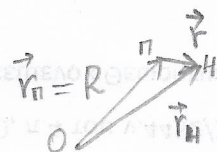


ΕΠΙΤΡΕΠΟΜΕΝΕΣ και ΑΠΑΓΟΡΕΥΜΕΝΕΣ ΟΠΤΙΚΕΣ ΜΕΤΑΒΑΣΕΙΣ

καθυστάτεις εντός του ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΕΩΣ ΔΙΠΟΛΟΥ

$$\vec{E} = \vec{E}_a \exp [i(\vec{k} \cdot \vec{r}_H - \omega t + \phi)] \Rightarrow \vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}$$

$$\vec{r}_H \approx \vec{R}$$



↓ ομογενείς, χρονικώς μεταβαλλόμενο

$$\left. \begin{aligned} \vec{E} &= -\vec{\nabla} V \\ dV &= \vec{\nabla} V \cdot d\vec{r} \end{aligned} \right\} dV = -\vec{E} \cdot d\vec{r} \Rightarrow V = -\vec{E} \cdot \vec{r} \Rightarrow$$

δυναμικό

$$U = e \vec{E} \cdot \vec{r} = -\vec{\Phi} \cdot \vec{E}$$

δυναμική ενέργεια

της διαταραχής

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

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

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

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

Εν τέλει όλα ανάγονται στη συμμετρία των ιδιοσυναρτήσεων των αδιατάκτων προβλημάτων:

\vec{r} περιττή συνάρτηση

ποιές $\Phi_k^+(\vec{r})$ άρτιες ή περιττές;

→ καθορίζεται το αν θα μηδενιστεί το $\vec{r}_{k'k}$ και άρα το $U_{\vec{E}k'k}(t)$

Αν $U_{\vec{E}k'k}(t) = 0 \Rightarrow$ η διαταραχή δεν αυξάνει τις καταστάσεις k' και k οπότε αν το ηλεκτρόνιο ήταν στην k δεν θα μεταβεί στην k' και αντίστροφα.

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

ΚΑΤΑ ΜΕΣΟ ΟΡΟ ΟΙ ΙΔΙΟΕΝΕΡΓΕΙΕΣ ΤΩΣ ΔΙΑΤΕΡΑΚΩΣ ΕΝΟΣΤΥΓΑΤΟΣ ΔΕΝ ΕΠΗΡΕΑΖΟΝΤΑΙ ΑΠΟ ΤΗ ΔΙΑΤΕΡΑΡΑΧΗ

$$\left. \begin{aligned} \hat{H} \Psi(\vec{r}) &= E \Psi(\vec{r}) \\ \hat{H} &= \hat{H}_0 + U_{\epsilon}(\vec{r}, t) \\ \Psi(\vec{r}) &= \sum_k g_k \Phi_k(\vec{r}) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left[\hat{H}_0 + U_{\epsilon}(\vec{r}, t) \right] \left[\sum_k g_k \Phi_k(\vec{r}) \right] = E \sum_k g_k \Phi_k(\vec{r})$$

Σημ $\int d^3r \Phi_k^*(\vec{r}) \dots$

$$\int d^3r \Phi_k^*(\vec{r}) \hat{H}_0 \sum_k g_k \Phi_k(\vec{r}) + \int d^3r \Phi_k^*(\vec{r}) U_{\epsilon}(\vec{r}, t) \sum_k g_k \Phi_k(\vec{r}) = \int d^3r \Phi_k^*(\vec{r}) E \sum_k g_k \Phi_k(\vec{r}) \Rightarrow$$

$$\sum_k g_k \int d^3r \Phi_k^*(\vec{r}) \hat{H}_0 \Phi_k(\vec{r}) + \sum_k g_k \int d^3r \Phi_k^*(\vec{r}) U_{\epsilon}(\vec{r}, t) \Phi_k(\vec{r}) = E \sum_k g_k \int d^3r \Phi_k^*(\vec{r}) \Phi_k(\vec{r}) \Rightarrow$$

