστω ότι το Πλήρες Εύρος στο Ήμισυ του Μεγίστου (Full Width at Half Maximum, FWHM) της μεταβάσεως αυτής είναι $\Delta\nu_0^{FWHM} = 2$ GHz. Έστω ότι έχουμε συλλογή ατόμων Υδρογόνου, σε τετραγωνική κοιλότητα με διαστάσεις $a_x = h = 4$ mm, $a_y = w = 4$ mm, $a_z = L = 0.15$ m. Υπάρχουν υποστηριζόμενοι από την κοιλότητα διαμήκεις ΗΜ τρόποι, ν_m, οι οποίοι να εμπίπτουν στη συχνοτική περιοχή ν_0, η οποία έχει εύρος $\Delta\nu_0^{FWHM}$; Τι τάξεως μεγέθους είναι το m, ώστε διαμήκεις τρόποι ν_m να βρίσκονται εντός της γραμμής εκπομπής ν_0, η οποία έχει εύρος $\Delta\nu_0^{FWHM}$; Θέλουμε δηλαδή $\nu_m \approx \nu_0$.

3. Δίνονται οι συνιστώσες του ηλεκτρικού και του μαγνητικού πεδίου εντός ορθογώνιας παραλληλεπίπεδης κοιλότητας

$$
\begin{aligned}
E_x &= E_{x0}\cos(k_x x)\sin(k_y y)\sin(k_z z)\\
E_y &= E_{y0}\sin(k_x x)\cos(k_y y)\sin(k_z z)\\
E_z &= E_{z0}\sin(k_x x)\sin(k_y y)\cos(k_z z)\\
B_x &= \frac{i}{\omega}\left(E_{y0}k_z - E_{z0}k_y\right)\sin(k_x x)\cos(k_y y)\cos(k_z z)\\
B_y &= \frac{i}{\omega}\left(E_{z0}k_x - E_{x0}k_z\right)\cos(k_x x)\sin(k_y y)\cos(k_z z)\\
B_z &= \frac{i}{\omega}\left(E_{x0}k_y - E_{y0}k_x\right)\cos(k_x x)\cos(k_y y)\sin(k_z z)
\end{aligned}
$$

όπου $k_x = \frac{m_x \pi}{a_x}$, κ.ο.κ., καθώς και οι συχνότητες των τρόπων του ΗΜ πεδίου,

$$\nu_{pqm} = \frac{c}{2}\sqrt{\left(\frac{p}{h}\right)^2 + \left(\frac{q}{w}\right)^2 + \left(\frac{m}{L}\right)^2}$$

Βρείτε τους τρεις κατώτερης τάξεως τρόπους με μη μηδενικό ΗΜ πεδίο σε κυβική κοιλότητα.

4. Σε τετραγωνική κοιλότητα $a_x = a_y = \alpha$, δείξτε ότι $\nu_{pqm} = \frac{c}{2}\frac{m}{L}\sqrt{1+x}$, όπου $x = \frac{p^2+q^2}{m^2}\left(\frac{L}{a}\right)^2$

Χρησιμοποιώντας την προσέγγιση $\sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{x}{2}$, δείξτε ότι οι συχνότητες των εγκαρσίων τρόπων στο 3Δ πρόβλημα είναι

$$\nu_{pqm} = \frac{mc}{2L} + \frac{cL}{4a^2}\frac{p^2+q^2}{m}$$

$\frac{mc}{2L} = \nu_m = \nu_{00m}$ είναι οι συχνότητες των διαμηκών τρόπων στο 1Δ πρόβλημα.

5. Βρείτε τη συχνοτική απόσταση $\Delta\nu_{p,p+1}$ δύο διαδοχικών εγκαρσίων τρόπων, μεταβάλλοντας δηλαδή μόνο το p και κρατώντας τα q, m σταθερά. Τι τιμή έχει η $\Delta\nu_{p,p+1}$ για $p = 1$ και m όσο βρήκατε στο ερώτημα 2;

Τομέας Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Τμήμα Φυσικής, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.

Κβαντική Οπτική και Lasers.

