

-ΧΡΟΝΙΚΑ ΑΝΕΞΑΡΤΗΤΗ ΕΞΙΣΩΣΗ SCHRODINGER

- για μονοδιάστατο πρόβλημα:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E-V) \Psi \Rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi = E\Psi$$

- εε τρεις διαστάσεις:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi = E\Psi$$

όπου $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ και λαλασιανή

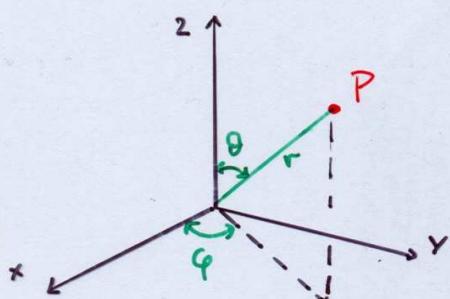
οπότε πιο κομψά η SWE γράφεται $\Rightarrow H\Psi = E\Psi$

$$\text{όπου } H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$$

- Εφαρμογή στην περίπτωση των ατόμων των υδρογόνων.

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E-V) = 0$$

Παρατηρούμε ότι στη περίπτωση αυτή: \therefore κεντρικές δυνάμεις | εθαίρικές
• εθαίρική συμμετρία συντηρείται



$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$\theta = \text{γεωδια} \equiv \cos^{-1} \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

$$\varphi = \text{αριμονδιακή} \equiv \tan^{-1} \frac{y}{x}$$

$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$

οπότε ∇^2 σε σφαιρικές συντεταγμένες: $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Lambda^2$

$$\text{όπου } \Lambda^2 = \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}$$

Οπότε η SWE παίρνει τη μορφή:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{t^2} (E-V) \Psi = 0 \quad (1)$$

Την $\Psi = \Psi(r, \theta, \varphi)$ την γράφουμε σαν $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) = R\Theta\Phi$

Τι εκφράζει ο κάθε όρος Ψ ;

\uparrow χωρισμός μεταβλητών

Αντικαθιστούμε την $\Psi = R\Theta\Phi$ στην SWE (1) και παρατηρούμε ότι

$$\frac{\partial \Psi}{\partial r} = \Theta \Phi \frac{\partial R}{\partial r} = \Theta \Phi \frac{dR}{dr}, \text{ ομοίως } \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2} = R \Phi \frac{d^2 \Theta}{d\theta^2} \text{ & } \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} = R \Theta \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2}$$

Οπότε "φεύγουν" οι μερικές παραγωγοί και στη (1) γράφεται:

$$\frac{\Theta \Phi}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{R \Phi}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{R \Theta}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} \right] + \frac{2m}{t^2} (E-V) R \Theta \Phi = 0$$

Διαιρούμε με $R\Theta\Phi$ και πολλαπλάζουμε με $r^2 \sin^2 \theta \Rightarrow$

$$\frac{\sin^2 \theta}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + \frac{2m}{t^2} r^2 \sin^2 \theta (E-V) = 0$$

\underbrace{A}_{Δ} \underbrace{B}_{Γ} $\underbrace{\Gamma}_{r}$ $\underbrace{\Delta}_{\Theta}$

Μπορώ να γράψω $A + B + \Delta = -\Gamma$ οπότε παραχρώ ότι το κάθε μέρος της εξιώσεως εξαρτάται από διαφορετική μεταβλητή όποτε η εξιώσων ή όχι είναι μόνο αν τα δύο μέρη ισούνται με για σταθερά

$$A + B + \Delta = \text{σταθερά} = -\Gamma \text{ εάν τις σταθερά την ονομάσω } m_\ell^2$$

$$\Rightarrow \boxed{-\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = m_\ell^2} \quad (2). \text{ Αντικαθιστώ την σταθερά και διαιρέω με } \sin^2 \theta \Rightarrow$$

$$\underbrace{\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right)}_{\Sigma T} + \frac{2mr^2}{t^2} (E-V) = \underbrace{\frac{m_\ell^2}{\sin^2 \theta}}_{Z} - \underbrace{\frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right)}_{2}$$

Εάν η ίδια παρατήρηση $\Rightarrow \Sigma T = \text{σταθερά} = 2$

Την νέα σταθερά $\equiv l(l+1)$

Παρατίθομε ότι η λύση της SWE σχετικά με την αρχή του φύλαξης και παραπέμπεται στη λύση γρίων επιμέρους διαφορικών

- $\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = m_\ell^2 \Rightarrow \Phi(\varphi) = A e^{im_\ell \varphi}$ όπου A : σταθερά ολοκληρώσων

Επειδή η Φ είναι μέρος της συνολικής κυριαρχούσας λύσης θα πρέπει να είναι μονοτίκης για κάθε διδούμενο σημείο του χώρου δηλ.

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) \text{ δηλ } A e^{im_\ell \varphi} = A e^{im_\ell (\varphi + 2\pi)} \Rightarrow$$

$$\text{με αναγκαστικά ακέραιος αριθμός} \Rightarrow m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

- Η εξίσωση $Z = l(l+1)$ διηλαδί

$$\frac{m_\ell^2}{\sin^2 \theta} - \frac{1}{\theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d\theta}{d\varphi} = l(l+1)$$

Μετά από πράξεις (Βλ. Τραχανάς Τόμος II σελ. 15) καταλήγουμε ότι θα πρέπει το l να είναι ΑΚΕΡΑΙΟΣ μεγαλύτερος - ίος του $|m_\ell|$ δηλ.

$$|m_\ell| \leq l \Rightarrow m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

- Η εξίσωση $\Sigma T = l(l+1)$ για την περιπτώση του Η μπορούμε να της γράψουμε

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{t^2} \left(\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r} + E \right) = l(l+1)$$

Περιέχει έναν όρο που αφορά στην ενέργεια E (η οποία θα πρέπει να είναι δερική) κατά τις διερμηνείες καταστάσεις:

$$E_\eta = - \frac{me^+}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \left(\frac{1}{\eta^2} \right) = - \frac{13.6}{\eta^2} (\text{eV}) = \frac{E_1}{\eta^2} \text{ en Bohr}$$

(πώς προκύπτει αυτό;)

Μια συνδική που πρέπει να ικανοποιείται για τα λύσουμε την εξίσωση $R(r)$ είναι ότι το η πρέπει να είναι μεγαλύτερο ίσο του $l+1$

$$\text{δηλ} \quad l = 0, 1, 2, \dots, (n-1) \quad \eta \geq l+1$$

Συμπεράσματα.

