

# ΣΥΓΧΡΟΝΗ ΦΥΣΙΚΗ

## ΕΝΟΤΗΤΑ 6

Τα Μονοηλεκτρονιακά άτομα στα πλαίσια  
της σύγχρονης Κβαντομηχανικής

Έκδοση 2023

© ΔΗΜΗΤΡΙΟΣ ΣΚΑΡΛΑΤΟΣ

## I. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

► Έως τώρα μελετήθηκαν δύο πρότυπα για την περιγραφή των μονοηλεκτρονιακών ατόμων:

**A) Το πρότυπο του Bohr (1913)** κατά το οποίο το μοναδικό ηλεκτρόνιο του ατόμου περιστρέφεται σε κυκλικές επιτρεπόμενες τροχιές γύρω από τον πυρήνα.

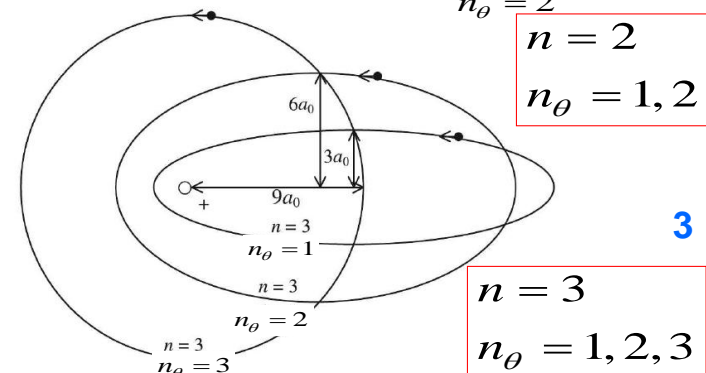
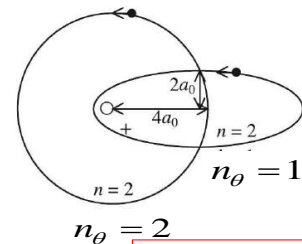
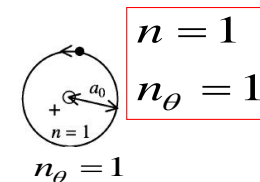
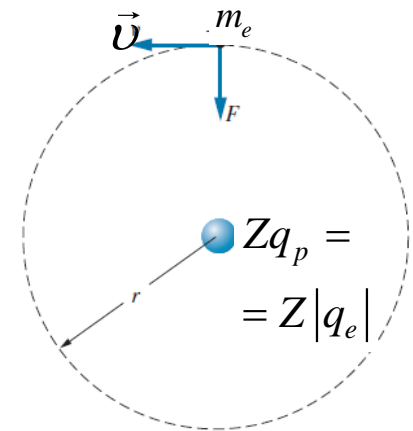
Οι επιτρεπόμενες τροχιές επιβάλλονται από την απαίτηση της κβαντισμένης στροφορμής του ηλεκτρονίου. Κινούμενο σε αυτές το ηλεκτρόνιο δεν ακτινοβολεί και έτσι εξασφαλίζεται η σταθερότητα του ατόμου. Η ενέργεια του είναι κβαντισμένη και καθορίζεται από έναν κβαντικό αριθμό:

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 q_e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 n^2 \hbar^2} = -\frac{Z^2 m_e q_e^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

**B) Το πρότυπο του Sommerfeld (1916)** κατά το οποίο το Μοναδικό ηλεκτρόνιο του ατόμου μπορεί να περιστρέφεται τόσο σε κυκλικές όσο και σε ελλειπτικές επιτρεπόμενες τροχιές γύρω από τον πυρήνα. Η ενέργεια του είναι κβαντισμένη και καθορίζεται από δύο κβαντικούς αριθμούς:

$$E_n = -\frac{Z^2 m_e q_e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 (n_r + n_\theta)^2 \hbar^2}, \quad n_r + n_\theta = n = 1, 2, 3, \dots$$

όπου  $n_\theta = 1, 2, \dots, n$  (ανάδειξη εκφυλισμού)

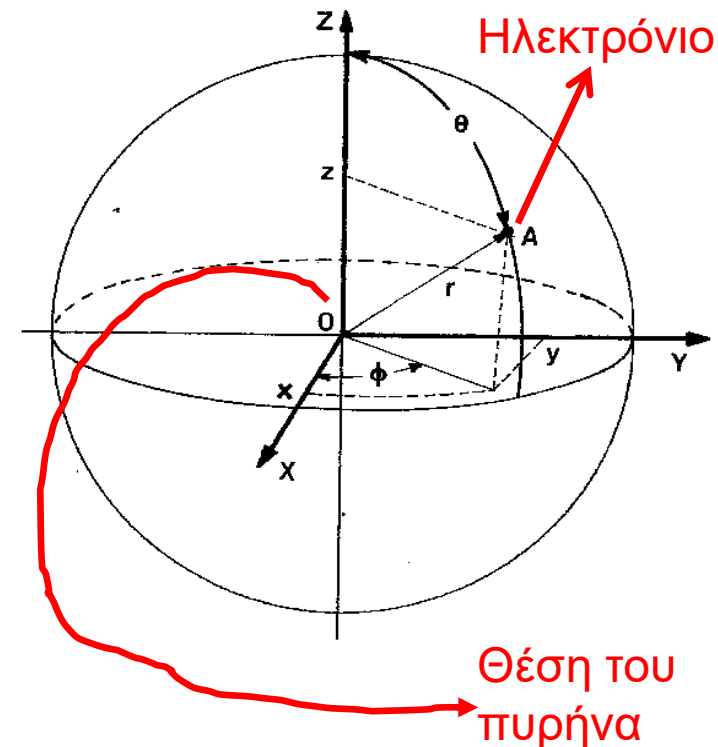


► Στην ενότητα αυτή εστιάζομαστε στη διαπραγμάτευση των μονοηλεκτρονιακών ατόμων στα πλαίσια της Σύγχρονης Κβαντομηχανικής. Η διαπραγμάτευση έγινε από τον Schrödinger (1926) ταυτόχρονα με την επίδειξη της ομώνυμης εξίσωσης.

- Και σε αυτή την διαπραγμάτευση ο πυρήνας θεωρείται πρακτικά ακίνητος με το ηλεκτρόνιο περιστρεφόμενο γύρω από αυτόν.
- Και εδώ η δύναμη Coulomb που ασκεί ο πυρήνας στο ηλεκτρόνιο είναι η μοναδική δύναμη που δρά σε αυτό και θεωρείται ως κεντρομόλος. Η δυναμική ενέργεια του ηλεκτρονίου θα είναι και εδώ:

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r}$$

- Η ουσιώδης διαφορά με τα δύο προηγούμενα πρότυπα είναι ότι πλέον το πρόβλημα θεωρείται τριδιάστατο, όπως φαίνεται στο Σχήμα. Η συμμετρία του προβλήματος επιβάλλει στο ηλεκτρόνιο να κινείται στα όρια σφαίρας μεταβλητής ακτίνας. Η θέση του προσδιορίζεται από τις σφαιρικές συντεταγμένες  $r$ ,  $\theta$ ,  $\phi$ .



## II. Η ΕΞΙΣΩΣΗ Schrödinger ΓΙΑ ΤΑ ΜΟΝΟΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΑ ΑΤΟΜΑ

- Χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger :

$$\nabla^2 \psi(x, y, z) + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi(x, y, z) = 0$$

Σε σφαιρικές συντεταγμένες:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Κατά συνέπεια έχουμε ότι:

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi(r, \theta, \varphi) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r} \right) \psi(r, \theta, \varphi) = 0$$

Αναζητούμε λύσεις χωρισμένων μεταβλητών:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$



Επομένως:

$$\frac{\Theta\Phi}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{R\Phi}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{R\Theta}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r} \right) R\Theta\Phi = 0$$

• Διαιρώντας την παραπάνω έκφραση με το γινόμενο  $R\Theta\Phi$  και πολλαπλασιάζοντας το αποτέλεσμα με την ποσότητα  $r^2\sin\theta$ , παίρνουμε μετά από αναδιάταξη των όρων ότι :

$$\frac{\sin^2\theta}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\sin\theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{2m_e}{\hbar^2} r^2 \sin^2\theta \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r} \right) = -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}$$

• Παρατηρούμε ότι το πρώτο μέλος της παραπάνω εξίσωσης εξαρτάται μόνο από τα  $r$  και  $\theta$ , ενώ το δεύτερο μόνο από το  $\varphi$ . Για να είναι ίσα θα πρέπει το καθένα να ισούται με την ίδια σταθερά, έστω  $m_\ell^2$ . Κατά συνέπεια οδηγούμαστε στις ακόλουθες δύο εξισώσεις :

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m_\ell^2\Phi$$

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m_e}{\hbar^2} r^2 \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r} \right) = -\frac{1}{\Theta \sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta}$$

• Στην τελευταία εξίσωση παρατηρούμε ότι το πρώτο μέλος της εξαρτάται μόνο από το  $r$ , ενώ το δεύτερο μόνο από το  $\theta$ . Για να είναι ίσα θα πρέπει το καθένα να ισούται με την ίδια σταθερά, έστω  $\ell(\ell + 1)$ . Κατά συνέπεια οδηγούμαστε στις ακόλουθες δύο εξισώσεις :

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[ \frac{2m_e}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r} \right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R = 0$$

Ακτινική Εξίσωση

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[ \ell(\ell+1) - \frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta} \right] \Theta = 0$$

Πολική Εξίσωση

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m_\ell^2\Phi = 0$$

Αζιμουθιακή Εξίσωση

Η επίλυση των τριών παραπάνω διαφορικών εξισώσεων θα οδηγήσει στην έκφραση της κυματοσυνάρτησης και τον υπολογισμό της ενέργειας και της στροφορμής του ηλεκτρονίου. Η αναλυτική επίλυσή τους ξεφεύγει από τα πλαίσια του παρόντος μαθήματος και μπορεί να αναζητηθεί σε συγγράμματα Κβαντομηχανικής. Εδώ θα περιοριστούμε στην παράθεση των αποτελεσμάτων και το φυσικό τους περιεχόμενο.

## II. ΤΑ ΒΑΣΙΚΑ ΠΟΣΟΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

**A. Ενέργεια του ηλεκτρονίου.** Η επίλυση της ακτινικής εξίσωσης οδηγεί στον υπολογισμό της ενέργειας του ηλεκτρονίου:

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 q_e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 n^2 \hbar^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

δίνοντας το ίδιο ακριβώς αποτέλεσμα με τον Bohr !!!

Η ενέργεια εξαρτάται αποκλειστικά από τον **κβαντικό αριθμό n (κύριος κβαντικός αριθμός)**

• Παράλληλα αποδεικνύεται ότι η μέση δυναμική ενέργεια του ηλεκτρονίου δίνεται από την έκφραση:

$$\langle U \rangle = -\frac{m_e Z^2 q_e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 n^2 \hbar^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

και είναι διπλάσια της ολικής ενέργειας και κατά συνέπεια της μέσης κινητικής ενέργειας του ηλεκτρονίου, όπως ακριβώς στο πρότυπο του Bohr.

• Επομένως το μονοδιάστατο ενεργειακό διάγραμμα E-r που αναλύσαμε στα πλαίσια του προτύπου του Bohr ισχύει αυτούσιο και στην διαπραγμάτευση κατά Schrödinger.



**Β. Στροφορμή του ηλεκτρονίου.** Η επίλυση της ακτινικής εξίσωσης οδηγεί στον υπολογισμό και της στροφορμής του ηλεκτρονίου. Αποδεικνύεται ότι τόσο η στροφορμή, όσο και η συνιστώσα της στον άξονα  $Z$  είναι κβαντισμένες με μέτρο αντίστοιχα:

$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)}\hbar \quad L_z = m_\ell \hbar$$

Παρατηρούμε την εμπλοκή δύο νέων κβαντικών αριθμών.