Εξέταση της 13ης Ιουνίου 2018. Διδάσκων Κ. Σιμσερίδης

Θεωρήστε τις ιδιοσυναρτήσεις του ατόμου του Υδρογόνου $\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi) = \Phi_k(\boldsymbol{r})$, όπου $k = \{n, l, m\}$ ο συλλογικός κβαντικός αριθμός. Δηλαδή n = 1, 2, 3, ... είναι ο κύριος κβαντικός αριθμός, l = 0, 1, 2, ... , n–1 είναι ο τροχιακός κβαντικός αριθμός και m = –l, –l+1, ... , l–1, l είναι ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός. Συγκεκριμένα δίνονται οι εξής:

$$\Psi_{100}(r,\theta,\varphi) = (\pi\alpha_o^3)^{-1/2}\, e^{-\frac{r}{a_0}} \qquad \Psi_{100} \equiv 1s$$

$$\Psi_{200}(r,\theta,\varphi) = (32\,\pi\alpha_o^3)^{-\frac{1}{2}}\,(2-\frac{r}{a_0})\, e^{-\frac{r}{2a_0}} \qquad \Psi_{200} \equiv 2s$$

$$\Psi_{210}(r,\theta,\varphi) = (32\,\pi\alpha_o^3)^{-\frac{1}{2}}\,\frac{r}{a_0}\,\cos\theta\, e^{-\frac{r}{2a_0}} \qquad \Psi_{210} \equiv 2p_z$$

$$\Psi_{21\pm1}(r,\theta,\varphi) = (64\,\pi\alpha_o^3)^{-\frac{1}{2}}\,\frac{r}{a_0}\,\sin\theta\, e^{\pm i\varphi}\, e^{-\frac{r}{2a_0}} \qquad (\Psi_{21+1}+\Psi_{21-1})/\sqrt{2} \equiv 2p_x$$

$$(\Psi_{21+1}-\Psi_{21-1})/i\sqrt{2} \equiv 2p_y$$

$$\Psi_{300}(r,\theta,\varphi) = (19683\,\pi\alpha_o^3)^{-\frac{1}{2}}\,(27-18\frac{r}{a_0}+2\frac{r^2}{a_0^2})\, e^{-\frac{r}{3a_0}} \qquad \Psi_{300} \equiv 3s$$

$$\Psi_{310}(r,\theta,\varphi) = (6561\,\pi\alpha_o^3/2)^{-\frac{1}{2}}\,(6-\frac{r}{a_0})\,\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{3a_0}}\cos\theta \qquad \Psi_{310} \equiv 3p_z$$

$$\Psi_{31\pm1}(r,\theta,\varphi) = (6561\,\pi\alpha_o^3)^{-\frac{1}{2}}\,\left(6-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{3a_0}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi} \qquad (\Psi_{31+1}+\Psi_{31-1})/\sqrt{2} \equiv 3p_x$$

$$(\Psi_{31+1}-\Psi_{31-1})/i\sqrt{2} \equiv 3p_y$$

$$\Psi_{320}(r,\theta,\varphi) = (39366\,\pi\alpha_o^3)^{-\frac{1}{2}}\,\left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}}(3\cos^2\theta-1) \qquad \Psi_{320} \equiv 3d_{z^2}$$

$$\Psi_{32\pm1}(r,\theta,\varphi) = (6561\,\pi\alpha_o^3)^{-\frac{1}{2}}\,\left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\varphi} \qquad (\Psi_{32+1}+\Psi_{32-1})/\sqrt{2} \equiv 3d_{xz}$$

$$(\Psi_{32+1}-\Psi_{32-1})/i\sqrt{2} \equiv 3d_{yz}$$

$$\Psi_{32\pm2}(r,\theta,\varphi) = (26244\,\pi\alpha_o^3)^{-\frac{1}{2}}\,\left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\varphi} \qquad (\Psi_{32+2}+\Psi_{32-2})/\sqrt{2} \equiv 3d_{x^2-y^2}$$

$$(\Psi_{32+2}-\Psi_{32-2})/i\sqrt{2} \equiv 3d_{xy}$$

Οι αντίστοιχες ιδιοενέργειες είναι $E_k = \hbar\Omega_k = -\frac{R_E}{n^2} = E_n$, δηλαδή υπάρχει εκφυλισμός ως προς l,m. R_E = 13.6 eV είναι η ενέργεια Rydberg και a_0 είναι η ακτίνα Bohr. Θεωρήστε επίσης δεδομένα:

Α) $\int_0^\infty e^{-\gamma r}\, r^n\, dr = \gamma^{-(n+1)}\, n!$ όπου n = 1, 2, 3, ... και γ > 0.