- Η $\Psi = Rme\Theta m_\ell \phi_m$ φήμε από πίνακες μή ακριβή μορφή
- ή $\Psi = Rme Y_e^{m_e}$ όπου $Y_e^{m_e}$ σφαιρική αρμονική
- Βρίσκουμε τη σχέση για την Ενέργεια
- μας "προέκυψαν" τρεις κβαντικοί αριθμοί
 - m_e : κύριος
 - l : τροχιακός κβαντικός
 - m_ℓ : τροχιακός μαγνητικός κβαντικός

Παραδείγμα: $\eta=1 \Rightarrow l=0 \quad m_\ell=0$

$$\begin{aligned} \text{Πίνακες} \quad \Phi(\varphi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \\ \Theta(\theta) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ R(r) &= \frac{2}{a^{3/2}} e^{-r/a_0} \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} \Rightarrow \Psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$$

(B.Z. Πίνακα F.2 σελ. 234
Serway - Moses - Moyer)

Παρατηρούμε ότι το γνωστό μήρος της Ψ δικαίει οι ($Y_e^{m_e}$) σφαιρικές αρμονικές προκύπτων για λύσεις των επιμήρων εξισώσεων στις οποίες ΔΕΝ υποστήχεται το διναρικό. Οπότε οι λύσεις αυτές είναι κοινές για ΟΛΑ τα ΚΕΝΤΡΙΚΑ ΔΥΝΑΜΙΚΑ. Οπότε στην πραγματικότητα το κύριο πρόβλημα είναι να δινει της ακτινικής εξισώσης

5.

Παρένθετη από Χρυσά

Η αναφορά στας κβαντικούς αριθμούς, σε δύοντας έχουν πάρει
μεδιάτα Χρυσοί, θυμίζει τις αναφορές σε φλοιούς και υποφλοιούς
πραγματικού, ο κύριος κβαντικούς αριθμούς σχετίζεται με τον
φλοιούς (επιβάδια)

για $n = 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \dots$
K L M N συμβολικούς φλοιούς

ενώ για $l = 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3$
s p d f συμβολικούς υποεπιβάδιους

Ο χαρακτηριστικός s (sharp), p (principal), d (diffuse), f (fundamental)
εκτείνονται μεταξύ των φασματικών κορυφών απειπούσια
επιπλέοντες καταστάσεις

①

- Μια κορινή μασί στοι κβαντικούς αριθμούς n , λ καίμε

- n : κύριος κβαντικός αριθμός

Το κβαντικό αριθμός αυτού του γνωρίζαμε στο πρώτο βήμα όταν αναφέραμε ότι την ενέργεια των δεσμών καταστάθηκε στο άποψη του H .

$$\text{Είχαμε δει ότι } n = \frac{E_1}{\gamma^2}.$$

Επίσης, οι Γύροις για την ενέργεια για δυαρικά δύνατον το απορέβαδο πηγαδί δυαρικού, των αρχικών ταξινομιών, καπ τις προσδιορίζαμε σαν δυάριτον του n .

- l : Τροχιακός κβαντικός αριθμός

Το κβαντικό αριθμός l τον συναντήσαμε όταν εξισώναμε το ακανικό μήπος (εξάρτημα χόνο από το r) με την σταθερά $l(l+1)$ δηλ.

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} (E_{\text{ακτ.}} - V) = l(l+1). \text{ Εαν πολύως με } \frac{R}{r^2} \text{ είω:$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{ακτ.}} - V) R = \frac{l(l+1)}{r^2} R \Rightarrow$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(E_{\text{ακτ.}} - V - \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) \right) \right] = 0$$

η $E_{\text{ακτ.}} = E_{\text{κινητ.}} + V = E_{\text{ακανικ.}} + E_{\text{τροχιακ.}} + V$. Παρατηρείται μία κατ' αρχήν αναγραμμή. Η εξίσωση των περιγράφεται την εξέτηση από r αρνητικήν όπου ήνωσε η Εργοχαράκη τη διάλυσην των εξόρτωσης και από τις άλλες συνεπαγόμενες.

Για να αρθεί μια αναγραμμή αυτή, δηλαδή να ισχουν εξέτηση μόνο από r θα πρέπει.

Γιατίς όποις της αρκετός να ισχύει: $\left[\frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{ακτ.}} + E_{\text{τροχ.}} + V - V - \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1)) \right]$

η $E_{\text{τροχ.}} = \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1)$. Ουσας γνωρίζουμε ότι $E_{\text{τροχ.}} = \frac{L^2}{2mr^2}$ οπότε

$$\Rightarrow L^2 = \hbar^2 (l(l+1)) \Rightarrow L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

και εγγυούνται το L παίρνει διακρίτες τιμές $= l = 0, 1, \dots, n-1$ προκύπτει ότι τό μέτρο των διανύσματος της στροφορμής L είναι ΚΒΑΝΤΙΣΜΕΝΟ.

(2)

- m_e : μαγνητικός κβαντικός αριθμός

Όπως είδαμε το μέτρο της τροχιακής επιρροής L είναι κβαντικό.

Το διάνυσμα της L είναι κάθετο στο επίπεδο κίνησης του σωρατιδίου και σδιορίζουμε με το κανόνα των Δεξιών χεριών ότι είναι "προς τα πάνω" ή "τα κάτω". Ο m_e συνδέεται με τις δύνατες τύπου της L_2 διπλαδιής.

Προβολής του διανύσματος της L στον αξονα z . Φυσικά, η διάκριση των να z δεν κρίβει κάποια ανισορροπία των χώρων ως προς τη διεύθυνση σημ. Εποδή, ομοστά απόρα έχουμε ηλεκτρόνια (διπλαδιή ηλεκτρικής) σε κίνηση, δημιουργείται "επωσερικό" μαγνητικό πεδίο, το οποίο αναγίνεται ως μηδεπιδρά με εξωσερικά μαγνητικά πεδία. Κατα σύβαση έχουμε αποδεχθεί τη διεύθυνση των εξωσερικών μαγνητικών πεδίων βρίσκεται κατά την z διεύθυνση.

$$\text{Χαρακτηριστικά: } L = r \times p \Rightarrow L_2 = x P_y - y P_x \quad (\text{Βλ. παρατηρη Γ, σελ. 557 σερ. Serway...})$$

Πώς είδαμε στώ προηγούμενα εξάπλινα τη "κλασική" ορφίν "ανακαδιογάτων" από τη σχέση $\hat{P} = -i\hbar \nabla$ και $P_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$, $P_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ και στή