- Για κάθε δεδομένη τιμή του κύριου κβαντικού αριθμού  $n$  ο κβαντικός αριθμός της στροφορμής  $\ell$  μπορεί να πάρει τις τιμές

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, (n - 1)$$

με φασματοσκοπικό συμβολισμό :

$$s(\ell = 0), p(\ell = 1), d(\ell = 2), f(\ell = 3), g(\ell = 4), h(\ell = 5), i(\ell = 6), k(\ell = 6)$$

- Για κάθε δεδομένη τιμή του  $\ell$  ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός  $m_\ell$  μπορεί να πάρει τις τιμές:

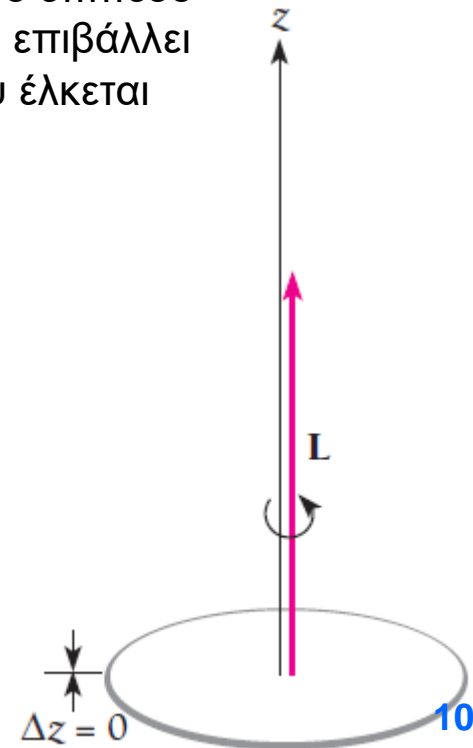
$$m_\ell = -\ell, -( \ell - 1), \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, (\ell - 1), \ell$$

Παρατηρούμε και εδώ την ύπαρξη εκφυλισμού που οφείλεται στη συμμετρία του προβλήματος. Σε κάθε τιμή ενέργειας (του  $n$ ) αντιστοιχούν περισσότερες από μία τιμές στροφορμής του ηλεκτρονίου (χονδρικά «τρόπων περιστροφής του»), όπως προέβλεπε και το πρότυπο του Sommerfeld.

- Γιατί, όμως μόνο η συνιστώσα  $Z$  της στροφορμής εμφανίζεται κβαντισμένη ; Γιατί δεν υπάρχουν εκφράσεις για τις άλλες δύο συνιστώσες της στροφορμής; **Η απάντηση έγκειται στο ότι η διαπραγμάτευση είναι πλέον καθαρά κβαντική και τα αποτελέσματά της πρέπει να είναι συμβιβαστά με την Αρχή της Αβεβαιότητας.** Αυτή επιβάλλει ότι είναι δυνατός ο ταυτόχρονος προσδιορισμός της ολικής στροφορμής και μίας από τις συνιστώσες της.

Εάν μπορούσαμε να έχουμε απόλυτο προσδιορισμό και των τριών συνιστωσών της στροφορμής  $L_x, L_y, L_z$  τότε η ολική στροφορμή θα είχε απόλυτα καθορισμένη διεύθυνση στο χώρο με πιο ρεαλιστική απεικόνιση αυτή του σχήματος (εδώ  $L = L_z, L_x = L_y = 0$ ).

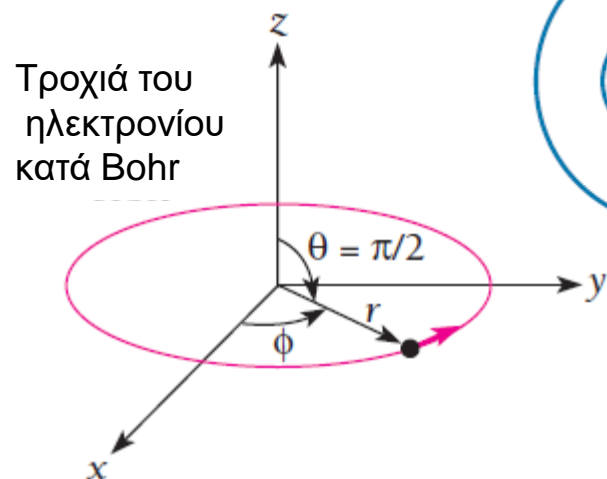
Αυτό θα σήμαινε ότι το ηλεκτρόνιο περιστρέφεται γύρω από τον πυρήνα στο επίπεδο  $XY$  και επομένως  $z=0$ . Αυτό, όμως, με βάση την Αρχή της Αβεβαιότητας, επιβάλλει  $p_z = \infty$  !!! Όμως αυτό είναι ασυμβίβαστο με την εικόνα ενός ηλεκτρονίου που έλκεται από τον πυρήνα και είναι δέσμιο στο άτομο.



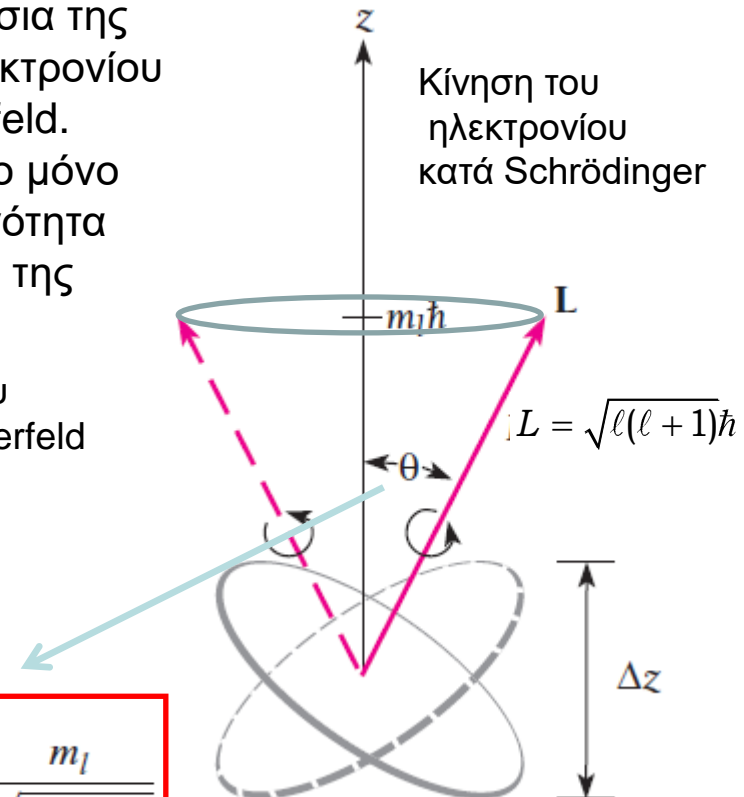


- Η πιο συμβατή απεικόνιση είναι αυτή του Σχήματος, όπου η στροφορμή δεν έχει απόλυτα προσδιορισμένη κατεύθυνση στο χώρο, αλλά διαγράφει έναν κώνο περί τον άξονα Z με το ηλεκτρόνιο μη «περιστρεφόμενο» σε σαφώς προσδιορισμένο επίπεδο. Έτσι διασφαλίζεται πεπερασμένη αβεβαιότητα στη θέση του ηλεκτρονίου στον άξονα Z. Εδώ έχουμε σαφή προσδιορισμό της συνιστώσας  $L_z$  ενώ  $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$ .

- Το γεγονός αυτό καταργεί στην διαπραγμάτευση στα πλαίσια της Σύγχρονης Κβαντομηχανικής την έννοια της τροχιάς του ηλεκτρονίου όπως τη συναντήσαμε στα πρότυπα των Bohr και Sommerfeld. Το ηλεκτρόνιο κινείται «κάπως» γύρω από τον πυρήνα και το μόνο που μπορούμε να κάνουμε είναι να υπολογίσουμε την πιθανότητα να το βρούμε γύρω από αυτόν συναρτήσει της ενέργειας και της στροφορμής του.



$$\cos \theta = \frac{L_z}{|\vec{L}|} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}$$



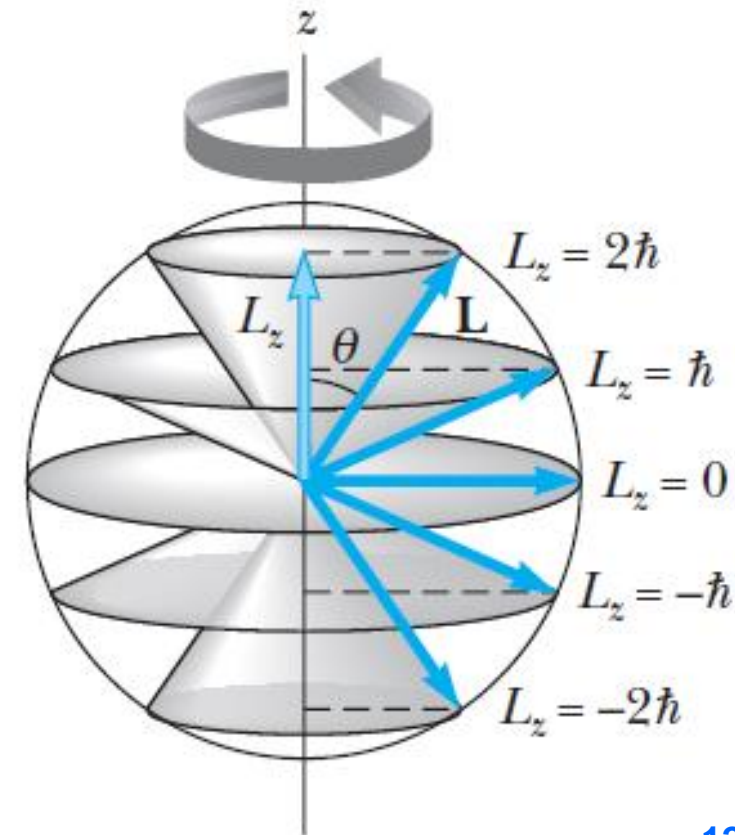
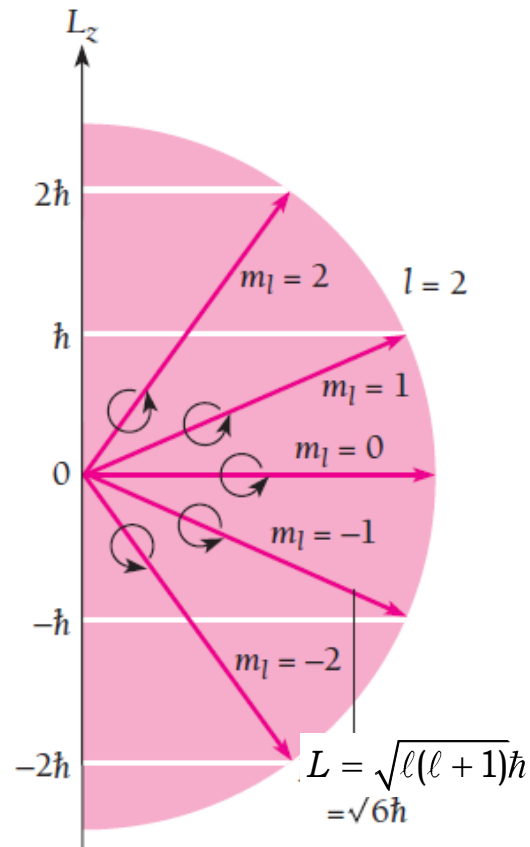


• Συνοψίζοντας τα παραπάνω συγκρατούμε τις τιμές των τριών κβαντικών αριθμών για κάθε τιμή ενέργειας του ηλεκτρονίου και το αντίστοιχο διάγραμμα της στροφορμής.

Π.χ. για την 2<sup>η</sup> διεγερμένη κατάσταση ( $n=3$ ) έχουμε ότι  $\ell = 0, 1, 2$

Για  $\ell = 2$  έχουμε ότι  $m_\ell = -2, -1, 0, 1, 2$  και το αντίστοιχο διάγραμμα της στροφορμής και της συνιστώσας  $L_z$  αυτής εικονίζεται στο ακόλουθο Σχήμα.