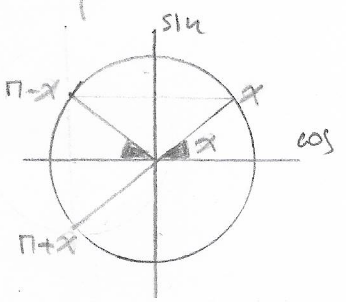
Β) Σε σφαιρικές συντεταγμένες (r, θ, φ), η αντιστροφή ως προς την αρχή του συστήματος αναφοράς δηλαδή η πράξη $\mathbf{r} \to \mathbf{r}' = -\mathbf{r}$ αντιστοιχεί στις αλλαγές $r' = r$, $\theta' = \pi - \theta$, $\varphi' = \pi + \varphi$.

Γ) Ισχύει η παρακάτω έκφραση για το διάνυσμα θέσεως:
$\boldsymbol{r} = \frac{r}{2}\sin\theta\left[(\hat{x}-i\hat{y})\,\mathrm{e}^{i\varphi} + (\hat{x}+i\hat{y})\,\mathrm{e}^{-i\varphi}\right] + r\cos\theta\,\hat{z}$.

Δ) $h \approx 4.1\times10^{-15}$ eV s και $c \approx 3\times10^8$ m/s.

?Ισχύει για την ομοτιμία $\hat{\mathbb{P}}\, Y_l^m = (-1)^l\, Y_l^m$

① Ὁμοτιμία (ΟΛΩΝ) $\vec{r} \to \vec{r}\,' = -\vec{r} \iff r' = r,\ \theta' = \pi - \theta,\ \varphi' = \pi + \varphi$ ΘΕΜΑ Α 1



$1s = \Psi_{100}$ ΑΡΤΙΑ διότι εξαρτάται μόνο από το r

$2s = \Psi_{200}$ ΑΡΤΙΑ διότι εξαρτάται μόνο από το r

$2p_z = \Psi_{210}$ ΠΕΡΙΤΤΗ διότι $\cos\theta' = \cos(\pi-\theta) = -\cos\theta$

$2p_x = \dfrac{\Psi_{21+1} + \Psi_{21-1}}{\sqrt{2}} \propto \sin\theta\cos\varphi$ ΠΕΡΙΤΤΗ διότι... $\begin{cases} \sin\theta' = \sin(\pi-\theta) = \sin\theta \\ \cos\varphi' = \cos(\pi+\varphi) = -\cos\varphi \end{cases}$

$2p_y = \dfrac{\Psi_{21+1} - \Psi_{21-1}}{i\sqrt{2}} \propto \sin\theta\sin\varphi$ ΠΕΡΙΤΤΗ διότι $\begin{cases} \sin\theta' = \sin(\pi-\theta) = \sin\theta \\ \sin\varphi' = \sin(\pi+\varphi) = -\sin\varphi \end{cases}$

$3s = \Psi_{300}$ ΑΡΤΙΑ διότι εξαρτάται μόνο από το r

$3p_z = \Psi_{310}$ ΠΕΡΙΤΤΗ διότι $\cos\theta' = \cos(\pi-\theta) = -\cos\theta$

$3p_x = \dfrac{\Psi_{31+1} + \Psi_{31-1}}{\sqrt{2}} \propto \sin\theta\cos\varphi$ ΠΕΡΙΤΤΗ διότι $\begin{cases} \sin\theta' = \sin(\pi-\theta) = \sin\theta \\ \cos\varphi' = \cos(\pi+\varphi) = -\cos\varphi \end{cases}$

$3p_y = \dfrac{\Psi_{31+1} - \Psi_{31-1}}{i\sqrt{2}} \propto \sin\theta\sin\varphi$ ΠΕΡΙΤΤΗ διότι $\begin{cases} \sin\theta' = \sin(\pi-\theta) = \sin\theta \\ \sin\varphi' = \sin(\pi+\varphi) = -\sin\varphi \end{cases}$

$3d_{z^2} = \Psi_{320}$ ΑΡΤΙΑ διότι εξαρτάται από r και $\cos^2\theta$

$r' = r \quad \cos\theta' = \cos(\pi-\theta) = -\cos\theta \Rightarrow \cos^2\theta' = \cos^2\theta$

$3d_{xz} = \dfrac{\Psi_{32+1} + \Psi_{32-1}}{\sqrt{2}} \propto \sin\theta\cos\theta\cos\varphi$ ΑΡΤΙΑ διότι... $\begin{cases} \sin\theta' = \sin(\pi-\theta) = \sin\theta \\ \cos\theta' = \cos(\pi-\theta) = -\cos\theta \\ \cos\varphi' = \cos(\pi+\varphi) = -\cos\varphi \end{cases}$