φυσικές συντεταγμένες $\hat{L}_2 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}$. Εαν δράσουμε τις τελετές αυτές στη λαμβανομένην $\Psi = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) = R\Theta\left(\frac{1}{r_{2n}}\right) e^{im_e \varphi} \Theta^2 \cos^2 \theta$

$$\hat{L}_2 \Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial q} = -i\hbar \frac{R\Theta}{r_{2n}} \frac{\partial}{\partial \varphi} e^{im_e \varphi} = -i\hbar im_e \frac{R\Theta}{r_{2n}} e^{im_e \varphi} = \hbar m_e \Psi$$

$$\text{οπού οι βασικοί της } L_2 = m_e \hbar.$$

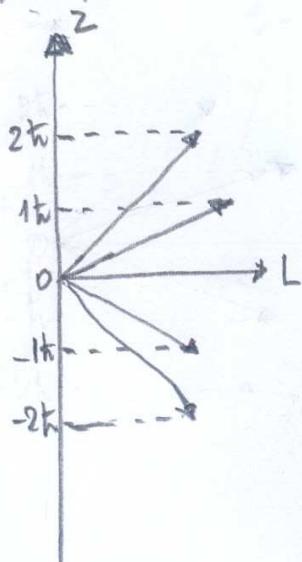
Εποδή τότε με ποινές διάκρισης της $m_e = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ συμπληρώνεται η οι προβολής της L στον αξονα z είναι αυστηρά προσδιορισμένες. Επομένως, διάνυσμα της L επιτρέπει να ξεχωρίσεις δικτύωσης, γέτοις είτε στη προβολή της στον αξονα z να ποινεί την m_e .

Συμπλήρωση: το διάνυσμα της L είναι "κβαντικό" (ο ίδιος δεν είναι έστιμος) και ως προς τη διεύθυνση του.

(3)

Παράδειγμα για $l=2$

Το μέρος της σφραγίδας θα είναι $L = t\sqrt{2(2+1)} = t\sqrt{6}$
οι διατάξεις κατεύθυνσης στο χώρο δια πέραν της οποίας θα είναι L_2 και να έχει
την $0, \pm t, \pm 2t$

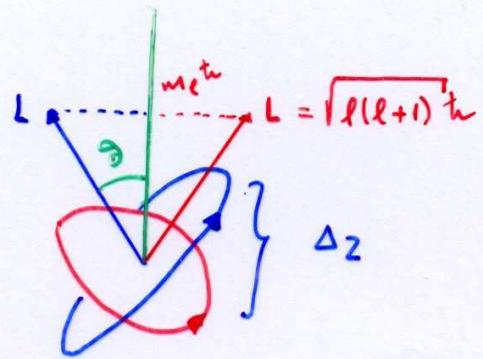


η σφραγίδα L με την άξονα z διέταν
καθε φυράση την οξιά:

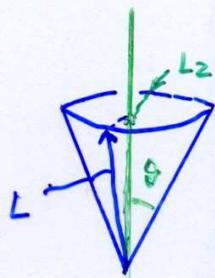
$$\cos \theta = \frac{L_2}{L} = \frac{me}{\sqrt{l(l+1)}}$$

Ti γίνεται όπου μεταξύ L_x και L_y ;

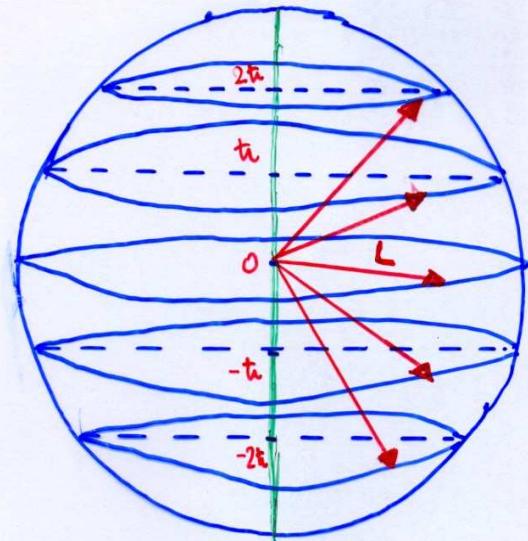
Αν η L ήταν αυστηρά καθορισμένη στο χώρο, διαδικασίες L_2, L_y, L_x θα είχαν
αυστηρά προσδιορισμένες τιμές, τόσο ότι πρωτίσταν οτι το μέγεθος της L ήταν
τηλεορατικό σε ένα επίπεδο x, y . Εάν όμως κινήται σε επίπεδο x, y αυτό
σημαίνει ότι η σφραγίδα θα προστίθεται σε προστίθετη άξονα z στην μέση. Οπότε με βάση
σημείων οι μεταβλητές που προστίθενται στη σφραγίδα θα είναι μόνο L_2 και θ . Όμως η ποσότητα
της αγκάνας απροσδιορίζεται στην A_{P_2} θα είναι μόνο Δz . Όμως η ποσότητα
 P_2 δεν έχει χαρακτηριστεί ποσότητα μεταβλητή. Τηρούμενη ωστε Δz να είναι
ποσότητα $\Delta z = 0$, δεν μπορούμε να τη σημειώσουμε κίνηση την μετατροπής
σε διαφορετικές μεταβλητές $\Delta z \neq 0$. (οπωρά)



για διαφορετικά επίπεδα



Η διεύρυνση της L μεταβάλλεται συνεχώς με αποτέλεσμα
οι μήκες των L_x, L_y να είναι μηδέν, παρου $L_z = m_l t_n$



- Ηλεκτρονιακή πυκνότητα πιθανότητας

Ερωτας προσδιορίστηκε την Ψ για το ατόμο του H, μπορούμε να προχωρήσουμε στον υπολογισμό της πυκνότητας πιθανότητας μέσω της $|\Psi|^2$ και είναι χαρακτηριστικό οι η πυκνότητα πιθανότητας είναι ανεξάρτητη από το χρόνο και μεταβάλλεται από συρροή σε συμπλ.: Όποτε δεύτερη $|\Psi|^2 = |R_{nl}|^2 |\Theta_{lme}|^2 |\Phi_{me}|^2$

Ας αριθμήσουμε την συνιστώντα των επιγείων όπερων

- $|\Phi_{me}|^2$

$$|\Phi_{me}|^2 = \phi^* \phi = A^2 e^{-im\phi} e^{im\phi} = A^2 e^0 = A^2 \text{ διαδικασία σε ειρωνεία}$$

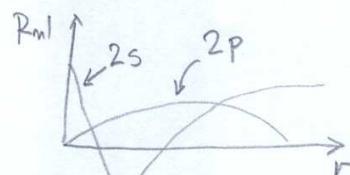
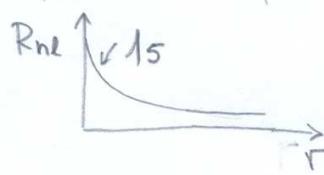
e^- είναι αντίστροφη σχετικά με το ϕ .