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

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

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

$$U_{\epsilon k'k}(t) = e e^{-i\omega t} \vec{\epsilon} \cdot \vec{r}_{k'k}$$

Αν λάβουμε τη μέση χρονική τιμή τωσ $\langle U_{\epsilon k'k}(t) \rangle = 0$
 διότι $\langle e^{-i\omega t} \rangle = 0$

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

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

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

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

Δίνονται τα στοιμια τροχιακά του ατόμου H, των σελ. 112

- ① Να αποδειχθεί ότι η αλλαγή $\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = -\vec{r} \Rightarrow r' = r$
 r ακτινική απόσταση $r \in [0, +\infty)$ $\theta' = \pi - \theta$
 θ πολική γωνία $\theta \in [0, \pi]$ $\phi' = \pi + \phi$
 ϕ φιλμιακή γωνία $\phi \in [0, 2\pi)$

② Να αποδειχθεί ότι $\vec{r} = \frac{r}{2} \sin \theta [(x - iy) e^{i\phi} + (x + iy) e^{-i\phi}] + r \cos \theta \hat{z}$

③ Να ελεχθούν ως προς την σύμμετρία (άρτιος ή περιττός). Δικαιολόγηση

④ Να βρείτε πόσες και ποιές κυβικές επιφάνειες έχη τα κάθε στοιμια τροχιακά. Δικαιολόγηση.

⑤ Να γραχθή πίνακας δυνάμεις αδίας των σελ. 117 και να ελεχθεί αν ισχύουν οι κανόνες επιλογής $\Delta l = \pm 1, \Delta m = 0, \pm 1$.

⑥ Να συχυριθούν οι ισχύεις των όπτικων μεταβάσεων σε ηλίουσα της προσεγγίσεως διπόλου $1s \rightarrow 2p_z$ $1s \rightarrow 3p_z$

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

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

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

$$d^3r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

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

✿

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

$$\vec{r}_{152Pz} = (32\pi^2 a_0^6)^{-\frac{1}{2}} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi e^{-\frac{r}{a_0}} \frac{r}{a_0} \cos\theta e^{-\frac{r}{2a_0}} r \hat{e}_r$$

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

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

Σξστ
δισφ
ακτιν.εφ

$$\vec{r}_{152Pz} = (32\pi^2 a_0^6)^{-\frac{1}{2}} K a_0^4 \int_0^\infty d\mu \mu^4 e^{-\frac{3}{2}\mu} \quad \mu := \frac{r}{a_0}$$

το \hat{e}_r εξαπλώνεται
άνοιξε το θ, φ

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

$$\vec{r}_{153Pz} = \left(\frac{6561\pi^2 a_0^6}{2}\right)^{-\frac{1}{2}} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi \cos\theta \hat{e}_r e^{-\frac{r}{a_0}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{3a_0}} r$$

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

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

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

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

Άρα, $\frac{|\vec{r}_{152Pz}|}{|\vec{r}_{153Pz}|} = \left(\frac{6561\pi^2 a_0^6}{32\pi^2 a_0^6 \cdot 2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{I_1}{I_2} \approx \left(\frac{6561}{64}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{3.16}{12.81} \approx 2.5$

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

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

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

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

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

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

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

εξερ.
 διαφ.
 συνιστά
 1s

Άλλά $I_A(\mu) = I_B(\mu) = I(\mu)$

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

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

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

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

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

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

$$\left[\frac{\cos^3\theta}{3} - \cos\theta \right]_0^\pi$$

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

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

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

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

$$\frac{1}{3} \int_0^{2\pi} d\varphi \cos^2\varphi \hat{e}_x \pm \frac{i}{2} \int_0^{2\pi} d\varphi \sin(2\varphi) \hat{e}_x + \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\varphi \sin(2\varphi) \hat{e}_y \pm i \int_0^{2\pi} d\varphi \sin^2\varphi \hat{e}_y$$

$\int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1 + \cos(2\varphi)}{2} = \pi$ $\int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1 - \cos(2\varphi)}{2} = \pi$