Κβαντικοί αριθμοί $n, l, m$		
$n$	$l$	$m$
$n=1$	$l=0$	$m=0$
$n=2$	$l=0$	$m=0$
	$l=1$	$m=-1$ $m=0$ $m=+1$
$n=3$	$l=0$	$m=0$
	$l=1$	$m=-1$ $m=0$ $m=+1$
	$l=2$	$m=-2$ $m=-1$ $m=0$ $m=+1$ $m=+2$



### III. ΟΙ ΚΥΜΑΤΟΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ

**A. Ακτινικές κυματοσυναρτήσεις R(r).** Προκύπτουν από την επίλυση της ακτινικής εξίσωσης και έχουν τη μορφή (κανονικοποιημένες)

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]}} e^{-\frac{Zr}{na_0}} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right), \quad 0 \leq r \leq \infty, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

όπου  $a_0$  η γνωστή ακτίνα Bohr ( $0,53\text{\AA}$ ) και  $L$  τα συναφή πολυώνυμα Laguerre που δίδονται από την έκφραση:

$$L_q^p(x) = \frac{e^x x^{-p}}{q!} \frac{d}{dx^q} \left( e^{-x} x^{q+p} \right)$$

• Η μορφή τους εξαρτάται από τους κβαντικούς αριθμούς  $n$  και  $\ell$

**Εφαρμογή - Η ακτινική κυματοσυνάρτηση για  $n=1$  (Θεμελιώδης Κατάσταση) :** Για  $n=1$  έχουμε  $\ell=0$ . Άρα αναζητούμε την  $R_{10}(r)$ .

$$R_{10}(r) = \left[ \left(\frac{2Z}{a_0}\right)^3 \frac{(1-0-1)!}{2[(1+0)!]} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \left(\frac{2Zr}{a_0}\right)^0 L_{1-0-1}^{2\ell \times 0 + 1}\left(\frac{2Zr}{a_0}\right) = \left[ \left(\frac{2Z}{a_0}\right)^3 \frac{1}{2} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}} L_0^1\left(\frac{2Zr}{a_0}\right)$$

$$L_0^1(x) = \frac{e^x x^{-1}}{1!} \frac{d}{dx^0} \left( e^{-x} x^1 \right) = e^x x^{-1} e^{-x} x^1 = 1$$

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

**Εφαρμογή - Η ακτινική κυματοσυνάρτηση για n=2 :** Για n=2 έχουμε  $\ell=0,1$  . Άρα αναζητούμε την  $R_{20}(r)$  και την  $R_{21}(r)$ .

$$R_{20}(r) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{2a_0}\right)^3 \frac{(2-0-1)!}{2 \times 2[(2+0)!]}} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \left(\frac{2Zr}{2a_0}\right)^0 L_{2-0-1}^{2 \times 0+1} \left(\frac{2Zr}{2a_0}\right) = \sqrt{\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \frac{1}{8}} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} L_1^1 \left(\frac{Zr}{a_0}\right)$$

$$L_1^1(x) = \frac{e^x x^{-1}}{1!} \frac{d}{dx} (e^{-x} x^2) = e^x x^{-1} [2xe^{-x} - x^2 e^{-x}] = 2 - x$$

$$R_{20}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$$

$$R_{21}(r) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{2a_0}\right)^3 \frac{(2-1-1)!}{2 \times 2[(2+1)!]}} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \left(\frac{2Zr}{2a_0}\right)^1 L_{2-1-1}^{2 \times 1+1} \left(\frac{2Zr}{2a_0}\right) = \sqrt{\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \frac{1}{24}} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} L_0^3 \left(\frac{Zr}{a_0}\right)$$

$$L_0^3(x) = \frac{e^x x^{-3}}{0!} \frac{d^0}{dx^0} (e^{-x} x^3) = e^x x^{-1} e^{-x} x^1 = 1$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$$

**Β. Πολικές κυματοσυναρτήσεις  $\Theta(\theta)$ .** Προκύπτουν από την επίλυση της πολικής εξίσωσης και έχουν τη μορφή (κανονικοποιημένες)

$$\Theta_{\ell m_\ell}(\theta) = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{2} \frac{(\ell - |m_\ell|)!}{(\ell + |m_\ell|)!}} P_\ell^{|m_\ell|}(\cos \theta), \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad \ell \geq |m_\ell|$$

όπου  $P_\ell$  τα συναφή πολυώνυμα Legendre που δίδονται από την έκφραση:

$$P_\ell^m(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2 - 1)^\ell$$

• Η μορφή τους εξαρτάται από τους κβαντικούς αριθμούς  $\ell$  και  $m_\ell$

**Εφαρμογή - Η πολική κυματοσυνάρτηση για  $n=1$  (Θεμελιώδης Κατάσταση) :** Για  $n=1$  έχουμε  $\ell=0$  και  $m_\ell=0$ . Άρα αναζητούμε την  $\Theta_{00}(\theta)$ .

$$\Theta_{00}(\theta) = \left[ \frac{2 \times 0 + 1}{2} \frac{(0 - |0|)!}{(0 + |0|)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_0^0(\cos \theta) = \frac{1}{\sqrt{2}} P_0^0(\cos \theta)$$

$$P_0^0(x) = \frac{1}{2^0 \times 0!} (1 - x^2)^0 \frac{d^0}{dx^0} (x^2 - 1)^0 = 1$$

Άρα:

$$\Theta_{00}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

**Εφαρμογή - Η πολική κυματοσυνάρτηση για  $n=2$  και  $\ell=1$**  : Για  $n=2$  και  $\ell=1$  έχουμε  $m_\ell=0, \pm 1$  .  
Εδώ αναζητούμε την την  $\Theta_{10}(\theta)$  και την  $\Theta_{1\pm 1}(\theta)$  .

$$\Theta_{10}(\theta) = \left[ \frac{2 \times 1 + 1}{2} \frac{(1 - |0|)!}{(1 + |0|)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_1^0(\cos \theta) = \frac{\sqrt{6}}{2} P_1^0(\cos \theta) = \frac{\sqrt{6}}{2} \cos \theta$$

$$P_1^0(x) = \frac{1}{2^1 \times 1!} (1 - x^2)^0 \frac{d}{dx} (x^2 - 1)^1 = x \Rightarrow P_1^0(\cos \theta) = \cos \theta$$

$$\Theta_{10}(\theta) = \frac{\sqrt{6}}{2} \cos \theta$$

Για  $n=2$  και  $\ell=1$  και  $m_\ell = \pm 1$  . Εδώ αναζητούμε την την  $\Theta_{1\pm 1}(\theta)$ .

$$\Theta_{1\pm 1}(\theta) = \left[ \frac{2 \times 1 + 1}{2} \frac{(1 - |\pm 1|)!}{(1 + |\pm 1|)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_1^{|\pm 1|}(\cos \theta) = \frac{\sqrt{3}}{2} P_1^1(\cos \theta)$$

$$P_1^1(x) = \frac{1}{2^1 \times 1!} (1 - x^2)^{\frac{1}{2}} \frac{d^2}{dx^2} (x^2 - 1)^1 = \frac{1}{2} (1 - x^2)^{\frac{1}{2}} 2 \Rightarrow P_1^1(\cos \theta) = \sin \theta$$

$$\Theta_{1\pm 1}(\theta) = \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta$$



**Γ. Αξιμουθιακές κυματοσυναρτήσεις  $\Phi(\varphi)$ .** Προκύπτουν από την επίλυση της αξιμουθιακής εξίσωσης

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m_\ell^2\Phi = 0 \Rightarrow \Phi(\varphi) = Ae^{im_\ell\varphi} \quad (\text{η } \varphi \text{ αυξάνει αντιωρολογιακά})$$

- Θα πρέπει όμως

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_{m_\ell}(\varphi)|^2 d\varphi = 1 \Rightarrow A^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Θα πρέπει επίσης:

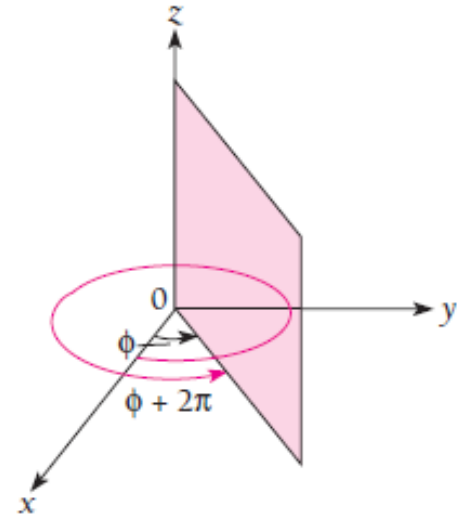
$$\Phi_{m_\ell}(\varphi) = \Phi_{m_\ell}(\varphi + 2\pi) \Rightarrow m_\ell = \text{ακέραιος}(0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots)$$

και επομένως ( αφού  $\ell \geq |m_\ell|$  ):

$$\Phi_{m_\ell}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_\ell\varphi}, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi, \quad |m_\ell| = 0, 1, 2, 3, \dots, \ell$$

**Εφαρμογή - Η αξιμουθιακή κυματοσυνάρτηση για  $n=1$  (Θεμελιώδης Κατάσταση) :** Για  $n=1$  έχουμε  $\ell=0$  και  $m_\ell=0$ . Άρα αναζητούμε την  $\Phi_0(\varphi)$ .

$$\Phi_0(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$



**Εφαρμογή - Η αζιμουθιακή κυματοσυνάρτηση για  $n=2$  και  $\ell=1$ :** Για  $n=2$  και  $\ell=1$  έχουμε  $m_\ell = 0, \pm 1$ . Εδώ αναζητούμε την  $\Phi_0(\varphi)$  και την  $\Phi_{\pm 1}(\varphi)$ .

$$\Phi_0(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\Phi_1(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi} \quad \Phi_{-1}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}$$



**Δ. Η συνολική εικόνα.** Η κατάσταση του ηλεκτρονίου περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση που είναι λύση της χρονικά ανεξάρτητης εξίσωσης Schrödinger

$$\psi_{nlm_\ell}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\Theta_{lm_\ell}(\theta)\Phi_{m_\ell}(\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm_\ell}(\theta, \varphi)$$

Σφαιρικές Αρμονικές

Ακτινικό τμήμα      Γωνιακό τμήμα

- Σε κάθε τιμή του κύριου κβαντικού αριθμού  $n$  ( $=1,2,3,\dots$ ) αντιστοιχεί μία καθορισμένη ενέργεια του ηλεκτρονίου.
- Σε κάθε τιμή του κύριου κβαντικού αριθμού  $n$  ( $=1,2,3,\dots$ ) αντιστοιχούν  $n$  τιμές του κβαντικού αριθμού  $\ell$  ( $=0,1,2,\dots,n-1$ )
- Σε κάθε τιμή του κβαντικού αριθμού  $\ell$  αντιστοιχούν  $2\ell+1$  τιμές του κβαντικού αριθμού  $m_\ell$  ( $=-l,\dots,0,\dots,l$ )
- Για κάθε τιμή του  $n$  υπάρχουν  $n^2$  δυνατές εκφυλισμένες κυματοσυναρτήσεις του ηλεκτρονίου αφού

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = n^2$$

Κβαντικοί αριθμοί			Χρονικά ανεξάρτητες κυματοσυναρτήσεις	
$n$	$\ell$	$m$		
1	0	0	$\Psi_{100}$	$= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\Psi_{200}$	$= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
2	1	0	$\Psi_{210}$	$= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos\theta$
2	1	$\pm 1$	$\Psi_{21\pm 1}$	$= \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin\theta e^{\pm i\varphi}$
3	0	0	$\Psi_{300}$	$= \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\frac{Z^2r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$
3	1	0	$\Psi_{310}$	$= \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \cos\theta$
3	1	$\pm 1$	$\Psi_{31\pm 1}$	$= \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \sin\theta e^{\pm i\varphi}$
3	2	0	$\Psi_{320}$	$= \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} (3\cos^2\theta - 1)$
3	2	$\pm 1$	$\Psi_{32\pm 1}$	$= \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\varphi}$
3	2	$\pm 2$	$\Psi_{32\pm 2}$	$= \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}$