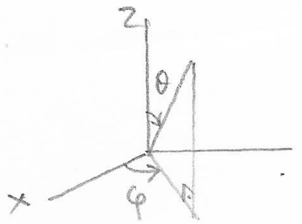
$3d_{yz} = \dfrac{\Psi_{32+1} - \Psi_{32-1}}{i\sqrt{2}} \propto \sin\theta\cos\theta\sin\varphi$ ΑΡΤΙΑ διότι... $\begin{cases} \sin\theta' = \sin(\pi-\theta) = \sin\theta \\ \cos\theta' = \cos(\pi-\theta) = -\cos\theta \\ \sin\varphi' = \sin(\pi+\varphi) = -\sin\varphi \end{cases}$

$3d_{x^2-y^2} = \dfrac{\Psi_{32+2} + \Psi_{32-2}}{\sqrt{2}} \propto \sin^2\theta\cos 2\varphi$ ΑΡΤΙΑ διότι... $\begin{cases} \sin\theta' = \sin(\pi-\theta) = \sin\theta \Rightarrow \sin^2\theta' = \sin^2\theta \\ \varphi' = \pi+\varphi \Rightarrow 2\varphi' = 2\pi + 2\varphi \Rightarrow \\ \cos 2\varphi' = \cos 2\varphi \end{cases}$

$3d_{xy} = \dfrac{\Psi_{32+2} - \Psi_{32-2}}{i\sqrt{2}} \propto \sin^2\theta\sin 2\varphi$ ΑΡΤΙΑ διότι... $\begin{cases} \sin\theta' = \sin(\pi-\theta) = \sin\theta \Rightarrow \sin^2\theta' = \sin^2\theta \\ \varphi' = \pi+\varphi \Rightarrow 2\varphi' = 2\pi + 2\varphi \Rightarrow \\ \sin 2\varphi' = \sin 2\varphi \end{cases}$

② Κομβικές επιφάνειες (ΟΛΩΝ)

$n' = \#$ nodal surfaces $= n-1$
\# κομβικών επιφανειών



$1s = \psi_{100}$ δεν μηδενίζεται πουθενά $\Rightarrow n' = 0$

$2s = \psi_{200}$ μηδενίζεται για $2 - \frac{r}{a_0} = 0 \Rightarrow r = 2a_0$ $\quad n' = 1$ μία, σφαιρική

$2p_z = \psi_{210}$ μηδενίζεται για $r = 0$ (σημείο) κ $\cos\theta = 0 \Rightarrow \theta = \frac{\pi}{2} \Rightarrow$ επίπεδο $\underline{xy}$

$n' = 1$ μία, επίπεδη

$2p_x = \frac{\psi_{21+1} + \psi_{21-1}}{\sqrt{2}} \propto \sin\theta \cos\varphi \frac{r}{a_0}$ μηδενίζεται για $r = 0$ (σημείο)

$\sin\theta = 0 \Rightarrow \theta = 0$ ή $\theta = \pi \Rightarrow$ άξονας z

$\cos\varphi = 0 \Rightarrow \varphi = \frac{\pi}{2}$ ή $\varphi = \frac{3\pi}{2} \Rightarrow$ επίπεδο $\underline{yz}$ $\quad n' = 1$ (μία, επίπεδη)

$2p_y = \frac{\psi_{21+1} + \psi_{21-1}}{i\sqrt{2}} \propto \sin\theta \sin\varphi \frac{r}{a_0}$ μηδενίζεται για $r = 0$ (σημείο)

$\sin\theta = 0 \Rightarrow \theta = 0$ ή $\theta = \pi \Rightarrow$ άξονας z

$\sin\varphi = 0 \Rightarrow \varphi = 0$ ή $\varphi = \pi \Rightarrow$ επίπεδο $\underline{xz}$ $\quad n' = 1$ (μία, επίπεδη)

$3s = \psi_{300}$ μηδενίζεται για $27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2} = 0$

$$\Delta = 18^2 - 4 \cdot 2 \cdot 27 = 108 = 2^2 \cdot 3^2 \cdot 3$$

$$\frac{r}{a_0} = \frac{18 \pm 2 \cdot 3\sqrt{3}}{2 \cdot 2} = \frac{9 \pm 3\sqrt{3}}{2} \quad n' = 2 \text{ (δύο, σφαιρικές)}$$

$$\simeq 7.098 \text{ ή } \simeq 1.902$$

$3p_z = \psi_{310} \propto \frac{r}{a_0}\left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \cos\theta$ μηδενίζεται για $r = 0$ (σημείο)

