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 13[ης] Ιουνίου 2018. Διδάσκων Κ. Σιμσερίδης

Θεωρήστε τις ιδιοσυναρτήσεις του ατόμου του Υδρογόνου $\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi) = \Phi_k(\mathbf{r})$, 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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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:

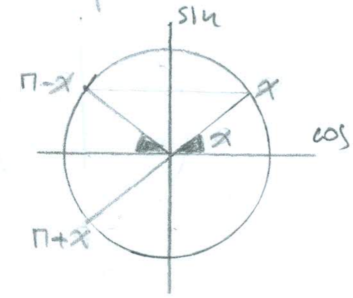
Α) $\int_0^\infty e^{-\gamma r}\, r^n\, dr = \gamma^{-(n+1)}\, n!$ όπου n = 1, 2, 3, . . . και γ > 0.

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

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

Δ) $h \approx 4.1 \times 10^{-15}$ eV s και $c \approx 3 \times 10^8$ m/s.

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



$1s = \Psi_{100}$ 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… $\begin{cases} \sin\theta' = \sin(\pi-\theta) = \sin\theta \\ \cos\theta' = \cos(\pi-\theta) = -\cos\theta \\ \sin\varphi' = \sin(\pi+\varphi) = -\sin\varphi \end{cases}$

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

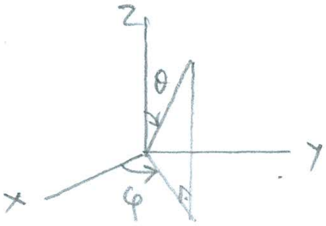
$d_{xy} = \dfrac{\Psi_{32+2} - \Psi_{32-2}}{i\sqrt{2}} \propto \sin^2\theta\sin 2\varphi$ ΑΡΤΙΑ διότι… $\begin{cases} \sin\theta' = \sin(\pi-\theta) = \sin\theta \Rightarrow \sin^2\theta' = \sin^2\theta \\ \varphi' = \pi + \varphi \Rightarrow 2\varphi' = 2\pi + 2\varphi \Rightarrow \\ \sin 2\varphi'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

2//

(2) Κομβικές επιφάνειες

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

$\#$ κομβικών επιφανειών



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

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

μία, σφαιρική

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

$n' = 1$ μία, επίπεδη $\qquad$ επίπεδο xy

$2p_x = \dfrac{\psi_{211} + \psi_{21-1}}{\sqrt{2}} \propto \sin\theta\cos\varphi\,\dfrac{r}{a_0}$ μηδενίζεται για $r=0$ (σημείο)

$\left.\begin{array}{l} \sin\theta = 0 \Rightarrow \theta = 0 \text{ ή } \theta = \pi \Rightarrow \text{ άξονας } z \\ \cos\varphi = 0 \Rightarrow \varphi = \frac{\pi}{2} \text{ ή } \varphi = \frac{3\pi}{2} \Rightarrow \text{ άξονας } y \end{array}\right\}$ επίπεδο yz

$n' = 1$ μία, επίπεδη

$2p_y = \dfrac{\psi_{211} + \psi_{21-1}}{i\sqrt{2}} \propto \sin\theta\sin\varphi\,\dfrac{r}{a_0}$ μηδενίζεται για $r=0$ (σημείο)

$\left.\begin{array}{l} \sin\theta = 0 \Rightarrow \theta = 0 \text{ ή } \theta = \pi \Rightarrow \text{ άξονας } z \\ \sin\varphi = 0 \Rightarrow \varphi = 0 \text{ ή } \varphi = \pi \Rightarrow \text{ άξονας } x \end{array}\right\}$ επίπεδο xz

$n' = 1$ μία, επίπεδη

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

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

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

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

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

$r = 6a_0$ σφαιρική επιφάνεια

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

$n' = 2$ μία σφαιρική, μία επίπεδη

$3p_x = \dfrac{\psi_{311} + \psi_{31-1}}{\sqrt{2}} \propto \left(6 - \dfrac{r}{a_0}\right)\dfrac{r}{a_0}\cdot\sin\theta\cos\varphi$ μηδενίζεται για $r = 0$ (σημείο)

$r = 6a_0$ σφαιρική επιφάνεια

$\left.\begin{array}{l} \sin\theta = 0 \Rightarrow \theta = 0 \text{ ή } \pi \Rightarrow \text{ άξων } z \\ \cos\varphi = 0 \Rightarrow \varphi = \frac{\pi}{2} \text{ ή } \frac{3\pi}{2} \Rightarrow \text{ άξων } y \end{array}\right\}$