- $|R_{nl}|^2$

Η ροφή των R για τις διάφορα n και l διδέρχεται σε πίνακες (

$$\text{Για την περίπτωση του H } n = R_{10} = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} \quad a_0: \text{ακίνητη βάση}$$

Η μεταβολή των R_{nl} με την r ενδεικτικά είναι



Παρατηρούμε ότι οι s ($l=0$) έχουν μηδέποτε στο πυρήνα (ταύτα με την στροφορμή)

- $|\Theta_{lme}|^2$

Μεταβάλλονται μετατης γενιας για στατικά l , εκτός όταν $l=m_l=0$ οποτε (Βλ. πίνακα Βίβλου) παίρνουν σταθερή την ίδια την είδη πρόσθετης διαφύνωσης γιατί και το s ($l=0$) αναποτελεί σε σφαίρα. Οταν όμως ισχύει $l=1$, $m_l=0$ τότε

$$\Theta_{10} = \frac{\sqrt{6}}{2} \cos \theta \Rightarrow |\Theta_{10}|^2 = \frac{6}{4} \cos^2 \theta \Rightarrow \lambda_0 \text{ βοι. Ετοι με τικά διαφοροποιείται για τη διάφορη } l, m_l.$$

⇒ Όποτε μετατης πυκνότητα πιθανότητας (=η πιθανότητα της e^- να βρεθεί σε στοιχειώδη άγκο dV) διαδικασία της $|\Psi|^2 dV$ ήπομνη $dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$ θα γίνει:

$$P(r)dr = r^2 |R|^2 dr \int_0^\pi |\Theta|^2 \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} |\Phi|^2 d\phi = \\ = r^2 |R|^2 dr$$

Η συνολική εικόνα $P(r)$ διδέται παρακάτω

R_{nl}

$$R_{10} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2 e^{-Zr/a_0}$$

για υδρογόνο Z=1: R₁₀ = $\frac{2}{a^{3/2}} e^{-r/a_0}$

$$R_{20} = \left(\frac{2}{2a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-2r/2a_0}$$

$$R_{21} = \left(\frac{2}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{\sqrt{3}a_0}\right) e^{-2r/2a_0}$$

:

Y_l^{me}(θ, φ) \rightarrow σφαιρικές αρμονικές

$$Y_0^0 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

$$Y_1^0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cdot \cos\theta$$

$$Y_1^{\pm 1} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi}$$

:

Οι σφαιρικές αρμονικές αναφέρονται στο γινόμενο Θ(θ)Φ(φ)

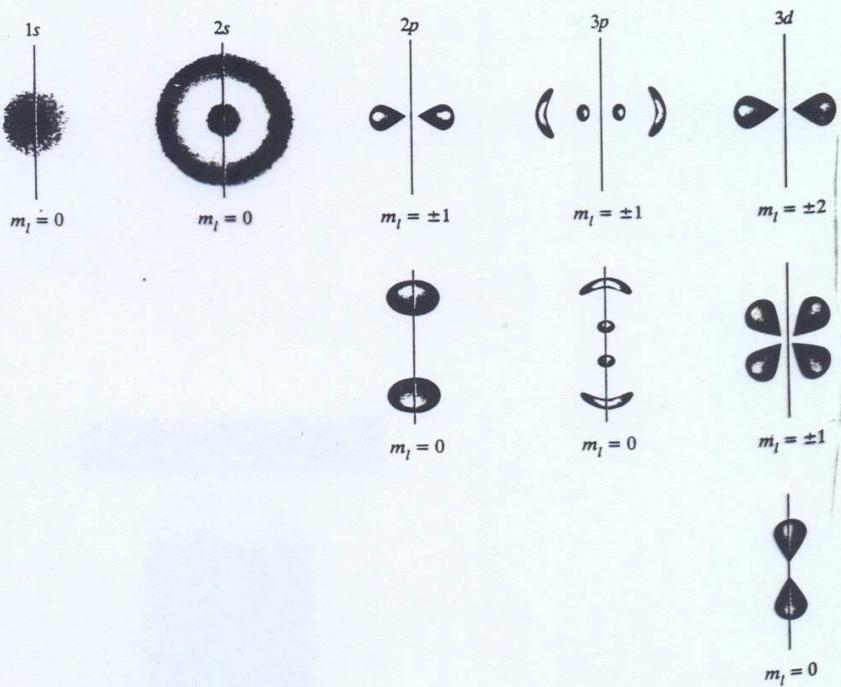
προκύπτουν δηλαδή ως ρ²nis

$$\Theta_{00} \Phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

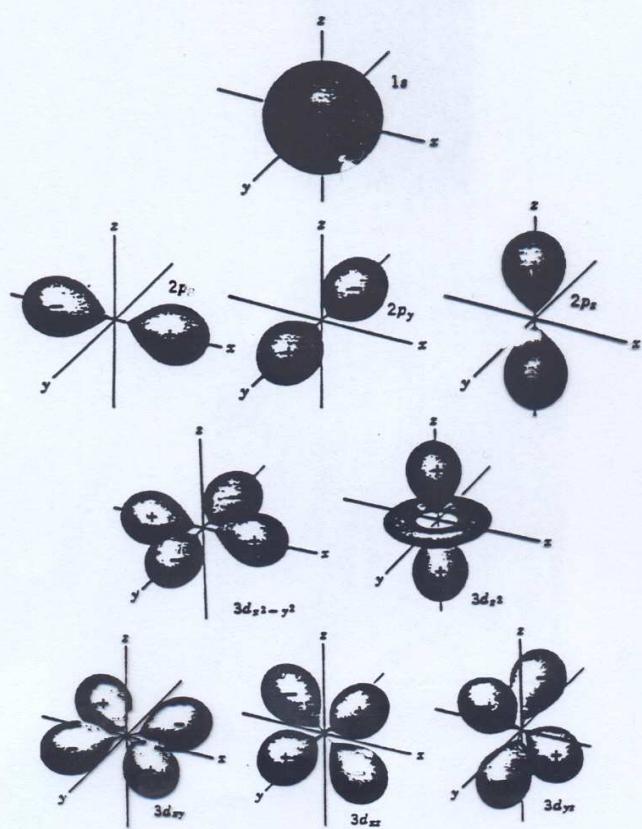
Το Φ₀ για την ακείβηση
η κανονικοποίηση των A²