$r = 6a_0$ (σφαιρική επιφάνεια)

$\cos\theta = 0 \Rightarrow \theta = \frac{\pi}{2} \Rightarrow$ επίπεδο $\underline{xy}$

$n' = 2$ (μία σφαιρική, μία επίπεδη)

$3p_x = \frac{\psi_{31+1} + \psi_{31-1}}{\sqrt{2}} \propto \left(6 - \frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0} \cdot \sin\theta \cos\varphi$ μηδενίζεται για $r = 0$ (σημείο)

$r = 6a_0$ σφαιρική επιφάνεια

$\sin\theta = 0 \Rightarrow \theta = 0$ ή $\pi \Rightarrow$ άξονας z

$\cos\varphi = 0 \Rightarrow \varphi = \frac{\pi}{2}$ ή $\frac{3\pi}{2} \Rightarrow$ επίπεδο $\underline{yz}$

$n' = 2$ μία σφαιρική, μία επίπεδη

$$3p_y = \frac{\psi_{31+1} - \psi_{31-1}}{i\sqrt{2}} \propto \left(6-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}\sin\theta \sin\varphi$$

μηδενίζεται για $r=0$ (σημείο)

$r = 6a_0$ σφαιρική επιφάνεια

$\sin\theta = 0 \Rightarrow \theta = 0$ ή $\pi \Rightarrow$ άξων z

$\sin\varphi = 0 \Rightarrow \varphi = 0$ ή $\pi \Rightarrow$ επίπεδο $\underline{\underline{xz}}$

$n' = 2$ (μία σφαιρική, μία επίπεδη)

$$3d_{z^2} = \psi_{320} \propto \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 (3\cos^2\theta - 1)$$ μηδενίζεται για $r=0$ (σημείο)

$\cos^2\theta = \frac{1}{3} \Rightarrow \cos\theta = \pm\frac{1}{\sqrt{3}}$

$n' = 2$ (2 κωνικές επιφάνειες)

$\theta \simeq 54.73°$ ή $\theta \simeq 125.26° = 180° - 54.73°$

$$3d_{\underline{\underline{xz}}} = \frac{\psi_{32+1} + \psi_{32-1}}{\sqrt{2}} \propto \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 \sin\theta \cos\theta \cos\varphi$$

μηδενίζεται για $r=0$ (σημείο)

$\sin\theta = 0 \Rightarrow \theta = 0$ ή $\theta = \pi \Rightarrow$ άξων z

$\cos\theta = 0 \Rightarrow \theta = \frac{\pi}{2} \Rightarrow$ επίπεδο $\underline{\underline{xy}}$

$\cos\varphi = 0 \Rightarrow \varphi = \frac{\pi}{2}$ ή $\varphi = \frac{3\pi}{2} \Rightarrow$ επίπεδο $\underline{\underline{yz}}$

$n' = 2$ (δύο επίπεδα)

$$3d_{\underline{\underline{yz}}} = \frac{\psi_{32+1} - \psi_{32-1}}{i\sqrt{2}} \propto \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 \sin\theta \cos\theta \sin\varphi$$

μηδενίζεται για $r=0$ (σημείο)

$\sin\theta = 0 \Rightarrow \theta = 0$ ή $\theta = \pi \Rightarrow$ άξων z

$\cos\theta = 0 \Rightarrow \theta = \frac{\pi}{2} \Rightarrow$ επίπεδο $\underline{\underline{xy}}$

$\sin\varphi = 0 \Rightarrow \varphi = 0$ ή $\varphi = \pi \Rightarrow$ επίπεδο $\underline{\underline{xz}}$

$n' = 2$ (επίπεδα)

$$3d_{x^2-y^2} = \frac{\psi_{32+2} + \psi_{32-2}}{\sqrt{2}} \propto \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 \sin^2\theta \cos(2\varphi)$$

μηδενίζεται για $r=0$ (σημείο)

$\sin^2\theta = 0 \Rightarrow \sin\theta = 0 \Rightarrow \theta = 0$ ή $\theta = \pi \Rightarrow$ άξων z