$\Rightarrow$ επίπεδο 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 $\pi \Rightarrow$ άξονας z

$\sin\varphi = 0 \Rightarrow \varphi = 0$ ή $\pi \Rightarrow$ άξονας x

$\Big\}$ επίπεδο 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

$\theta = 54.73^\circ$ ή $\theta \simeq 125.26^\circ$
$= 180^\circ - 54.73^\circ$

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

μηδενίζεται για $r = 0$ (σημείο)

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

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

$\cos\varphi = 0 \Rightarrow \varphi = \frac{\pi}{2}$ ή $\varphi = \frac{3\pi}{2} \Rightarrow$ άξονας y

$\Big\}$ επίπεδο $\underline{\underline{yz}}$

$n' = 2$ δύο επίπεδες

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

μηδενίζεται για $r = 0$ (σημείο)

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

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

$\sin\varphi = 0 \Rightarrow \varphi = 0$ ή $\varphi = \pi \Rightarrow$ άξονας x

$\Big\}$ επίπεδο $\underline{xz}$

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

μηδενίζεται για $r = 0$ (σημείο)

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

$\cos(2\varphi) = 0 \Rightarrow 2\varphi = \frac{\pi}{2}$ ή $\frac{3\pi}{2} \Rightarrow \varphi = \frac{\pi}{4}$ ή $\varphi = \frac{3\pi}{4}$

$n' = 2$ επίπεδες επιφάνειες οριζόμενες από

(άξονα z κ επίπεδο $\varphi = \frac{\pi}{4}$) (άξονα z κ επίπεδο $\varphi = 3\pi/4$)

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

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	0	0	0	A
100	210	A	Π	A	≠0	1	0	E
100	21±1	A	Π	A	≠0	1	±1	E
100	300	A	A	Π	0	0	0	A
100	310	A	Π	A	≠0	1	0	E
100	31±1	A	Π	A	≠0	1	±1	E
100	320	A	A	Π	0	2	0	A
100	32±1	A	A	Π	0	2	±1	A
100	32±2	A	A	Π	0	2	±2	A
200	210	A	Π	A	≠0 ⊛	1	0	E
200	21±1	A	Π	A	≠0 ⊛	1	±1	E
200	300	A	A	Π	0	0	0	A
200	310	A	Π	A	≠0	1	0	E
200	31±1	A	Π	A	≠0	1	±1	E
200	320	A	A	Π	0	2	0	A
200	32±1	A	A	Π	0	2	±1	A
200	32±2	A	A	Π	0	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

$$\frac{\left|\vec{r}_{1s\,2p_z}\right|}{\left|\vec{r}_{1s\,3p_z}\right|} = \frac{\dfrac{a_0}{4\sqrt{2}\,\pi}\cdot 3.16}{\dfrac{\sqrt{2}\,a_0}{\sqrt{6561}\,\pi}\;12.81} = \sqrt{\frac{6561}{4\cdot 16}}\;\frac{3.16}{12.81} = \frac{81}{8}\;\frac{3.16}{12.81} \simeq 2.5$$

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

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = e\mathcal{E}_0\cos\omega t\; z_{k'k} = -\wp_{zk'k}\,\mathcal{E}_0\cos\omega t$$

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

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

$2p_z \quad 1s$

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

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

$3p_z \quad 1s$

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

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

$3p_z \quad 2s$

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

600nm είναι στο ορατό

2. $\frac{\Delta\nu_0^{FWHM}}{\nu_0} = \frac{2\,GHz}{0.5\,PHz} = 4\cdot 10^{-6}$ αρκετά λεπτή...

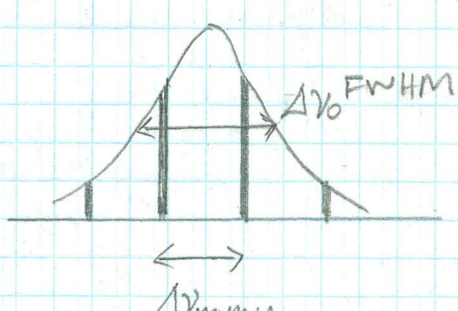
$$\omega_m = \frac{m\pi c}{L} \Rightarrow 2\pi\nu_m = \frac{m\pi c}{L} \Rightarrow \nu_m = \frac{mc}{2L},\ m\in\mathbb{N}^*$$

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

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

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

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

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

$$\Delta\nu_{1,2} = 0.421875\cdot 10^7\ \mathrm{Hz} = 4.21875\ \mathrm{MHz}$$