"Αρα

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

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

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

"Αρα

$$\frac{|\vec{\Phi}_{100, 210}|}{|\vec{\Phi}_{100, 21\pm 1}|} = 1$$

δηλαδή οι μεταβάσεις $100 (1s) \leftrightarrow 210 (2p_z)$
 $100 (1s) \leftrightarrow 21\pm 1 (\sim 2p_x, 2p_y)$
 είναι εξίσου επιτρεπόμενες

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

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

$$I(\mu) = \int_0^\infty d\mu \mu^4 e^{-\frac{3\mu}{2}} = \left(\frac{3}{2}\right)^{-4} \frac{4!}{3^5} = \frac{2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 2^5}{3^5} = \frac{2^8}{3^4}$$

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

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

$$\vec{\Phi}_{100, 21\pm 1} = -e \vec{r}_{100, 21\pm 1} = -e \frac{a_0}{8\pi} \frac{4\pi}{3} (\hat{e}_x \pm i \hat{e}_y) \frac{2^8}{3^4} = -e a_0 \frac{2^7}{3^5} (\hat{e}_x \pm i \hat{e}_y)$$

I) Να αποδείξετε ότι η αντιστάση ενός άξονατος διόσεως $\vec{r} \rightarrow -\vec{r} \equiv \vec{r}'$ ισοδυναμεί
 στις σφαιρικές συστήματα με τις αντιστάσεις $r \rightarrow r$
 $\theta \rightarrow \pi - \theta$
 $\varphi \rightarrow \pi + \varphi$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Χωρίς βλάβη της γενιότητας θεωρούμε σημείο Σ στο 1ο όκταντοριο (ΣΧΗΜΑ), τότε
 $\theta \in [0, \pi/2]$ ή $\varphi \in [0, \pi/2]$

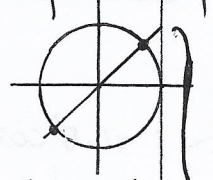
Η αντιστάση $\vec{r} \rightarrow -\vec{r} \equiv \vec{r}' \Leftrightarrow$

$$\begin{aligned} x' &= -x & \Leftrightarrow & r' \sin \theta' \cos \varphi' = -r \sin \theta \cos \varphi & (15) \\ y' &= -y & \Leftrightarrow & r' \sin \theta' \sin \varphi' = -r \sin \theta \sin \varphi & (16) \\ z' &= -z & \Leftrightarrow & r' \cos \theta' = -r \cos \theta & (17) \end{aligned}$$

(14) \Downarrow
 $r' = r$ (18)

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

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



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

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

$\Rightarrow \varphi' = \varphi$ ή $\varphi + \pi$
 αν φ ως $\varphi' = \varphi$ (19')

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

$\tan \theta' = \tan \theta$
 $\theta' = \theta + k\pi$
 $\theta', \theta \in [0, \pi]$ $\Rightarrow k = 0$
 ή $\theta' = \theta$ (2)

$\theta' = \pi - \theta$
 $\sin \theta' \cos \varphi' = -\sin \theta \cos \varphi$
 $\cos \varphi' = -\cos \varphi$
 $\sin \theta' \sin \varphi' = -\sin \theta \sin \varphi$
 $\sin \varphi' = -\sin \varphi$
 $\varphi' = \varphi + \pi$

Άρα $\varphi' = \varphi + \pi$ (19)

η.χ. (15) $\Rightarrow r' \sin \theta' \cos(\varphi + \pi) = -r \sin \theta \cos \varphi$
 $\xrightarrow{(19)}$
 $\xrightarrow{(18)}$ $\sin \theta' = \sin \theta$
 $\theta', \theta \in [0, \pi]$ $\Rightarrow \theta' = \pi - \theta$ (20)