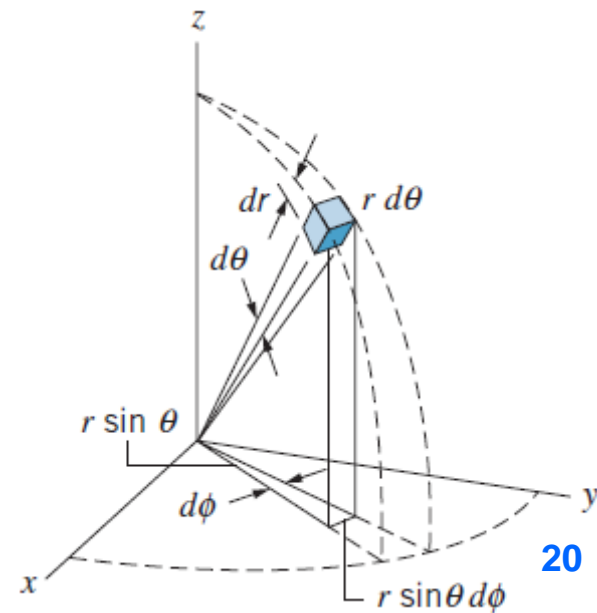
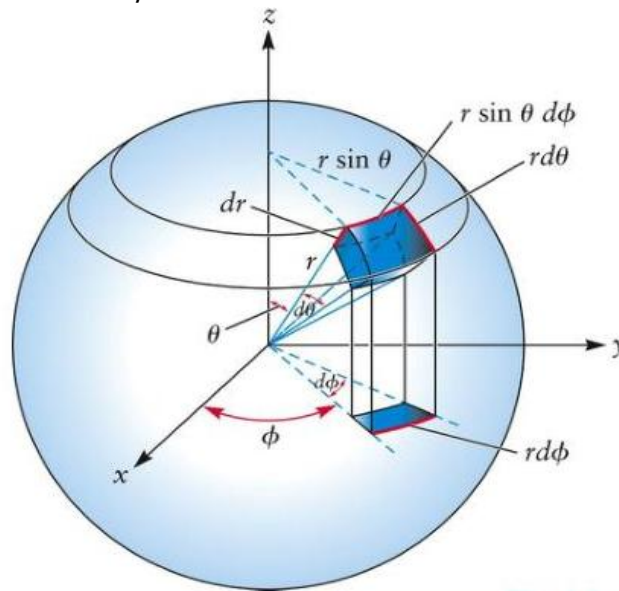
(8.49)

- Οι χρονικά εξαρτημένες κυματοσυναρτήσεις θα είναι αντίστοιχα:

$$\Psi_{nlm_\ell}(r, \theta, \varphi, t) = \psi_{nlm_\ell}(r, \theta, \varphi) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} = R_{nl}(r) \Theta_{lm_\ell}(\theta) \Phi_{m_\ell}(\varphi) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} = R_{nl}(r) Y_{lm_\ell}(\theta, \varphi) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$$

- Δεν υφίσταται έννοια τροχιάς όπως στα πρότυπα των Bohr και Sommerfeld. Το ζητούμενο είναι η πιθανότητα εύρεσης του ηλεκτρονίου σε έναν στοιχειώδη όγκο  $dV=r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi$  γύρω από τον πυρήνα. Αυτή είναι:

$$\begin{aligned} \wp &= |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi = \psi(r, \theta, \varphi) \psi^*(r, \theta, \varphi) r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi = \\ &= R_{nl}(r) R_{nl}^*(r) \Theta_{lm_\ell}(\theta) \Theta_{lm_\ell}^*(\theta) \Phi_{m_\ell}(\varphi) \Phi_{m_\ell}^*(\varphi) = R_{nl}(r) R_{nl}^*(r) Y_{lm_\ell}(\theta, \varphi) Y_{lm_\ell}^*(\theta, \varphi) r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi = \\ &= |R_{nl}(r)|^2 |Y_{lm_\ell}(\theta, \varphi)|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi \end{aligned}$$



**Εφαρμογή - Η συνολική κυματοσυνάρτηση για  $n=1$  (Θεμελιώδης Κατάσταση) :** Για  $n=1$  έχουμε  $\ell=0$  και  $m_\ell=0$ . Άρα:

$$\psi_{100}(r, \theta, \varphi) = R_{10}(r)\Theta_{00}(\theta)\Phi_0(\varphi) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

και επομένως:

$$\Psi_{100}(r, \theta, \varphi, t) = \psi_{100}(r, \theta, \varphi) e^{-\frac{E_1}{\hbar}t} \xrightarrow{E_1 = -\frac{m_e Z^2 q_e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2}}$$

$$\Psi_{100}(r, \theta, \varphi, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}} e^{\frac{m_e Z^2 q_e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar}t}$$

**Εφαρμογή - Η συνολική κυματοσυνάρτηση για  $n=2$  και  $\ell=1$  :**

$$\psi_{210}(r, \theta, \varphi) = R_{21}(r)\Theta_{10}(\theta)\Phi_0(\varphi) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \frac{\sqrt{6}}{2} \cos \theta \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \cos \theta$$

$$\Psi_{210}(r, \theta, \varphi, t) = \psi_{210}(r, \theta, \varphi) e^{-\frac{E_2 t}{\hbar}}$$

$$\psi_{21\pm 1}(r, \theta, \varphi) = R_{21}(r)\Theta_{1\pm 1}(\theta)\Phi_{\pm 1}(\varphi) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\varphi}$$

$$= \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$\Psi_{21\pm 1}(r, \theta, \varphi, t) = \psi_{21\pm 1}(r, \theta, \varphi) e^{-\frac{E_2 t}{\hbar}}$$



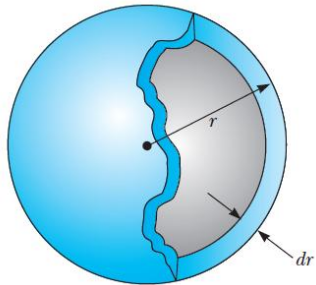
- Η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε έναν όγκο  $[r_1, r_2] \times [\theta_1, \theta_2] \times [\varphi_1, \varphi_2]$  γύρω από τον πυρήνα θα είναι:

$$\wp = \int_{r_1}^{r_2} \int_{\theta_1}^{\theta_2} \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = \int_{r_1}^{r_2} |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \int_{\theta_1}^{\theta_2} |\Theta_{lm}(\theta)|^2 \sin \theta d\theta \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} |\Phi_{m_l}(\varphi)|^2 d\varphi$$

$$P(r) = R_{nl}(r)R_{nl}^*(r)r^2 = |R_{nl}(r)|^2 r^2$$

$$\wp(r) = R_{nl}(r)R_{nl}^*(r)r^2 dr = |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr$$

Η ακτινική πυκνότητα πιθανότητας (πιθανότητα ανά μονάδα ακτίνας) και η ακτινική πιθανότητα να βρούμε το ηλεκτρόνιο σε έναν σφαιρικό φλοιό πάχους  $dr$  με ακτίνα μεταξύ  $r$  και  $r + dr$ .



Η αζιμουθιακή πυκνότητα πιθανότητας (πιθανότητα ανά μονάδα γωνίας) και η αζιμουθιακή πιθανότητα το ηλεκτρόνιο να βρεθεί μεταξύ των γωνιών  $\varphi$  και  $\varphi + d\varphi$ .

Η πολική πυκνότητα πιθανότητας (πιθανότητα ανά μονάδα γωνίας) και η πολική πιθανότητα το ηλεκτρόνιο να βρεθεί μεταξύ των γωνιών  $\theta$  και  $\theta + d\theta$

$$P(\theta) = \Theta_{lm}(\theta)\Theta_{lm}^*(\theta) = |\Theta_{lm}(\theta)|^2$$

$$\wp(\theta) = \Theta_{lm}(\theta)\Theta_{lm}^*(\theta)\sin \theta d\theta = |\Theta_{lm}(\theta)|^2 \sin \theta d\theta$$

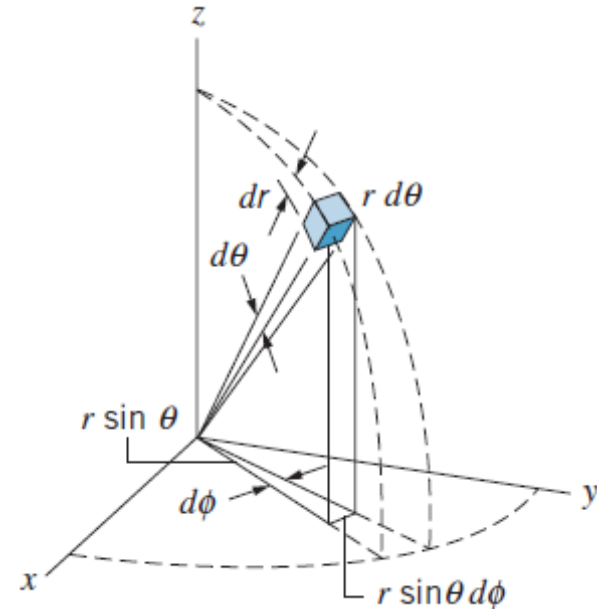
$$P(\varphi) = |\Phi_{m_l}(\varphi)|^2$$

$$\wp(\varphi) = \Phi_{m_l}(\varphi)\Phi_{m_l}^*(\varphi)d\varphi = |\Phi_{m_l}(\varphi)|^2 d\varphi$$

**ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΗ:** Λόγω της ιδιαίτερης μορφής των αζιμουθιακών κυματοσυναρτήσεων καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι η γωνιακή πυκνότητα πιθανότητας είναι ανεξάρτητη της γωνίας  $\varphi$  γιατί :

$$\begin{aligned} |Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi)|^2 &= Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi) Y_{\ell m_\ell}^*(\theta, \varphi) = \Theta_{\ell m_\ell}(\theta) \Theta_{\ell m_\ell}^*(\theta) \Phi_{m_\ell}(\varphi) \Phi_{m_\ell}^*(\varphi) = \\ &= \Theta_{\ell m_\ell}(\theta) \Theta_{\ell m_\ell}^*(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_\ell\varphi} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im_\ell\varphi} = \frac{1}{2\pi} |\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)|^2 \end{aligned}$$

Κατά συνέπεια η συνολική πυκνότητα πιθανότητας και η αντίστοιχη πιθανότητα είναι ανεξάρτητες από τη γωνία  $\varphi$  έχοντας μόνο ακτινική και πολική εξάρτηση.







- Η μέση ακτινική απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα υπολογίζεται ως εξής (ο ακριβής υπολογισμός ξεφεύγει από τα πλαίσια του μαθήματος):

$$\begin{aligned} \langle r_{nl} \rangle &= \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} r |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = \int_0^{\infty} r |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \underbrace{\int_0^{\pi} |\Theta_{\ell m}(\theta)|^2 \sin \theta d\theta}_1 \underbrace{\int_0^{2\pi} |\Phi_{m_\ell}(\varphi)|^2 d\varphi}_1 \\ &= \int_0^{\infty} r |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = \frac{n^2 a_0}{Z} \left[ 1 + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{n^2} \right) \right] \end{aligned}$$

Π.χ. για το άτομο του Υδρογόνου ( $Z=1$ ) στη θεμελιώδη του κατάσταση ( $n=1$ ) έχουμε  $\ell = 0$  και έτσι:

$$\langle r_1 \rangle = \frac{3}{2} a_0$$

σε καλή συμφωνία με το πρότυπο του Bohr.

Παρατηρούμε ότι η έκφραση της μέσης απόστασης παρουσιάζει ισχυρή εξάρτηση από τον κύριο κβαντικό αριθμό  $n$  και ασθενέστερη εξάρτηση από τον  $\ell$ . Έτσι όλες οι καταστάσεις του ηλεκτρονίου με την ίδια τιμή του  $n$  αντιστοιχούν στην ίδια ενέργεια αλλά και σχεδόν στην ίδια μέση απόσταση από τον πυρήνα και υπό αυτή την έννοια λέμε ότι συνιστούν έναν φλοιό με συμβολισμό:

$$K(n=1), L(n=2), M(n=3), N(n=4), O(n=5), P(n=6), Q(n=7) \dots$$

Παρατήρηση: Η ακτινική πυκνότητα πιθανότητας μπορεί να μας δώσει την πιθανότερη ακτίνα του σφαιρικού φλοιού πάχους  $dr$  μέσα στον οποίο μπορούμε να βρούμε το ηλεκτρόνιο. Δεν δίνει όμως το σε ποιο σημείο του φλοιού έχουμε την μέγιστη πιθανότητα να το εντοπίσουμε. Αυτό το δίνει η γωνιακή πυκνότητα πιθανότητας που δίνει την γωνιακή εξάρτηση της συνολικής πυκνότητας πιθανότητας.