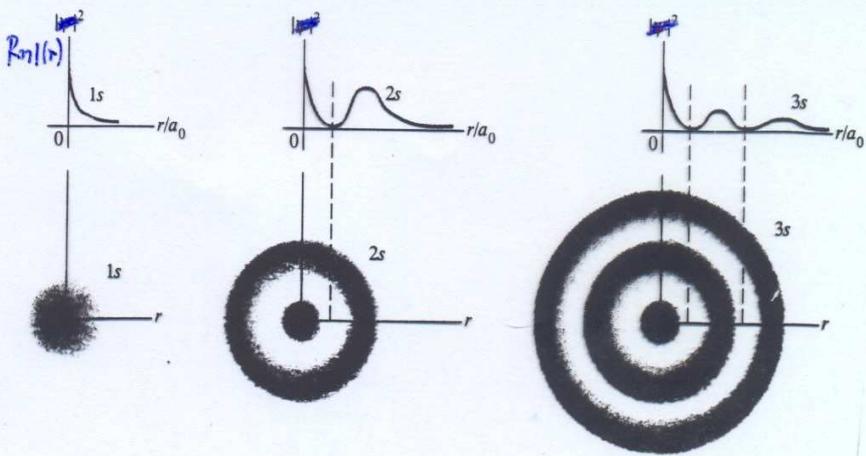
$$\Theta_{10} \Phi_0 = \frac{\sqrt{6}}{2} \cos\theta \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cdot \cos\theta$$

43-4 Σχήματα μεσημβρινών ($\phi = 0$) διατομών τρισδιάστατων (r, θ, ϕ) κατανομών πιθανότητας για μερικές από τις απλούστερες κβαντικές καταστάσεις του ατόμου του υδρογόνου.

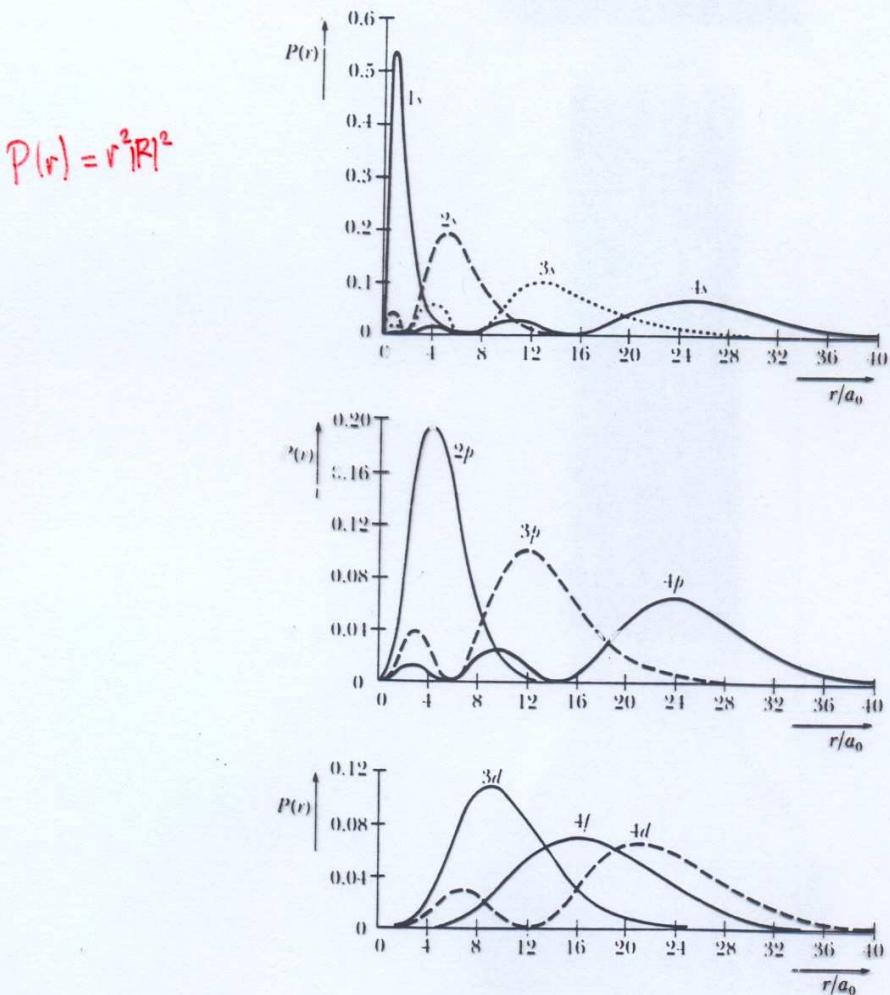


internet: wulff.mit.edu/orbs/





43.3 Ακτινικές κατανομές πιθανότητας για τις σφαιρικά συμμετρικές κυματοσυναρτήσεις $1s$, $2s$ και $3s$ του ατόμου του υδρογόνου, με τις αντίστοιχα πυκνότητα τους σε τόνους του μπλε.



• $n-l$ μήκος

- max πιθανότητα στο $n-1$ peak. δηλ. στο λιγότερο μέρος για $l=0$
- πεπραγμένη πιθανότητα να βρεθεί κοντά στον πυρήνα

Σχήμα 42.8 Η ακτινική πυκνότητα πιθανότητας συναρτήσει τής r/a_0 για διάφορες καταστάσεις τού ατόμου του υδρογόνου. (Από E. U. Condon & G. H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge, Cambridge University Press, 1953).

- Περί της ακτίνας του ατόμου του H.

Μετά τὰ άσαειναγχ για την πικνότητα πιθανότητα ειρεψ του e^- είναι φανέρω δια τόσο η έννοια της τροχιάς όσο και αυτη της ακτίνας του ατόμου δεν έχουν τη κλασική έννοια. Την έννοια της ακτίνας την ορίζουμε όταν την απόσταση από τον πυρήνα στην οποία η τυχί της κυματοσυγάρτησης του ηλεκτρονίου "πέφτει" στο $1/e$ ($= \frac{1}{2,7}$) της αρχικής της τιμής. Εαν κάνουμε πράξη για την βασική κατάσταση ($n=1, l=0$) βρίσκουμε ότι η "ακτίνα" $r = \frac{t_0^2}{me^2} \approx 0,5\text{ Å}$ = αριθμητική ακτίνα Bohr.