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

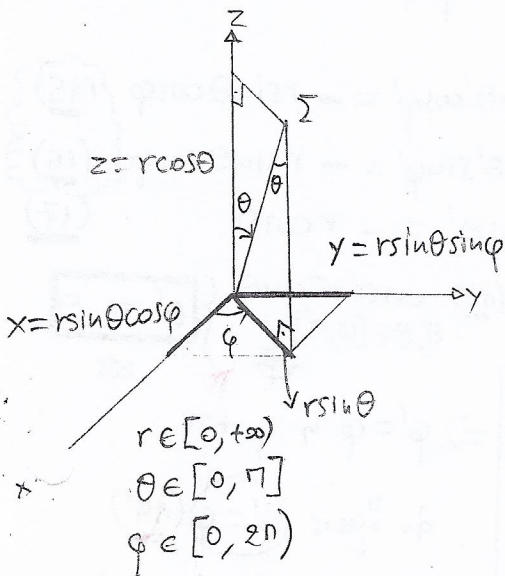
$\varphi' = \varphi \Rightarrow \sin \theta' = -\sin \theta$
 $\theta', \theta \in [0, \pi]$

$\Rightarrow \theta' = \theta = 0$
 $\theta' = \pi - \theta$
 $n = 0$
 Ατομία

ΑΣΚΗΣΗ 5

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = -\vec{r} \Rightarrow \begin{cases} r' = r \\ \theta' = \pi - \theta \\ \varphi' = \pi + \varphi \end{cases}$$

ΛΥΣΗ



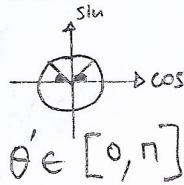
Χωρίς βλάβη της γενικότητας, θεωρούμε σημείο Σ στο 1ο οξυεδικό οπλο, οπότε $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}]$, $\varphi \in [0, \frac{\pi}{2}]$

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

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

$$\Rightarrow \begin{cases} \sin \theta' \cos \varphi' = -\sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta' \sin \varphi' = -\sin \theta \sin \varphi \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \tan \varphi' = +\tan \varphi \\ \varphi' \in [0, \pi) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \varphi' = \varphi \\ \varphi' = \pi + \varphi \end{cases}$$

$$\boxed{\cos \theta' = -\cos \theta}$$

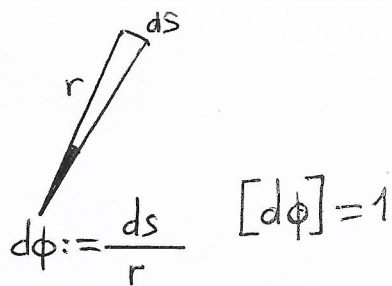


$$\Rightarrow \boxed{\theta' = \pi - \theta}$$

αν $\varphi' = \varphi$, από τις διαδοχικές δύο πρώτες προκλήσεις $\frac{\sin \theta' = -\sin \theta}{\cos \theta' = -\cos \theta} \Rightarrow$ ΑΤΟΠΟ

"Αρα $\boxed{\varphi' = \pi + \varphi}$

στοιχειώδης
έπιπεδο γωνία
 $d\phi$



r : επιβατική (μετακινούμενη, "περιορφεζόμενη") ακτίνα
 ds : στοιχειώδης γήκος τόξου

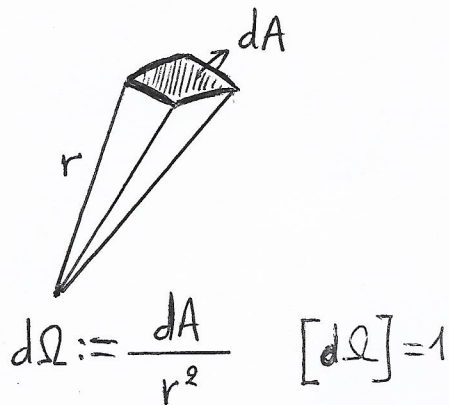
$$\Rightarrow ds = r d\phi \Rightarrow$$