- **(Φασματοσκοπικός συμβολισμός των καταστάσεων του ηλεκτρονίου).** Διευκολύνει έναντι της χρήσης των κυματοσυναρτήσεων. Χρησιμοποιούνται γι' αυτόν οι ενδείξεις που παραπέμπουν στους κβαντικούς αριθμούς  $n$  και  $\ell$ .

Για  $n=1$  έχουμε  $\ell=0$  και  $m_\ell=0$  (θεμελιώδης κατάσταση). Σε αυτή αντιστοιχεί μια κυματοσυνάρτηση που συμβολίζεται ως  $1s$ .

Για  $n=2$  έχουμε  $\ell=0,1$  (πρώτη διεγερμένη).

Σε αυτή αντιστοιχούν 4 κυματοσυναρτήσεις που συμβολίζονται ως:

$2s$  ( $n=2, \ell=0, m_\ell=0$ )

$2p$  ( $n=2, \ell=1, m_\ell=-1,0,1$ ) .

Για  $n=3$  έχουμε  $\ell=0,1,2$  (δεύτερη διεγερμένη).

Σε αυτή αντιστοιχούν 9 κυματοσυναρτήσεις που συμβολίζονται ως:

$3s$  ( $n=3, \ell=0, m_\ell=0$ )

$3p$  ( $n=3, \ell=1, m_\ell=-1,0,1$ )

$3d$  ( $n=3, \ell=2, m_\ell=-2,-1,0,1,2$ ) .

Για  $n=4$  έχουμε  $\ell=0,1,2,3$

(τρίτη διεγερμένη). Σε αυτή αντιστοιχούν

16 κυματοσυναρτήσεις που συμβολίζονται :

$4s$  ( $n=4, \ell=0, m_\ell=0$ )

$4p$  ( $n=4, \ell=1, m_\ell=-1,0,1$ )

$4d$  ( $n=4, \ell=2, m_\ell=-2,-1,0,1,2$ )

.  $4f$  ( $n=4, \ell=3, m_\ell=-3,-2,-1,0,1,2,3$ )

	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$	$l = 4$	$l = 5$
$n = 1$	1s					
$n = 2$	2s	2p				
$n = 3$	3s	3p	3d			
$n = 4$	4s	4p	4d	4f		
$n = 5$	5s	5p	5d	5f	5g	
$n = 6$	6s	6p	6d	6f	6g	6h

## IV. ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΟΥΣΕΣ ΜΕΤΑΒΑΣΕΙΣ

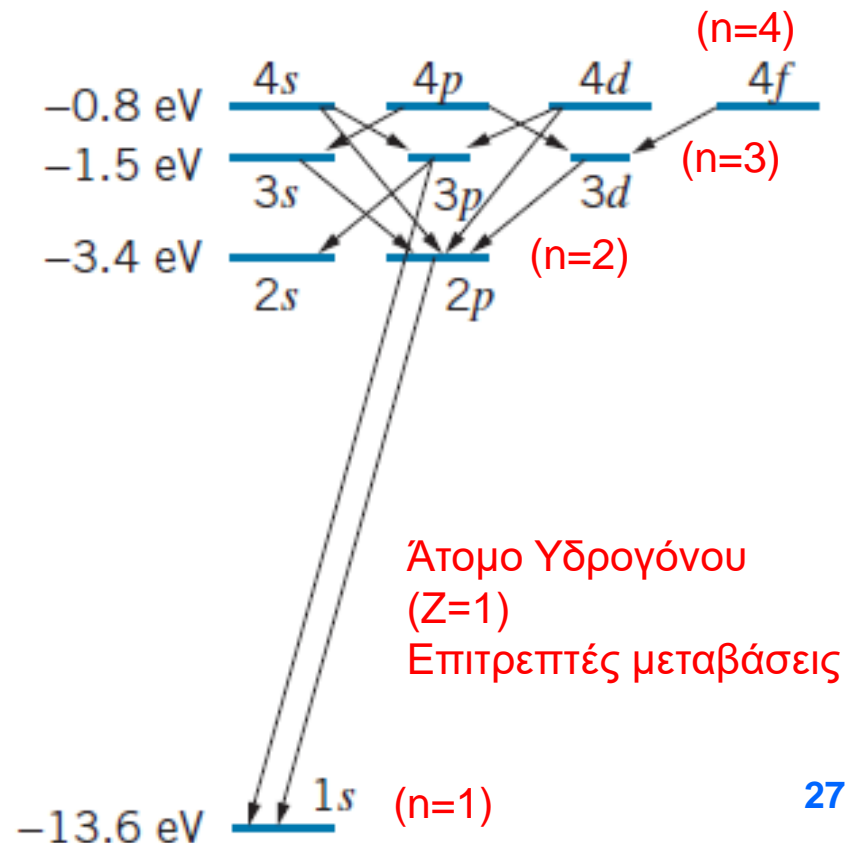
Σύμφωνα με τη θεωρία του Bohr όταν το ηλεκτρόνιο ενός μονοηλεκτρονιακού ατόμου διεγερθεί (π.χ από την πρόσπτωση σε αυτό ενός φωτονίου) σε κατάσταση υψηλότερης ενέργειας παραμένει σε αυτή ελάχιστο χρόνο και αποδιεγείρεται μεταπίπτοντας σε κατάσταση χαμηλότερης ενέργειας με ταυτόχρονη εκπομπή ενός φωτονίου ενέργειας:

$$hf = E_i - E_f$$

Στην προσέγγιση αυτή, όπου δεν υπάρχει εκφυλισμός, επιτρέπεται κατά την διέγερση/αποδιέγερση του ηλεκτρονίου η μετάβασή του σε οποιαδήποτε ενεργειακή κατάσταση.

Στα πλαίσια της καθαρά κβαντομηχανικής διαπραγμάτευσης κατά Schrödinger, όπου εμφανίζεται εκφυλισμός, δεν επιτρέπεται μία οποιαδήποτε μετάβαση. Η πρόσπτωση του φωτονίου αποτελεί μία παροδική διαταραχή για το ηλεκτρόνιο. Η τελική κατάσταση που αυτό θα βρεθεί είναι μία επαλληλία επιτρεπτών καταστάσεων, μία από τις οποίες είναι η πιθανότερη. Αποδεικνύεται έτσι ότι είναι επιτρεπτές μεταβάσεις μεταξύ καταστάσεων που υπακούουν στον ακόλουθο κανόνα επιλογής:

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m_l = 0, \pm 1$$



## V. ΤΟ ΑΤΟΜΟ ΤΟΥ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ (Z=1)

► Στο εδάφιο αυτό γίνεται εφαρμογή όλων όσων προηγήθηκαν στο απλούστερο μονοηλεκτρονιακό άτομο, το άτομο του Υδρογόνου με  $Z=1$ .

• Η ενέργεια του ηλεκτρονίου του παίρνει τις διακριτές τιμές :

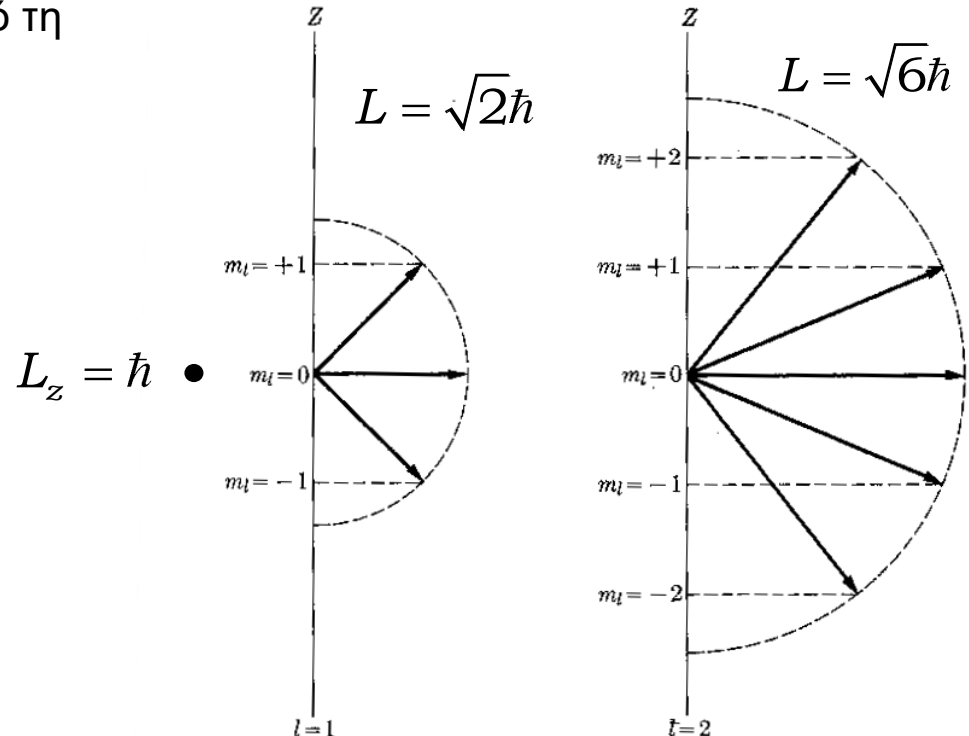
$$E_n = -\frac{m_e q_e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 n^2 \hbar^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

• Σε κάθε τιμή της ενέργειας του ηλεκτρονίου αντιστοιχούν  $n$  διαφορετικές τιμές της στροφορμής του ηλεκτρονίου που το μέτρο της δίδεται από τη σχέση:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar, \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$$

• Στο ίδιο μέτρο της στροφορμής αντιστοιχούν  $2l+1$  προσανατολισμοί της όπως φαίνεται στο διπλανό Σχήμα με βάση το ότι:

$$m_l (= -l, \dots, 0, \dots, l)$$



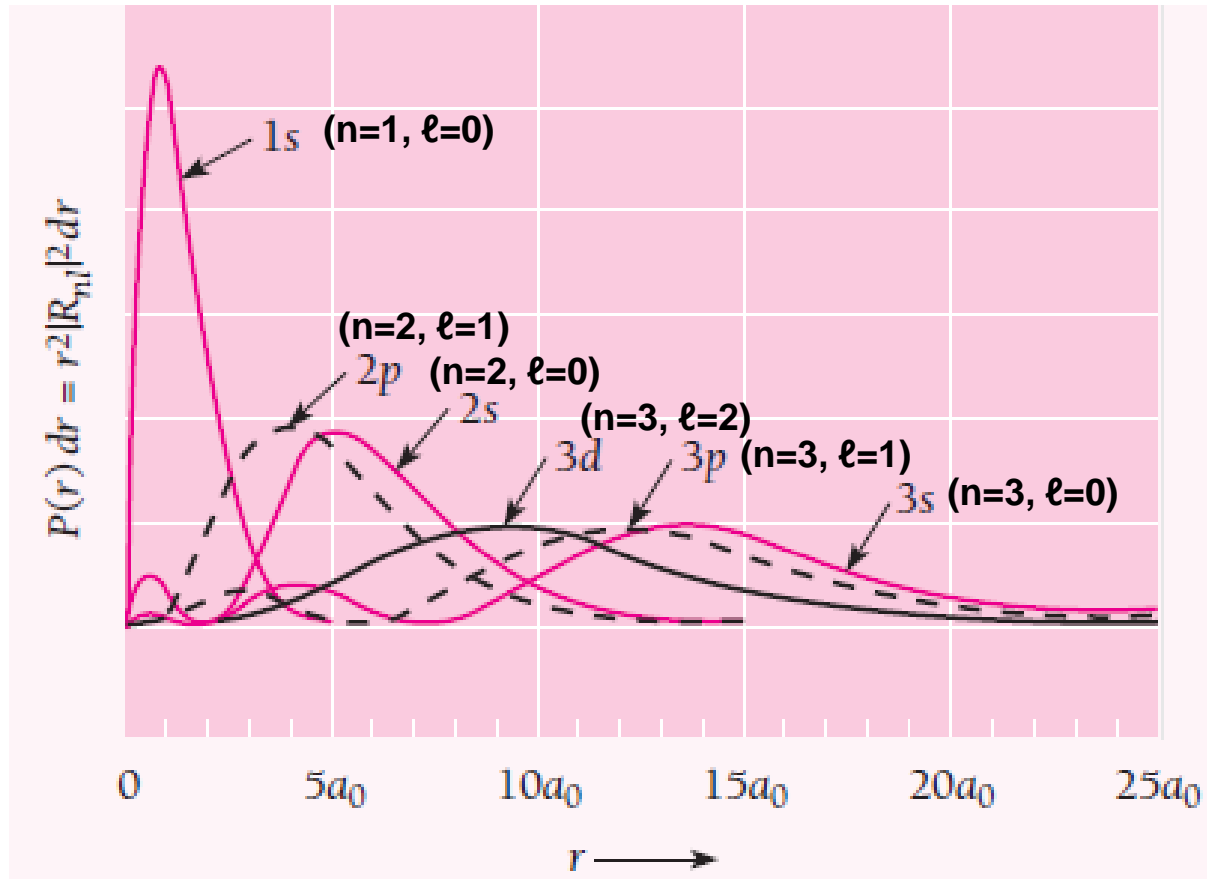


► Χαρακτηριστικές κανονικοποιημένες κυματοσυναρτήσεις του ηλεκτρονίου στο άτομο του Υδρογόνου παρατίθενται στον επόμενο Πίνακα.