$0 \le \varphi < 2\pi$
$0 \le 2\varphi < 4\pi$

$\cos(2\varphi) = 0 \Rightarrow 2\varphi = \frac{\pi}{2}$ ή $\frac{3\pi}{2}$ ή $\frac{5\pi}{2}$ ή $\frac{7\pi}{2}$

$\varphi = \frac{\pi}{4}$ ή $\varphi = \frac{3\pi}{4}$ ή $\varphi = \frac{5\pi}{4}$ ή $\varphi = \frac{7\pi}{4}$

επίπεδη επιφάνεια   επίπεδη επιφάνεια

$n' = 2$ (2 επίπεδες)

$$3d_{xy} = \frac{\psi_{32+2} - \psi_{32-2}}{i\sqrt{2}} \propto \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 \sin^2\theta \, \sin(2\varphi)$$

μηδενίζεται για $r=0$ (σημείο)

$\sin^2\theta = 0 \Rightarrow \sin\theta = 0 \Rightarrow \theta = 0$ ή $\theta = \pi \Rightarrow$ άξονας z

$\sin(2\varphi) = 0 \Rightarrow 2\varphi = 0$ ή $2\varphi = \pi \Rightarrow \varphi = 0$ ή $\varphi = \frac{\pi}{2}$

$2\varphi = 2\pi$ ή $2\varphi = 3\pi$ $\quad \varphi = \pi \quad \varphi = \frac{3\pi}{2}$

επίπεδο xz $\quad$ επίπεδο yz

$n' = 2$ (επίπεδες επιφάνειες)

3 ΠΙΝΑΞ...

⊛ είναι όμως στην ίδια ενέργεια στο άτομο H...

k_1	k_2	$\Phi^*_{k_1}(\vec r)$	$\Phi_{k_2}(\vec r)$	$\Phi^*_{k_1}(\vec r)\vec r\,\Phi_{k_2}(\vec r)$	$\vec r_{k_1k_2}$	Δl	Δm	
100	200	A	A	Π	∅	∅	∅	A
100	210	A	Π	A	≠∅	1	∅	E
100	21±1	A	Π	A	≠∅	1	±1	E
100	300	A	A	Π	∅	∅	∅	A
100	310	A	Π	A	≠∅	1	∅	E
100	31±1	A	Π	A	≠∅	1	±1	E
100	320	A	A	Π	∅	2	∅	A
100	32±1	A	A	Π	∅	2	±1	A
100	32±2	A	A	Π	∅	2	±2	A
200	210	A	Π	A	≠∅ ⊛	1	∅	E
200	21±1	A	Π	A	≠∅ ⊛	1	±1	E
200	300	A	A	Π	∅	∅	∅	A
200	310	A	Π	A	≠∅	1	∅	E
200	31±1	A	Π	A	≠∅	1	±1	E
200	320	A	A	Π	∅	2	∅	A
200	32±1	A	A	Π	∅	2	±1	A
200	32±2	A	A	Π	∅	2	±2	A
21±1								
21±1								
21±1								
21±1								

(4) $\vec{r}_{kk'} = \int d^3r\, \Phi_k^*(\vec{r})\, \vec{r}\, \Phi_{k'}(\vec{r})$

$\hat{e}_r$ εξαρτάται από θ, φ

$$\vec{r}_{1s\,2p_z} = \int d^3r\, (\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}\, \vec{r}\, (32\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \frac{r}{a_0} \cos\theta\, e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$= (32\pi^2 a_0^6)^{-\frac{1}{2}} \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi\, e^{-\frac{r}{a_0}}\, r\hat{e}_r \frac{r}{a_0} \cos\theta\, e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$= \frac{1}{4\sqrt{2}\,\pi a_0^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, \hat{e}_r \cos\theta \int_0^{\infty} \frac{dr}{a_0} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-\frac{r}{a_0}} \frac{r}{a_0}\frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot a_0^3 \cdot a_0$$

$$= \frac{a_0}{4\sqrt{2}\,\pi} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\cos\theta\, \hat{e}_r}_{I'} \underbrace{\int_0^{\infty} d\mu\, \mu^4 e^{-\mu} e^{-\frac{\mu}{2}}}_{I_1} \qquad \mu := \frac{r}{a_0}$$

$$I_1 = \int_0^{\infty} d\mu\, \mu^4 e^{-\frac{3\mu}{2}} = \left(\frac{3}{2}\right)^{-(4+1)} \cdot 4! = \frac{2^5}{3^5}\, 2\cdot 3\cdot 2^2 = \frac{2^8}{3^4} = \frac{256}{81} \simeq 3.16$$