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

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

$$\phi_{\text{ολ}} = \text{όλική έπιπεδο γωνία} = 2\pi$$

στοιχειώδης
στερεά γωνία
 $d\Omega$



r : επιβατική ακτίνα
 dA : στοιχειώδης επιφάνεια

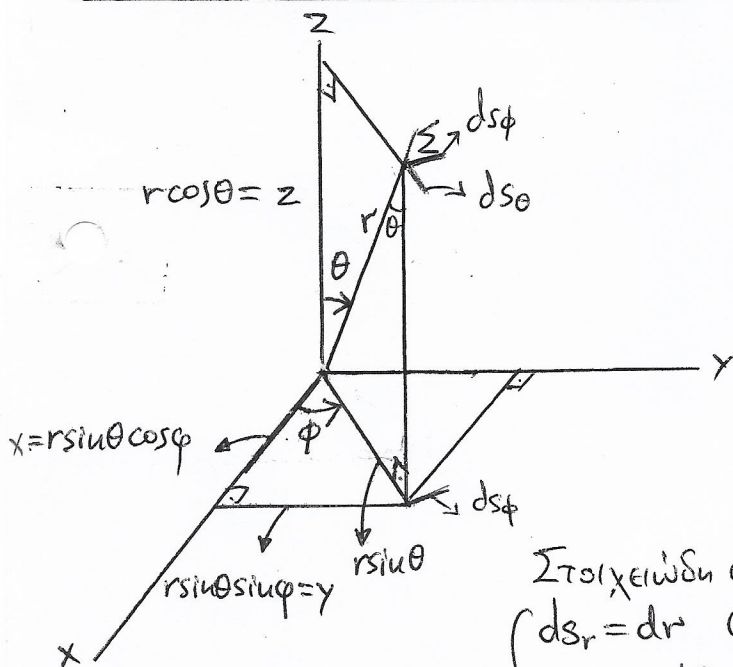
$$\Rightarrow dA = r^2 d\Omega \Rightarrow$$

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

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

$$\Omega_{\text{ολ}} = \text{όλική στερεά γωνία} = 4\pi$$

ΣΦΑΙΡΙΚΕΣ ΣΥΝΤΕΤΑΓΜΕΝΕΣ (r, θ, ϕ)



r : ακτινική απόσταση (radial distance)
 θ : πόλικη γωνία (polar angle)
 ϕ : άζιμουδιακή γωνία (azimuthal angle) or azimuth

Ή σχέση μεταξύ καρτεσιανών συντεταγμένων x, y, z σφαιρικών συντεταγμένων είναι

$$x = r \sin\theta \cos\phi \quad (1) \quad r \in [0, \infty) \quad (4)$$

$$y = r \sin\theta \sin\phi \quad (2) \quad \theta \in [0, \pi] \quad (5)$$

$$z = r \cos\theta \quad (3) \quad \phi \in [0, 2\pi) \quad (6)$$

Στοιχειώδη γήκη σε σφαιρικές συντεταγμένες

$$\left\{ \begin{array}{l} ds_r = dr \quad (7) \\ ds_\theta = r d\theta \quad (8) \\ ds_\phi = r \sin\theta d\phi \quad (9) \end{array} \right\} \Rightarrow dV = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi \quad (13)$$

στοιχειώδης όγκος

$$dA_{r\theta} = r dr d\theta \quad (10)$$

$$dA_{r\phi} = r \sin\theta dr d\phi \quad (11)$$

$$dA_{\theta\phi} = r^2 \sin\theta d\theta d\phi \quad (12)$$

στοιχειώδεις επιφάνειες

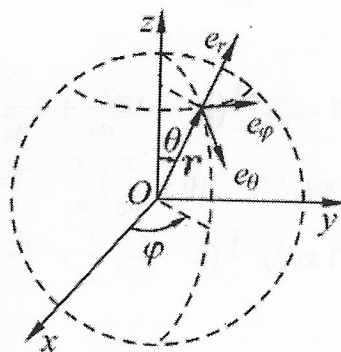
ΣΗΜΕΙΩΣΗ: $d\Omega_{\theta\phi} := \frac{dA_{\theta\phi}}{r^2} = \sin\theta d\theta d\phi \Rightarrow$