$n$	$l$	$m_l$	$\Phi(\phi)$	$\Theta(\theta)$	$R(r)$	$\psi(r, \theta, \phi)$
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$	$\frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2\sqrt{2} a_0^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi} a_0^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{6}}{2} \cos \theta$	$\frac{1}{2\sqrt{6} a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi} a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos \theta$
2	1	$\pm 1$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta$	$\frac{1}{2\sqrt{6} a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{8\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
3	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{2}{81\sqrt{3} a_0^{3/2}} \left(27 - 18 \frac{r}{a_0} + 2 \frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi} a_0^{3/2}} \left(27 - 18 \frac{r}{a_0} + 2 \frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$
3	1	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{6}}{2} \cos \theta$	$\frac{4}{81\sqrt{6} a_0^{3/2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-r/3a_0}$	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-r/3a_0} \cos \theta$
3	1	$\pm 1$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta$	$\frac{4}{81\sqrt{6} a_0^{3/2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-r/3a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
3	2	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{10}}{4} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$\frac{4}{81\sqrt{30} a_0^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi} a_0^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0} (3 \cos^2 \theta - 1)$
3	2	$\pm 1$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\phi}$	$\frac{\sqrt{15}}{2} \sin \theta \cos \theta$	$\frac{4}{81\sqrt{30} a_0^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$
3	2	$\pm 2$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm 2i\phi}$	$\frac{\sqrt{15}}{4} \sin^2 \theta$	$\frac{4}{81\sqrt{30} a_0^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{162\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$

► **Ακτινικές κυματοσυναρτήσεις.** Δίνουν την πιθανότερη απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα για κάθε τιμή της ενέργειάς του.

- Παρατηρούμε ότι για τις διάφορες τιμές της στροφορμής που αντιστοιχούν στην ίδια ενέργεια, η πιθανότερη απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα εξαρτάται πρωτίστως από τον κύριο κβαντικό αριθμό  $n$  και δευτερευόντως από τον  $\ell$ . Για κάθε τιμή του  $n$  (ενέργειας) το ηλεκτρόνιο είναι πιθανό να βρεθεί εντός ενός σφαιρικού φλοιού πάχους  $dr$ , τα στενά όρια του οποίου καθορίζονται από τα μέγιστα που αντιστοιχούν στις διαφορετικές τιμές του  $\ell$ .



- Σε όλες τις περιπτώσεις η πιθανότητα είναι μηδέν για  $r \rightarrow 0$ . Το ηλεκτρόνιο δεν μπορεί να βρεθεί επάνω στον πυρήνα. Άρα το άτομο είναι ευσταθές.

- Για κάθε τιμή του  $n$  η πιθανότητα εμφανίζει ένα μόνο ισχυρό μέγιστο στις περιπτώσεις που το  $\ell$  παίρνει τη μέγιστη τιμή του. Για τις χαμηλότερες τιμές του  $\ell$  εμφανίζονται δευτερεύοντα μέγιστα χωρίς, όμως, ιδιαίτερη σημασία. Ιδιαίτερη περίπτωση αποτελούν οι κυματοσυναρτήσεις με  $\ell = 0$ , όπου είναι οι μόνες που εμφανίζουν δευτερεύον μέγιστο στη γειτονιά του πυρήνα. Αυτό σημαίνει ότι μόνο για  $\ell = 0$  υπάρχει κάποια πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο πολύ κοντά στον πυρήνα («διδυσδικές κυματοσυναρτήσεις»), με την έννοια να περάσει και κάποιο χρόνο του κοντά σε αυτόν. Μικρότερη πιθανότητα να βρεθεί κοντά στον πυρήνα θα έχει ένα ηλεκτρόνιο για  $\ell = 1$  και ακόμη μικρότερη για  $\ell = 2$ . Το αποτέλεσμα είναι ποιοτικά όμοιο με αυτό του προτύπου του Sommerfeld.
- Η μέση απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα δίδεται για το άτομο του Υδρογόνου από την έκφραση:

$$\langle r_{n\ell} \rangle = n^2 a_0 \left[ 1 + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{n^2} \right) \right]$$

στη θεμελιώδη του κατάσταση ( $n=1$ ) έχουμε  $\ell = 0$  και έτσι:  $\langle r_1 \rangle = \frac{3}{2} a_0$

Η πιθανότερη, όμως, απόσταση από τον πυρήνα στη θεμελιώδη κατάσταση θα βρεθεί από τη μεγιστοποίηση της αντίστοιχης πυκνότητας πιθανότητας:

$$\frac{dP_{10}}{dr} = 0 \Rightarrow \frac{d(|R_{10}(r)|^2 r^2)}{dr} = 0 \Rightarrow \frac{d\left(\frac{4}{\alpha_0^3} e^{-\frac{2r}{\alpha_0}} r^2\right)}{dr} = 0 \Rightarrow (r_1)_p = \alpha_0$$



► **Γωνιακές κυματοσυναρτήσεις.** Δίνουν την πιθανότητα το ηλεκτρόνιο να βρεθεί σε ένα εύρος γωνίας  $\theta \rightarrow \theta + d\theta$  εντός των ορίων ενός στοιχειώδους σφαιρικού φλοιού πάχους  $dr$ . Η γωνιακή πιθανότητα και η γωνιακή πυκνότητα πιθανότητας είναι ανεξάρτητες της γωνίας  $\varphi$ .

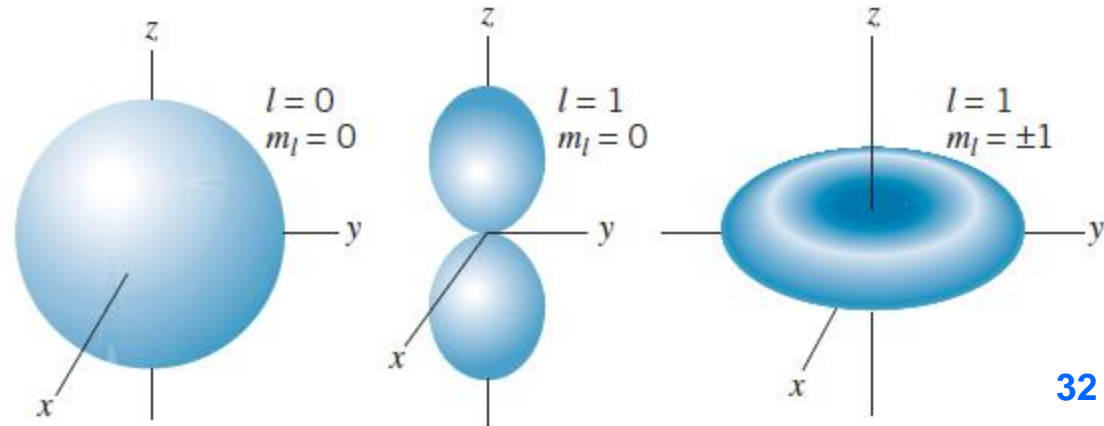
$$P(\theta) = |Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi)|^2 = Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi) Y_{\ell m_\ell}^*(\theta, \varphi) = \Theta_{\ell m_\ell}(\theta) \Theta_{\ell m_\ell}^*(\theta) \Phi_{m_\ell}(\varphi) \Phi_{m_\ell}^*(\varphi) =$$

$$= \Theta_{\ell m_\ell}(\theta) \Theta_{\ell m_\ell}^*(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im\varphi} = \frac{1}{2\pi} |\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)|^2$$

$$\wp(\theta) = Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi) Y_{\ell m_\ell}^*(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = |Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi = \frac{1}{2\pi} |\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi$$

Στο ακόλουθο Σχήμα εικονίζεται η **γωνιακή πυκνότητα πιθανότητας**  $P(\theta)$  για  $\ell=0$  και  $\ell=1$  συναρτήσει της γωνίας  $\theta$ . Για  $\ell=0$  εμφανίζει σφαιρική συμμετρία (όλες οι θέσεις στον στοιχειώδη φλοιό είναι ισοπίθανες). Για  $\ell=1$  και  $m_\ell=0$  το ηλεκτρόνιο εμφανίζει προτιμητέα διεύθυνση παρουσίας κατά μήκος του άξονα  $z$  με δύο αντιδιαμετρικά σημεία μέγιστης πιθανότητας (το διάνυσμα της στροφορμής βρίσκεται στο επίπεδο  $xy$ ).

Για  $\ell=1$  και  $m_\ell=\pm 1$  το ηλεκτρόνιο εμφανίζει προτιμητέα διεύθυνση παρουσίας κοντά στο επίπεδο  $xy$  (εδώ η στροφορμή έχει τη μέγιστη προβολή της κατά μήκος του άξονα  $z$ ).



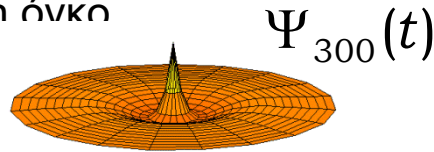


► **Η συνολική εικόνα.** Παρέχεται από τη συνολική κυματοσυνάρτηση  $\psi(r, \theta, \varphi)$ . Η ποσότητα:

$$P_{nlm_l} = |\psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi)|^2 = |R_{nl}(r)|^2 r^2 |Y_{lm_l}(\theta, \varphi)|^2 = f(r, \theta)$$

είναι η πυκνότητα πιθανότητας εύρεσης του ηλεκτρονίου σε έναν στοιχειώδη όγκο  $dV=r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi$  γύρω από τον πυρήνα. Η αντίστοιχη πιθανότητα είναι:

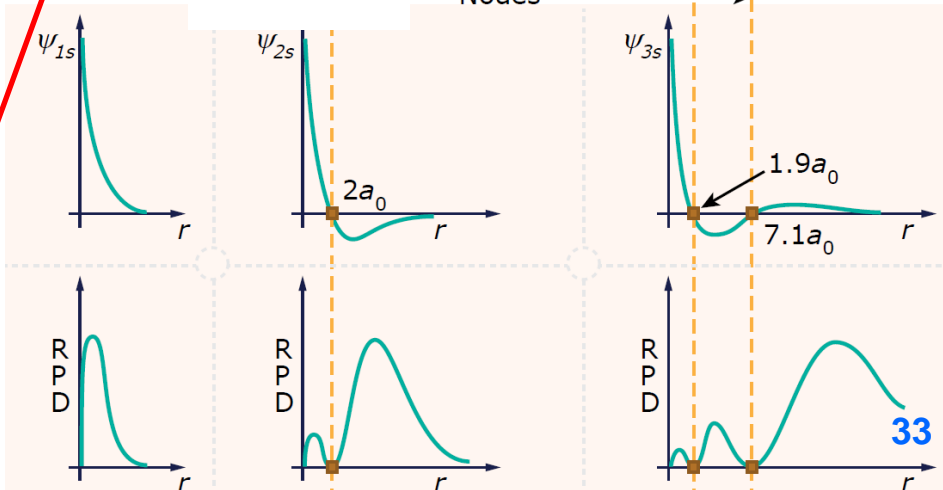
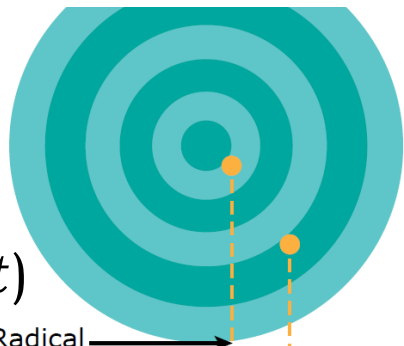
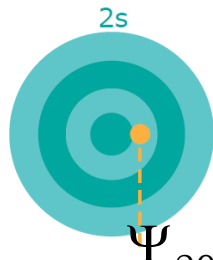
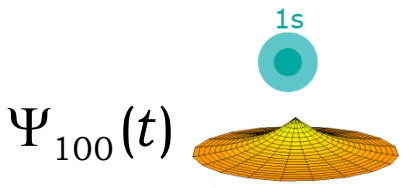
$$\mathcal{P}_{nlm_l} = |R_{nl}(r)|^2 |Y_{lm_l}(\theta, \varphi)|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi = f(r, \theta)$$