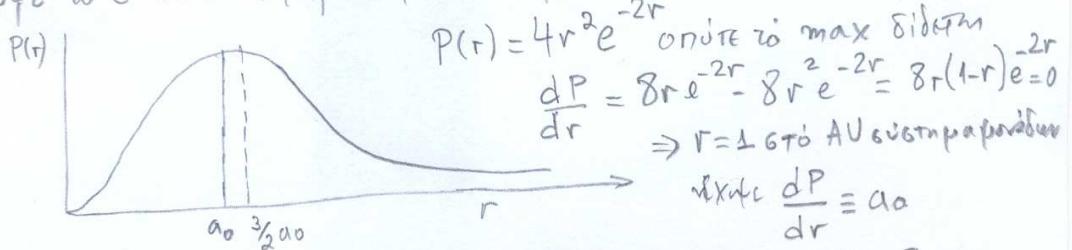
Όφελος χρειάζεται προσοχή: Η μίση απόσταση του e^- από τον πυρήνα, υπολογίζεται:

$$\langle r \rangle = \int \psi^* \psi dV = \int_0^\infty r |\psi|^2 4\pi r^2 dr = \int_0^\infty r \left(\frac{1}{\pi} e^{-r}\right)^2 4\pi r^2 dr = 4 \int_0^\infty r^3 e^{-2r} dr =$$

$$= 4 \frac{3!}{2^4} = \frac{3}{2} a_0$$

Ανταλλή: $\langle r \rangle \approx 0,75\text{ Å}$ ήσοι μεγαλύτερη από την αριθμητική ακτίνα. (υπενδύεται ότι ο υπολογισμός αφορά την βασική κατάσταση)

Η πιθανότητη οφελούμενης της "ακτίνας" προκύπτει ψιωστικής πικνότητας πιθανότητας: $P(r) = |\psi|^2 4\pi r^2 = 4r^2 e^{-2r}$. Η πιθανότητα αυτή μειώνεται πιθανότητα να βρούμε το e^- σε ένα σφαιρικό φλοιό αυθεντικό σε r και $r+dr$.



Η μεγάλητη την ανωτέρω αίνη η διαπίστωση ότι βρίσκεται e^- μέσα γιατί "όπρο του ατόμου" (δηλ. σε σφαιρικά με $R=a_0$) είναι μεγαλύτερη από δημιουργική αίνη. Πρέπει να πιστανθεί εντός της "όργου" υπόλογητη $P=32,3\%$ (Β). Τραχανάς τη σφαιρική αίνη. Πρέπει να πιστανθεί εντός της "όργου" υπόλογητη $P=32,3\%$ (Β). Τραχανάς τη σφαιρική αίνη.

Επομένως το ατόμο είναι ΜΕΓΑΛΥΤΕΡΟ από τη προκατατυπώση της διεύρυνσης $R=a_0$. Υπολογίζεται ότι 94% της πιθανότητας βρέθηκε τον ο- "καλύτερη" από μια σφαιρά $R=3a_0$.

Προφανώς η παρατήρηση ότι ο σχέσης $P(r) = \left(\frac{1}{\pi r^3} e^{-2r}\right)^2 = \frac{1}{\pi} e^{-2r}$ προβλέπει ότι καθίν

απομακρύνομεστραποτονπυρήνα (δηλ. απότομο r) τη πιθανότητα φθίνει γρήγορα.

Αυτό είναι σωστό. Όφελος αναγερόμεστρετη πιθανότητα ειρεψ σε σφαιρικό φλοιό.

Επει το ρεύματα μετώπων λαμβάνει e^{-2r} ταυτόχρονα ΑΥΞΑΝΕΙ ο ογκός, οπότε
το θα αντιτίθεται στην πιθανότητα ειρεψ.

Τροχιακή Διπολική μαγνητική ροπή. (κλασσική)

①

Ενα είναι κινείται σε κυκλική τροχιά ακύρως ή με γωνιακή ταχύτητα ω

$$\Rightarrow i = e \left(\frac{\omega}{2\pi} \right) \text{ SI} \Rightarrow \text{Διμορφή μαγνητικού πεδίου } B \text{ ομαδού με έκεινο που}$$

θα δημιουργούντες ένα φανελωτικό μαγνητικό δίπολο βρισκόμενο στο κέντρο του κυκλικού αγωγού και προσανατολισμένο κάθετα προς το επίπεδο των αγωγών

$$\mu_L = iA = e \left(\frac{\omega}{2\pi} \right) \pi r^2 = \frac{1}{2} e \omega r^2 = \frac{1}{2} e u r$$

$$\Rightarrow \mu_L = \frac{e}{2m} (m u r) \quad \left. \begin{array}{l} \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m \vec{r} \times \vec{u} \\ \text{μέτρο } L = m u r \end{array} \right\} \Rightarrow \mu_L = \frac{e}{2m} L$$

επεδή ομως το ρεύμα αντίθετη φορά κινείται e^-

$$\Rightarrow \mu_L = - \frac{e}{2m} L$$

Διλαδή τα μ_L, L αντιπαρότινα (Τι διαφέρει για θετικά φορεία;)

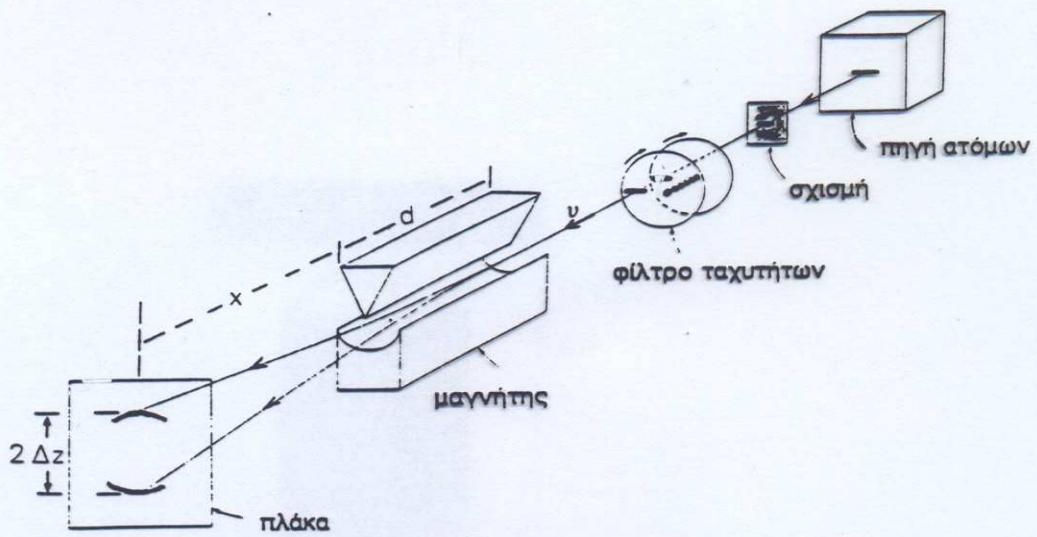
Παρατηρούμε ότι $\frac{\mu_L}{L} = ct \Rightarrow \text{γερμαγνητικός ζόφος}$

