

## Επιτρεπόμενες και απαγορευμένες οπτικές μεταβάσεις στο άτομο του Υδρογόνου.

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

$n = 1, 2, 3, \dots$  είναι ο **κύριος κβαντικός αριθμός**,

$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$  είναι ο **τροχιακός κβαντικός αριθμός**, και

$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$  είναι ο **μαγνητικός κβαντικός αριθμός**.

Συγκεκριμένα δίνονται οι

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

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

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

$$\Psi_{21\pm 1}(r, \theta, \varphi) = (64\pi a_0^3)^{-1/2} \frac{r}{a_0} \sin\theta e^{\pm i\varphi} e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

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

Οι αντίστοιχες ιδιοενέργειες είναι  $E_k = \hbar\Omega_k = -\frac{R_E}{n^2} = E_n$ , δηλαδή υπάρχει εκφυλισμός ως προς  $l, m$ .

$R_E = 13.6 \text{ eV}$  είναι η ενέργεια Rydberg και  $a_0$  είναι η ακτίνα Bohr.

0. Να ελεγχθεί αν όλες οι παραπάνω δεδομένες κυματοσυναρτήσεις είναι κανονικοποιημένες.
1. Να χαρακτηριστούν όλες οι παραπάνω δεδομένες κυματοσυναρτήσεις (π.χ. η πρώτη είναι η 1s) και να ελεγχθεί αν είναι άρτιες ή περιττές.
2. Να αποφανθείτε αν μηδενίζονται ή όχι τα ολοκληρώματα  $\mathbf{r}_{k_1 k_2} := \int_{\text{παντο}\acute{\upsilon}} dV \Phi_{k_1}^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \Phi_{k_2}(\mathbf{r})$ . Τα ολοκληρώματα αυτά είναι ανάλογα με τα στοιχεία πίνακα της διπολικής ροπής  $\mathbf{p} = (-e)\mathbf{r}$ , δηλαδή  $\mathbf{p}_{k_1 k_2} := \int_{\text{παντο}\acute{\upsilon}} dV \Phi_{k_1}^*(\mathbf{r}) (-e)\mathbf{r} \Phi_{k_2}(\mathbf{r})$ . Εάν το στοιχείο πίνακα της διπολικής ροπής μηδενίζεται, δεν υπάρχει τέτοια οπτική μετάβαση.
3. Προβλέψτε λοιπόν ποιες από τις μεταβάσεις μεταξύ των ιδιοκαταστάσεων που δίνονται επιτρέπονται και ελέγξτε αν ισχύουν οι «κανόνες επιλογής»  $\Delta l = \pm 1, \Delta m = 0, \pm 1$ .
4. Ελέγξτε αν οι δεδομένες  $\Phi_k(\mathbf{r})$  είναι ορθογώνιες.
5. Υπολογίστε τα στοιχεία πίνακα της διπολικής ροπής  $\mathbf{p}_{100\ 210}$  και  $\mathbf{p}_{100\ 21\pm 1}$ .
6. Είναι τα μέτρα των  $\mathbf{p}_{100\ 210}$  και  $\mathbf{p}_{100\ 21\pm 1}$  ίσα;

Θεωρείστε δεδομένα

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

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

Γ) Ισχύει η παρακάτω έκφραση για το διάνυσμα θέσεως:

$$\mathbf{r} = \frac{r}{2} \sin\theta [(\hat{x} - i\hat{y}) e^{i\varphi} + (\hat{x} + i\hat{y}) e^{-i\varphi}] + r\cos\theta \hat{z}.$$