$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$$

$$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi} a_0^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$

$$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi} a_0^{3/2}} \left(27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$$



Οι καταστάσεις s (σφαιρική συμμετρία)

[https://www.wikiwand.com/en/Atomic\\_orbital](https://www.wikiwand.com/en/Atomic_orbital)

## Οι καταστάσεις $p$ (γωνιακή εξάρτηση - $\theta$ )

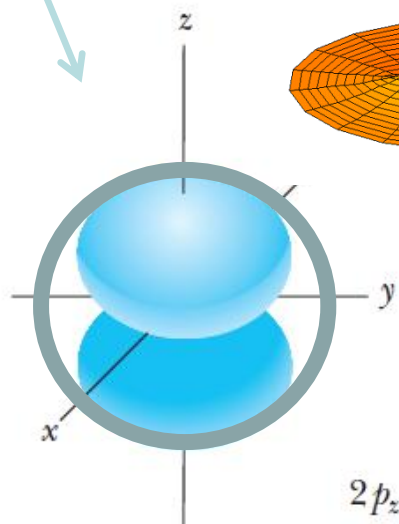
$$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \frac{r}{a_0^{3/2}} e^{-r/2a_0} \cos \theta$$

$$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \frac{r}{a_0^{3/2}} e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

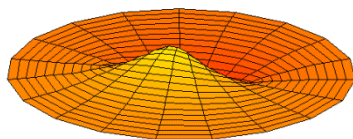
Σε καρτεσιανές  
συντεταγμένες

**Συνολική κατανομή της πιθανότητας**  
για τις καταστάσεις του ηλεκτρονίου  
με  $n=2$  και  $\ell=1$  (καταστάσεις  $2p$ ).

Σε καρτεσιανές  
συντεταγμένες

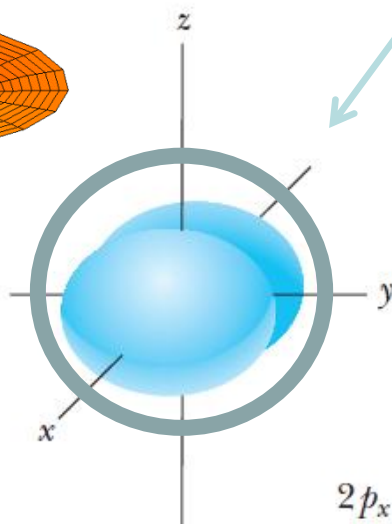


$n=2, \ell=1, m_\ell=0$   
Γνωστή και ως  $2p_z$   
λόγω της  
προτιμιέας  
κατεύθυνσης  
στον άξονα Z



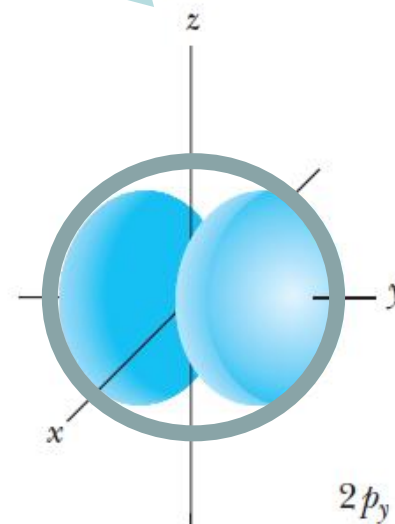
$\Psi_{211}(t)$

$2p_z$



$n=2, \ell=1, m_\ell=+1$   
Γνωστή και ως  $2p_x$   
λόγω της  
προτιμιέας  
κατεύθυνσης  
στον άξονα X

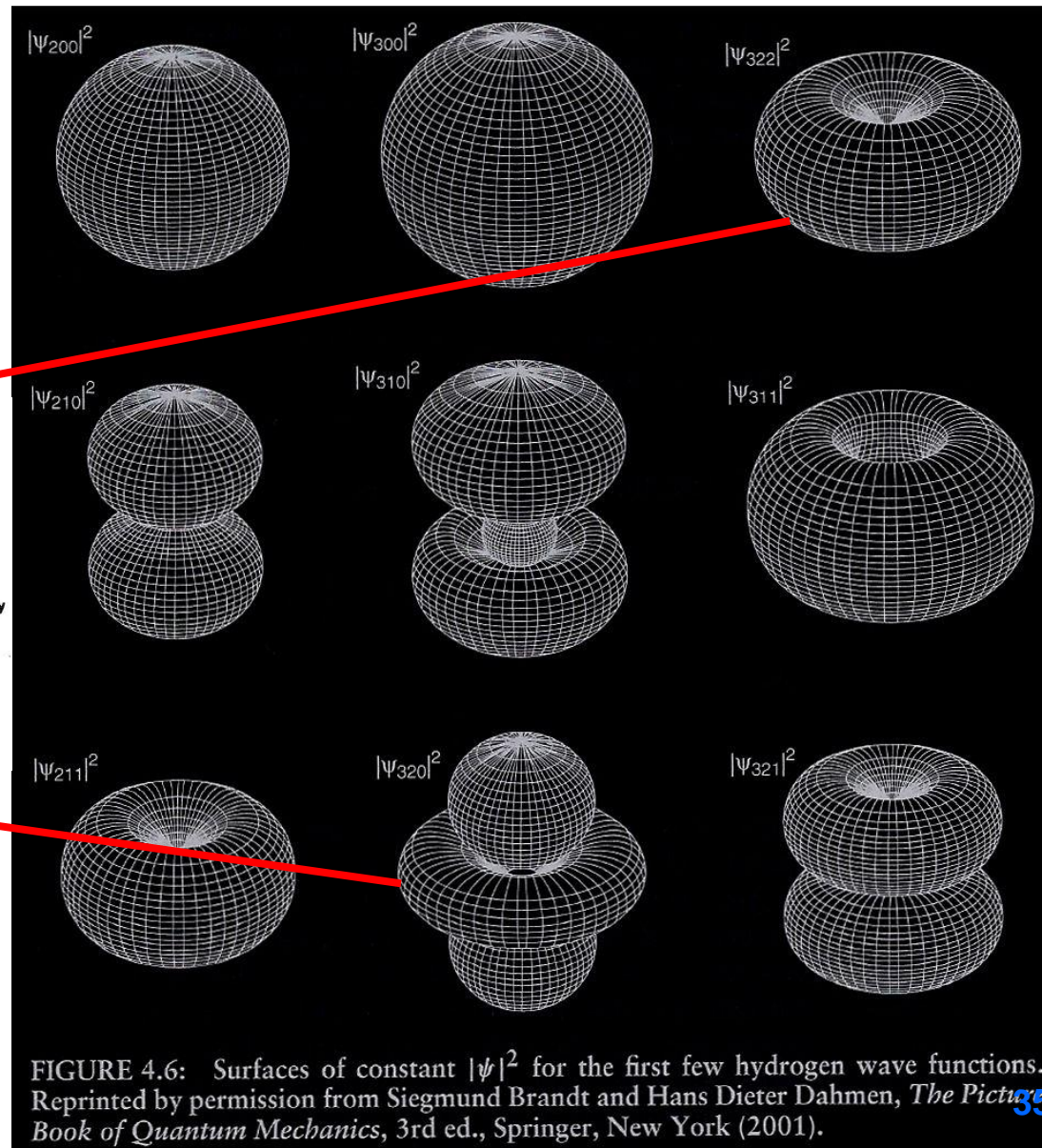
$2p_x$



$n=2, \ell=1, m_\ell=-1$   
Γνωστή και ως  $2p_y$   
λόγω της  
προτιμιέας  
κατεύθυνσης  
στον άξονα Y

$2p_y$

Στο ακόλουθο Σχήμα εικονίζεται η **συνολική πυκνότητα πιθανότητας** για χαρακτηριστικές καταστάσεις του ηλεκτρονίου στο άτομο του υδρογόνου. Παρουσιάζει σε όλες τις περιπτώσεις συμμετρία ως προς τον άξονα Z.



**Παράδειγμα 42: (Λύθηκε και στο Μάθημα)** Η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους κατάστασης του ηλεκτρονίου στο άτομο του Υδρογόνου δίδεται από την έκφραση:

$$\psi_{100} = \psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha_0^3}} e^{-\frac{r}{\alpha_0}}$$

Το ακτινικό της μέρος δίδεται από την έκφραση:

$$R_{100}(r) = R_{1s}(r) = \frac{2}{\alpha_0^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{\alpha_0}}$$

- (α) Να υπολογιστεί η μέση τιμή της απόστασης του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα.  
 (β) Να υπολογιστεί η πιθανότερη τιμή της απόστασης του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα.  
 (γ) Να υπολογιστεί η πιθανότητα το ηλεκτρόνιο να βρεθεί σε απόσταση μεγαλύτερη από  $\alpha_0$  από τον πυρήνα.

Δίδονται τα ολοκληρώματα:  $\int_2^{\infty} \xi^2 e^{-\xi} d\xi = 10e^{-2}$        $\int_0^{\infty} \xi^n e^{-\xi} d\xi = n!$

**Λύση:** (α) Θα έχουμε ότι :

$$\begin{aligned} \langle r_1 \rangle &= \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} r |\psi_{100}|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi = \int_0^{\infty} r \frac{1}{\pi\alpha_0^3} e^{-\frac{2r}{\alpha_0}} r^2 dr \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi = \frac{4\pi}{\pi\alpha_0^3} \int_0^{\infty} r^3 e^{-\frac{2r}{\alpha_0}} dr = \\ &= \frac{4}{\alpha_0^3} \int_0^{\infty} r^3 e^{-\frac{2r}{\alpha_0}} dr \xrightarrow{\xi = \frac{2r}{\alpha_0}} \langle r_1 \rangle = \frac{\alpha_0}{4} \int_0^{\infty} \xi^3 e^{-\xi} d\xi = \frac{\alpha_0}{4} (3!) = \frac{\alpha_0}{4} 6 \Rightarrow \langle r_1 \rangle = \frac{3}{2} \alpha_0 \end{aligned}$$

Ισοδύναμα μπορούμε να πούμε:

$$\langle r_1 \rangle = \int_0^{\infty} r |R_{100}(r)|^2 r^2 dr = \int_0^{\infty} r \frac{4}{\alpha_0^3} e^{-\frac{2r}{\alpha_0}} r^2 dr = \frac{4}{\alpha_0^3} \int_0^{\infty} r^3 e^{-\frac{2r}{\alpha_0}} dr = \frac{3}{2} \alpha_0$$

(β) Η ακτινική πυκνότητα πιθανότητας θα είναι:

$$P_{1s}(r) = |R_{1s}(r)|^2 r^2 = \frac{4}{\alpha_0^3} e^{-\frac{2r}{\alpha_0}} r^2$$