$$\vec{r}_{1s\,3p_z} = \int d^3r\, (\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}\, \vec{r}\, (6561\pi a_0^3/2)^{-\frac{1}{2}} \left(6-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{3a_0}} \cos\theta$$

$$= \left(\frac{6561\pi^2 a_0^6}{2}\right)^{-\frac{1}{2}} \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi\, r\hat{e}_r\, e^{-\frac{r}{a_0}} \left(6-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{3a_0}} \cos\theta$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{6561}\,\pi a_0^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\cos\theta\, \hat{e}_r \int_0^{\infty} \frac{dr\, r^3}{a_0^4} e^{-\frac{r}{a_0}} \left(6-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{3a_0}} a_0^4$$

$$= \frac{\sqrt{2}\, a_0}{\sqrt{6561}\,\pi} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\cos\theta\, \hat{e}_r}_{I'} \underbrace{\int_0^{\infty} d\mu\, \mu^4 e^{-\mu} (6-\mu)\, e^{-\frac{\mu}{3}}}_{I_2}$$

$$I_2 = 6\int_0^{\infty} d\mu\, \mu^4 e^{-\frac{4\mu}{3}} - \int_0^{\infty} d\mu\, \mu^5 e^{-\frac{4\mu}{3}} \qquad - \frac{3^6\, 2\cdot 3\cdot 4\cdot 5}{4^6}$$

$$6\cdot\left(\frac{4}{3}\right)^{-(4+1)} 4! - \left(\frac{4}{3}\right)^{-(5+1)} 5! = 6\,\frac{3^5}{4^5}\,4! - \left(\frac{3}{4}\right)^6 5! = \frac{2\cdot 3\cdot 3^5\cdot 2\cdot 3\cdot 4}{4^5}$$

$$= \frac{3^7}{4^3} - \frac{2\cdot 3^7\cdot 5}{4^5} = \frac{2187}{64} - \frac{10935}{512} \simeq 34.17 - 21.36 \simeq 12.81$$

Άρα

$$\frac{\left|\vec{r}_{1s2p_z}\right|}{\left|\vec{r}_{1s3p_z}\right|} = \frac{\frac{a_0}{4\sqrt{2}\pi}\cdot 3.16}{\frac{\sqrt{2}\,a_0}{\sqrt{6561\pi}}\;12.81} = \sqrt{\frac{6561}{4\cdot 16}}\;\frac{3.16}{12.81} = \frac{81}{8}\;\frac{3.16}{12.81} \simeq 2.5$$

(5) Η δυναμική ενέργεια της διαταραχής γράφεται $V_{\mathcal{E}} = e\mathcal{E}_0 z\cos\omega t$, άρα, τα στοιχεία πίνακά της είναι

$$V_{\mathcal{E}k'k}(t) = e\mathcal{E}_0\cos\omega t\; z_{k'k} = -\wp_{zk'k}\,\mathcal{E}_0\cos\omega t \quad \text{για } \vec{\mathcal{E}}\uparrow\uparrow\hat{z}$$

Οπότε, αν $z_{k'k}=0$ η διαταραχή δεν εμπλέκει τις καταστάσεις k' και k οπότε, η μετάβαση $k'\leftrightarrow k$ είναι απαγορευμένη, με την έννοια ότι αν το ηλεκτρόνιο βρισκόταν στην k', η διαταραχή δεν θα το εμπλέξει με την k και αντιστρόφως.

ΘΕΜΑ Β

1.

$$E_n = \frac{-13.6\,eV}{n^2} \qquad E_1 = -13.6\,eV \qquad E_2 = -3.4\,eV \qquad E_3 = -1.5\,eV$$

$$E_2 - E_1 = -3.4\,eV + 13.6\,eV = 10.2\,eV \qquad \nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{10.2\,eV}{4.1\cdot 10^{-15}\,eVs} \simeq 2.5\,PHz$$

2pz 1s

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3\cdot 10^8}{2.5\,10^{15}\,Hz}\frac{m}{s} = \frac{6}{5}\cdot 10^{-7}\,m = 120\,nm$$

$$E_3 - E_1 = -1.5\,eV + 13.6\,eV = 12.1\,eV \qquad \nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{12.1\,eV}{4.1\cdot 10^{-15}\,eVs} = 3\,PHz$$