$$\frac{\mu_L}{L} = - \frac{e}{2m} = - \frac{e \tau_h}{2m \tau_h} = \frac{\mu_B}{\tau_h} g_L \quad \mu_B: \text{μαγνητόμ Bohr} (9.27 \times 10^{-24} \text{ J/T})$$

g : Τροχιακός παραγόντας g ($g=1$)

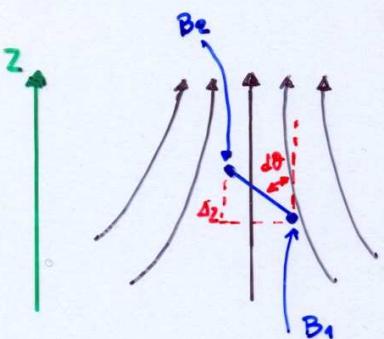
[Παρατορείτε ότι σήμερα και το σπίριν η διπολική μαγνητική ροπή $\mu = \mu_L + \mu_S$]

$$\mu = - \frac{e}{2m} (g_s S + g_L L) = - \frac{e}{2m} (2S + L) \quad \text{γιατί } g_s = 2, \dots \quad \left. \begin{array}{l} \Leftarrow \text{δια το χεναδίγιο} \\ \text{επί Zeeman} \end{array} \right]$$



Σχήμα 7. Πειραματική διάταξη για τη μελέτη του φαινομένου Stern-Gerlach. Η διάταξη είναι μέσα σε σωλήνα υπό άντληση (κενό). Στην διάταξη Stern-Gerlach ο μαγνήτης είχε μήκος 6 cm η δε απόσταση μεταξύ των πόλων, 2 mm. Δύο ίχνη παρουσιάζονται για τα άτομα του αργύρου, του χαλκού, του χρυσού, του νατρίου, του καλίου, του υδρογόνου, και γενικότερα στα άτομα που έχουν ένα ηλεκτρόνιο σθένους σε τροχιακό s. Σε άλλα άτομα, ανάλογα με την ηλεκτρονιακή τους διάταξη, εμφανίζονται τρία ίχνη ή τέσσερα κ.λπ. ή μόνο ένα ίχνος (=μηδέν απόκλιση).

Stern - Gerlach.



Κλασσικά:

e^- σε κυκλική τροχιά \Rightarrow ρεύμα $i = \frac{e\omega}{2\pi} \Rightarrow$ μαγνητικό πεδίο που θα αλλιαζεται με τη γραμμητικό

$$\mu = qd$$

$$\text{Το γραμμητικό πεδίο αναπολογείται } S \propto \frac{\partial B}{\partial z} \propto \frac{\partial B}{\partial y} \ll \frac{\partial B}{\partial z}$$

Για το γυαλιά προσανατολισμένο δίπολο:

$$F = qB_2 - qB_1 \quad \left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} \Rightarrow F = q \left(\frac{dB}{dz} \right) \Delta z \quad \left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} \Rightarrow F = qd \left(\frac{dB}{dz} \right) \cos\theta \Rightarrow$$

$$\Delta z = d \cos\theta$$

$$\Rightarrow F = \mu \left(\frac{dB}{dz} \right) \cos\theta$$

Αρα αφού τα δύο πεδία έχουν γυαλιά προσανατολισμένα, το $\cos\theta$ παίρνει άλλες τις τιμές \Rightarrow 180 κατανομή στο χώρο \Rightarrow Αδυναμία εργασίας

Μήπως ομως η ιστορορρήση (πώς είδαμε στην είναι κβαντική στο χώρο) μπορεί να δώσει κάποια έξιγμη;

$$\mu = iA = e \frac{\omega}{2\pi} \cdot \pi r^2 = \frac{1}{2} e \nu r = \frac{e}{2m} (mv) = \frac{e}{2m} L$$

Πειραμά Philips-Taylor με H ($n=1, l=0 \Rightarrow m_l=0 \Rightarrow L_z=m_e t$) αλλά πάλι δύο συνιστώσες !!!

Οπότε χρειάζοταν κάτι ΚΑΙΝΟΥΡΓΙΟ \Rightarrow ΣΠΙΝ

Goudsmit & Uhlenbeck 1925 \Rightarrow σπιν

$$S = \sqrt{s(s+1)} \hbar, \quad s: \text{κβαντικός αριθμός σπιν} = \frac{1}{2} \text{ μα } e^-$$

$$\text{οπότε για } e^-: S = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

$$S_z = m_s \hbar$$

$m_s: \text{για } e^- \begin{cases} +\frac{1}{2} \text{ σπιν πάνω} \\ -\frac{1}{2} \text{ σπιν κάτω} \end{cases}$

P. Dirac (1929): Σκετσική κβαντομηχανική

$$E = \sqrt{m_e c^4 + p^2 c^2} + V \Rightarrow \text{για ένα σωμάτιο με την κανονική σύρεση δύνας για } e^- \text{ πρέπει να υπάρχει μια επιπλέον εργαστική δύνατος}$$

$$\text{όπου } \mu_L \text{ ηώρα έχει και μαγνητική πολικότητα: } \mu_s = \pm \frac{e\hbar}{2m} S \quad \& \quad \mu_{Lz} = \pm \frac{e\hbar}{2m} \text{ μεταξύ } \mu_s \text{ και } \mu_{Lz} = \hbar b$$

Σε analogia με τη τροχιακή διπολική μαγνητική ροπή μ_L

$$\mu_L = (\mu_B/t_0) g_L L = -\frac{e}{2m} g_L L$$

για την επίν μαγνητική διπολική ροπή λέχεται:

$$\mu_S = -\frac{e}{2m} g_S S$$

επί περιπτώσης όμως αυτή ο παράγοντας $g_S = 2, \dots$

η τιμή $g_S = 2$ είναι απαραίτητη για να εξηγηθεί το μήνυστα σαν κλίσης
επί περιφέρεια Stern-Gerlach.