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin\theta d\theta d\phi = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta = 2\pi [-\cos\theta]_0^\pi = 2\pi \cdot 2$$

$$\Rightarrow \text{όλική στερεά γωνία } \Omega_{\text{ολ}} = 4\pi$$

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

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

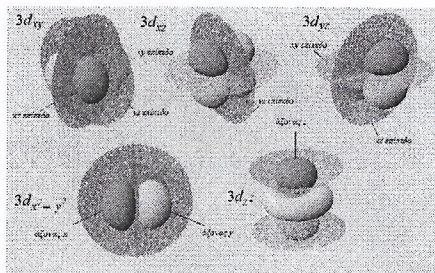
Συγκεκριμένα παρατίθενται παρακάτω τα ατομικά τροχιακά $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ [30].

$$\begin{aligned}
 \Psi_{100}(r, \theta, \varphi) &= (\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} & \Psi_{100} &:= 1s \\
 \Psi_{200}(r, \theta, \varphi) &= (32 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} & \Psi_{200} &:= 2s \\
 \Psi_{210}(r, \theta, \varphi) &= (32 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \frac{r}{a_0} \cos \theta e^{-\frac{r}{2a_0}} & \Psi_{210} &:= 2p_z \\
 \Psi_{21\pm 1}(r, \theta, \varphi) &= (64 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \frac{r}{a_0} \sin \theta e^{\pm i\varphi} e^{-\frac{r}{2a_0}} & (\Psi_{21+1} + \Psi_{21-1})/\sqrt{2} &:= 2p_x \\
 & & (\Psi_{21+1} - \Psi_{21-1})/(i\sqrt{2}) &:= 2p_y \\
 \Psi_{300}(r, \theta, \varphi) &= (19683 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-\frac{r}{3a_0}} & \Psi_{300} &:= 3s \\
 \Psi_{310}(r, \theta, \varphi) &= (6561 \pi a_0^3/2)^{-\frac{1}{2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{3a_0}} \cos \theta & \Psi_{310} &:= 3p_z \\
 \Psi_{31\pm 1}(r, \theta, \varphi) &= (6561 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} & (\Psi_{31+1} + \Psi_{31-1})/\sqrt{2} &:= 3p_x \\
 & & (\Psi_{31+1} - \Psi_{31-1})/(i\sqrt{2}) &:= 3p_y \\
 \Psi_{320}(r, \theta, \varphi) &= (39366 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} (3 \cos^2 \theta - 1) & \Psi_{320} &:= 3d_{z^2} \\
 \Psi_{32\pm 1}(r, \theta, \varphi) &= (6561 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi} & (\Psi_{32+1} + \Psi_{32-1})/\sqrt{2} &:= 3d_{xz} \\
 & & (\Psi_{32+1} - \Psi_{32-1})/(i\sqrt{2}) &:= 3d_{yz} \\
 \Psi_{32\pm 2}(r, \theta, \varphi) &= (26244 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi} & (\Psi_{32+2} + \Psi_{32-2})/\sqrt{2} &:= 3d_{x^2-y^2} \\
 & & (\Psi_{32+2} - \Psi_{32-2})/(i\sqrt{2}) &:= 3d_{xy}
 \end{aligned}$$

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 $e^{ia} = 1$.

	s ($l=0$)	p ($l=1$)			d ($l=2$)					f ($l=3$)						
	$m=0$	$m=0$	$m=\pm 1$		$m=0$	$m=\pm 1$		$m=\pm 2$		$m=0$	$m=\pm 1$		$m=\pm 3$			
	s	p_z	p_x	p_y	d_{z^2}	d_{xz}	d_{yz}	d_{xy}	$d_{x^2-y^2}$	f_z	f_{xz}	f_{yz}	f_{xyz}	$f_{x^2-y^2}$	$f_{x^2-3z^2}$	$f_{3x^2-5z^2}$
$n=1$	•															
$n=2$	•	••	••	••												
$n=3$	•	••	••	••	••	••	••	••	••							
$n=4$	•	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••
$n=5$	•	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••
$n=6$	•	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••
$n=7$	•	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••	••

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].