3pz 1s

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3\cdot 10^8}{3\cdot 10^{15}\,PHz}\frac{m}{s} = 10^{-7}\,m = 100\,nm$$

$$E_3 - E_2 = -1.5\,eV + 3.4\,eV = 1.9\,eV \qquad \nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{1.9\,eV}{4.1\cdot 10^{-15}\,eVs} = 0.5\,PHz$$

3pz 2s

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3\cdot 10^8}{0.5\cdot 10^{15}\,Hz}\frac{m}{s} = 6\cdot 10^{-7}\,m = 600\,nm$$

600nm είναι στο ορατό

2.

$$\frac{\Delta\nu_0^{FWHM}}{\nu_0} = \frac{2\,GHz}{0,5\,PHz} = 4\cdot 10^{-6}$$ αρκετά λεπτή...

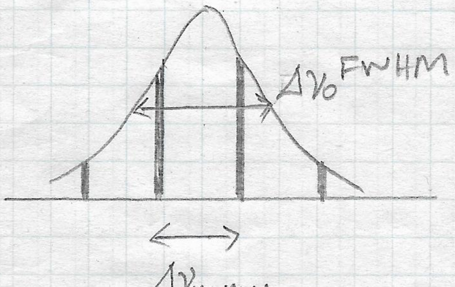
$$\omega_m = \frac{m\pi c}{L} \Rightarrow 2\pi\nu_m = \frac{m\pi c}{L} \Rightarrow \nu_m = \frac{mc}{2L}, \quad m \in \mathbb{N}^*$$

$$\Rightarrow \Delta\nu_{m,m+1} = \frac{c}{2L} = \frac{3\cdot 10^8}{2\cdot 0.15\,m}\frac{m}{s} = 10^9\,Hz = 1\,GHz$$

Άρα μέσα στο FWHM της ν_0, $\Delta\nu_0^{FWHM}$, χωράνε

$$\left[\frac{\Delta\nu_0^{FWHM}}{\Delta\nu_{m,m+1}}\right] = \frac{2\,GHz}{1\,GHz} = 2 \Rightarrow$$ χωράνε 2 διαμήκεις τρόποι

↑ ακέραιο μέρος



$$\nu_m = \nu_0 \Rightarrow \frac{mc}{2L} = \nu_0 \Rightarrow$$

$$m = \frac{2L\nu_0}{c} = \frac{2\cdot 0.15\,m \cdot 0.5\cdot 10^{15}\,Hz}{3\cdot 10^8\,m/s}$$

$$\Rightarrow m = 0.5\cdot 10^6$$

3.

p	q	m	ΗΜ πεδίο	$2a\nu/c$
0	0	0	0	0
0	0	1	0	1
0	1	1	≠0	$\sqrt{2}$
1	1	1	≠0	$\sqrt{3}$
2	0	0	0	2
2	1	0	≠0	$\sqrt{5}$

④ $$\nu_{pqm} = \frac{c}{2}\sqrt{\frac{p^2+q^2}{a^2}+\frac{m^2}{L^2}} = \frac{c}{2}\frac{m}{L}\sqrt{1+\frac{p^2+q^2}{a^2}\frac{L^2}{m^2}} = \frac{c}{2}\frac{m}{L}\sqrt{1+x}$$

$$\nu_{pqm} = \frac{c}{2}\frac{m}{L}\left(1+\frac{x}{2}\right) = \frac{c}{2}\frac{m}{L}\left(1+\frac{p^2+q^2}{a^2}\frac{L^2}{m^2}\frac{1}{2}\right)$$

$$\nu_{pqm} = \frac{mc}{2L} + \frac{cL}{4a^2}\frac{p^2+q^2}{m}$$

⑤ $$\Delta\nu_{p,p+1} = \frac{cL}{4a^2}\frac{2p+1}{m}$$

$$\Delta\nu_{1,2} = \frac{3\cdot10^8\ 0.15}{4\cdot4^2\,10^{-6}}\ \frac{3}{0.5\cdot10^6} = \frac{3^2}{4^3}\ \frac{3\cdot5}{5\cdot10}\cdot10^8\,\mathrm{Hz} = \left(\frac{3}{4}\right)^3 10^7\,\mathrm{Hz}$$

$$\Delta\nu_{1,2} = 0.421875\cdot10^7\,\mathrm{Hz} = 4.21875\ \mathrm{MHz}$$