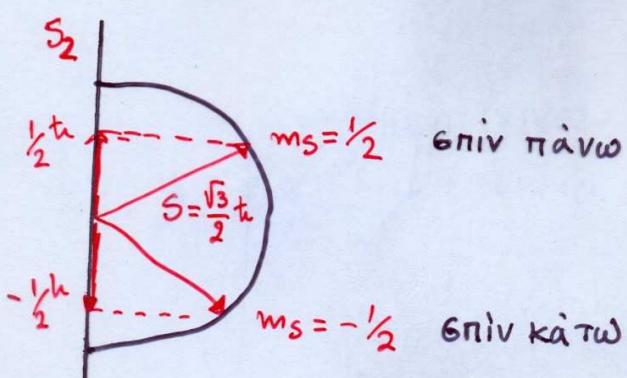
Η πιο ακριβής τιμή $g = 2,00232$ δεν προβλέπεται αύτη από Dirac και
αποδίδεται στην αρχή/επί των e^- με το "κενό" (QED, R. Feynman)

Οπότε η ολική μαγνητική ροπή

$$\mu = \mu_L + \mu_S = -\frac{e}{2m} (g_L L + g_S S) = -\frac{e}{2m} (L + g_S S)$$

ζ το βιβλίο σας μ_0

ζ απλοποιάραι τὸν δικτη.



• Υπάρχει κλασικό ανάλογο για την επίν;

⇒ Κβαντική οντότητα

⇒ Ένα σωματίδιο έχει επίν σ' όταν το πέρασε μέσα διεγυρίζεται
σωματίδιων μέσα όπου μεσακενή Stern-Gerlach δίνει $2s+1$ ιχνη.

ΟΛΙΚΗ ΣΤΡΟΦΟΡΜΗ.

Διαπίστωσε την ύπαρχη δύο είδη στροφορμής (spin + τροχιάς)

Αυτό οδηγεί αναπόφευκτα στην αλλιεπίδραση τους.

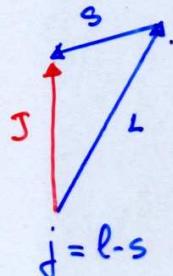
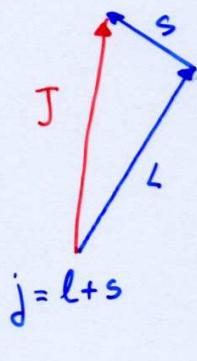
Αλλιεπίδραση spin - τροχιάς (S·L)

Οι δύο αυτές στροφορμής μπορούν να συγχέουν συμβόντας σε ένα νέο μέρος: ολική στροφορμή (J) με το αντίστοιχο m_J

$$J = l+s = l \pm \frac{1}{2}$$

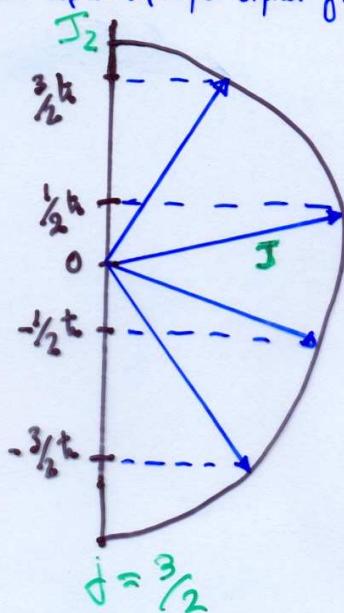
$$m_J = -J, \dots, +J$$

$$J = \sqrt{j(j+1)} \hbar$$



Για ένα e^- $j = l \pm \frac{1}{2} \rightarrow m_j \rightarrow (2j+1)$ ζιμές συντοπούνται $2l+1$ στερεούς τύπους

Δηλαδή άριθμος πρώτον ζιμών για το m_J σε ανίθεον με το m_s .



$$\cos \theta = \frac{m_J}{\sqrt{j(j+1)}}$$

Είδαμε ότι στο πάρα $S-G$ οι δύναμη

$$F = \mu \frac{dB}{dz} \cos\theta = (\mu_L + \mu_S) \frac{dB}{dz} \cos\theta = \mu_J \frac{dB}{dz} \cos\theta = \mu_J \frac{dB}{dz} = g_J \mu_B \frac{dB}{dz}$$

Ανάτιν οχισμούς μπορούμε να συμπληρώσουμε ώστε να έχουμε διαχωρισθεί ανάλογα με τις διαφορές γύρως του μή βαρεύει $(2j+1)$ δέσμες.

[Στις πιείτων των ισορροκτικών παραγάγων $S-G$ χρησιμοποιήθηκαν άραγε Αρρήνων όπως οι δομή $---$ 5s. Δικλιδή οδες οι υποεργαζόμενες κληρονομιές και ίσα είναι $5s \Rightarrow l=0$. Άπαντα τό $\mu = \mu_L + \mu_S$ μίλιει πάνω το μ_S οποτε;

$$F = \mu_{S2} \frac{dB}{dz} = \mu_B g_S m_S \frac{dB}{dz}, \quad \mu_B = \text{μαγνητικό Bohr}$$

Εάν Δz ή ανίσιαν μεταξύ των δύο δέσμων στο πέταγμα 207c

$$\left. \begin{array}{l} \Delta z = \frac{1}{2} a_2 t^2 \\ F = a_2 m \\ \Delta y = vt \end{array} \right\} \left. \begin{array}{l} \Delta z = \frac{1}{2} \frac{F}{m} \left(\frac{\Delta y}{v} \right)^2 \\ F = \mu_B g_S m_S \frac{dB}{dz} \end{array} \right\} \Rightarrow \Delta z = \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta y}{v} \right)^2 \mu_B g_S m_S \frac{dB}{dz}$$

Εάν είναι γραμμή η βαθύτα
μεταξύ των μαγνητικών μαζών
κατά ζ και γνωρίζουμε το
"χρήσιμο πλήν" της απόταξης
δέσμων, μπορούμε να υποληφθούμε
την αλλαγή της μεταξύ των
δέσμων από πάνω