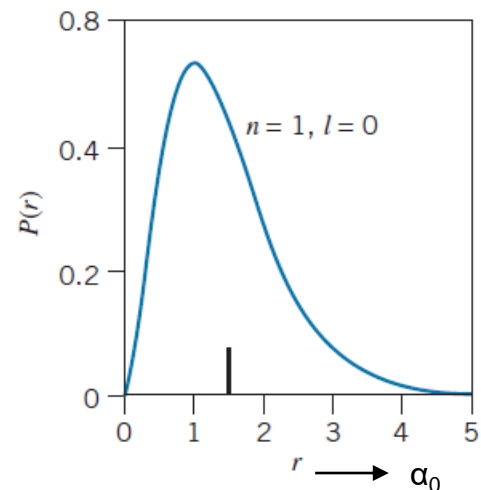
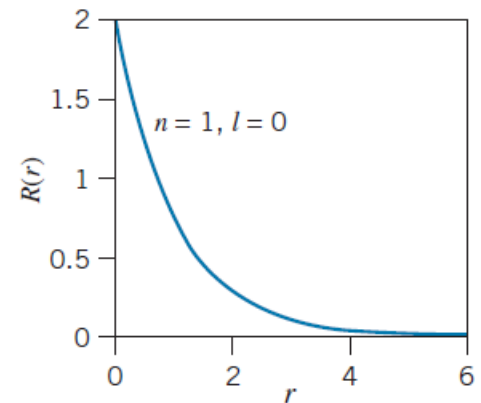
$$\frac{dP_{1s}(r)}{dr} = 0 \Rightarrow \frac{4}{\alpha_0^3} e^{-\frac{2r}{\alpha_0}} \left( 2r - \frac{2r^2}{\alpha_0} \right) = 0 \Rightarrow (r_1)_p = \alpha_0$$

(γ) Θα έχουμε ότι:

$$\wp(r > \alpha_0) = \int_{\alpha_0}^{\infty} |R_{1s}(r)|^2 r^2 dr = \frac{4}{\alpha_0^3} \int_{\alpha_0}^{\infty} r^2 e^{-\frac{2r}{\alpha_0}} dr \xrightarrow{\xi = \frac{2r}{\alpha_0}}$$

$$\wp(r > \alpha_0) = \frac{1}{2} \int_2^{\infty} \xi^2 e^{-\xi} d\xi \Rightarrow \wp(r > \alpha_0) =$$

$$= \frac{1}{2} 10e^{-2} = 5e^{-2} = 0,677 = 67,7\%$$



**Παράδειγμα 43: (Λύθηκε και στο Μάθημα)** Η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους κατάστασης του ηλεκτρονίου στο άτομο του Υδρογόνου δίδεται από την έκφραση:

$$\psi_{100} = \psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha_0^3}} e^{-\frac{r}{\alpha_0}}$$

Το ακτινικό της μέρος δίδεται από την έκφραση:

$$R_{100}(r) = R_{1s}(r) = \frac{2}{\alpha_0^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{\alpha_0}}$$

Να συγκριθούν οι πιθανότητες το ηλεκτρόνιο να βρεθεί σε εύρος  $dr$  σε απόσταση από τον πυρήνα ίση με  $\alpha_0$  και  $\alpha_0/2$ .

**Λύση:** Η πιθανότητα το ηλεκτρόνιο να βρεθεί σε απόσταση  $r \rightarrow r+dr$  από τον πυρήνα είναι:

$$\wp(r) = |R_{1s}(r)|^2 r^2 dr$$

Κατά συνέπεια μπορούμε να γράψουμε:

$$\frac{\wp(r \approx \alpha_0)}{\wp\left(r \approx \frac{\alpha_0}{2}\right)} = \frac{|R_{1s}(\alpha_0)|^2 \alpha_0^2 dr}{\left|R_{1s}\left(\frac{\alpha_0}{2}\right)\right|^2 \frac{\alpha_0^2}{4} dr} = \frac{\frac{4}{\alpha_0^3} e^{-\frac{2\alpha_0}{\alpha_0}} \alpha_0^2 dr}{\frac{4}{\alpha_0^3} e^{-\frac{2\alpha_0}{2\alpha_0}} \frac{\alpha_0^2}{4} dr} = 4 \frac{e^{-2}}{e^{-1}} = 4e^{-1} = 1,47$$

**Παράδειγμα 44: (Λύθηκε και στο Μάθημα)** Για τις κυματοσυναρτήσεις του ηλεκτρονίου με  $n=2$ ,  $\ell=1$  στο άτομο του Υδρογόνου ( $Z=1$ ) να υπολογίσετε την κατεύθυνση στο χώρο για την οποία έχουμε τη μέγιστη πιθανότητα εύρεσης του ηλεκτρονίου.

**Λύση:** Αυτή την πληροφορία τη δίνει η γωνιακή πυκνότητα πιθανότητας.

Για  $n=2$ ,  $\ell=1$  και  $m_\ell=0$  έχουμε ότι:

$$Y_{10}(\theta, \varphi) = \Theta_{10}(\theta) \Phi_0(\varphi) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos \vartheta$$

Η αντίστοιχη πυκνότητα πιθανότητας είναι:

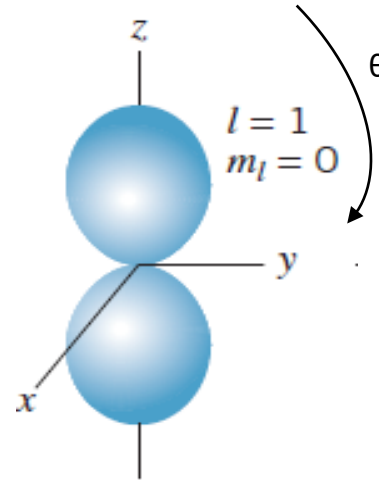
$$P(\theta) = |Y_{10}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{3}{4\pi} \cos^2 \vartheta$$

$$\frac{dP(\theta)}{d\theta} = 0 \Rightarrow -\frac{3}{4\pi} 2 \cos \theta \sin \theta = 0 \Rightarrow \begin{cases} \cos \theta = 0 \Rightarrow \theta = \frac{\pi}{2} \\ \sin \theta = 0 \Rightarrow \theta = 0, \pi \end{cases}$$

Όμως, όπως διαπιστώνεται σχετικά εύκολα:

$$\left. \frac{d^2P(\theta)}{d\theta^2} \right|_{\theta=\frac{\pi}{2}} > 0, \quad \left. \frac{d^2P(\theta)}{d\theta^2} \right|_{\theta=0} < 0, \quad \left. \frac{d^2P(\theta)}{d\theta^2} \right|_{\theta=\pi} < 0$$

Επομένως μέγιστη πιθανότητα έχουμε για  $\theta=0$  και  $\pi$ , όπως φαίνεται στο Σχήμα.



Για  $n=2$ ,  $\ell=1$  και  $m_\ell=\pm 1$  έχουμε ότι:

$$Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \Theta_{1\pm 1}(\theta)\Phi_{\pm 1}(\varphi) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

Η αντίστοιχη πυκνότητα πιθανότητας είναι:

$$P(\theta) = |Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta$$

$$\frac{dP(\theta)}{d\theta} = 0 \Rightarrow \frac{3}{4\pi} \sin \theta \cos \theta = 0 \Rightarrow \begin{cases} \cos \theta = 0 \Rightarrow \theta = \frac{\pi}{2} \\ \sin \theta = 0 \Rightarrow \theta = 0, \pi \end{cases}$$



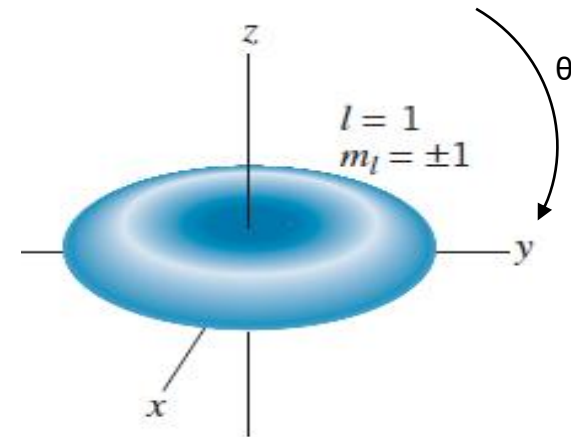
Όμως, όπως διαπιστώνεται σχετικά εύκολα:

$$\left. \frac{d^2 P(\theta)}{d\theta^2} \right|_{\theta=\frac{\pi}{2}} < 0, \quad \left. \frac{d^2 P(\theta)}{d\theta^2} \right|_{\theta=0} > 0, \quad \left. \frac{d^2 P(\theta)}{d\theta^2} \right|_{\theta=\pi} > 0$$

Επομένως μέγιστη πιθανότητα έχουμε για  $\theta = \pi/2$  (στο επίπεδο  $xy$ ), όπως φαίνεται στο Σχήμα.

**Παρατήρηση:** Θα μπορούσαμε να έχουμε χρησιμοποιήσει ισοδύναμα την έκφραση:

$$P(\theta) = |Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{1}{2\pi} |\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)|^2$$



**Παράδειγμα 45: (Λύθηκε και στο Μάθημα)** Θεωρείστε την κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου ( $Z=1$ ) με  $n=2$  και  $\ell=1$ . Να υπολογιστεί η πιθανότητα το ηλεκτρόνιο του ατόμου να βρεθεί σε ένα στοιχείο όγκου με κέντρο σε  $\theta=90^\circ$  και  $\varphi=0^\circ$  και που οριοθετείται μεταξύ  $r=0,49a_0$  και  $r=0,51a_0$ , στοιχειώδη πολική γωνία  $0,11^\circ$  και στοιχειώδη αζιμουθιακή γωνία  $0,25^\circ$ .

**Λύση:** Η πιθανότητα το ηλεκτρόνιο να βρεθεί σε απόσταση  $r \rightarrow r+dr$ ,  $\theta \rightarrow \theta+d\theta$ ,  $\varphi \rightarrow \varphi+d\varphi$  από τον πυρήνα είναι:

$$\wp = |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = \psi(r, \theta, \varphi) \psi^*(r, \theta, \varphi) r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$$

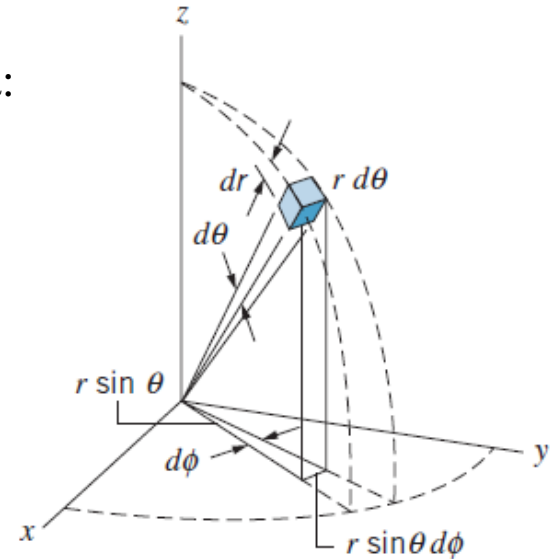
Για  $n=2$  και  $\ell=1$ ,  $m_\ell=0, \pm 1$  και οι δυνατές κυματοσυναρτήσεις είναι:

(α) Για  $n=2$ ,  $\ell=1$ ,  $m_\ell=0$ :

$$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos \theta \Rightarrow$$

$$|\psi_{210}|^2 = \frac{1}{32\pi} \frac{1}{a_0^3} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}} \cos^2 \theta \Rightarrow$$

$$\wp = \frac{1}{32\pi} \frac{1}{a_0^3} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}} \cos^2 \theta r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \xrightarrow{r=0,5a_0, dr=0,02a_0, \theta=90^\circ, \varphi=0^\circ, d\theta=0,11^\circ, d\varphi=0,25^\circ} \wp = 0$$





(β) Για  $n=2$ ,  $\ell=1$ ,  $m_\ell=\pm 1$  :

$$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin\theta e^{\pm i\varphi} \Rightarrow$$

$$|\psi_{21\pm 1}|^2 = \frac{1}{64\pi} \frac{1}{a_0^3} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}} \sin^2\theta \Rightarrow$$

$$\wp = \frac{1}{64\pi} \frac{1}{a_0^3} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}} \sin^2\theta r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi \xrightarrow{r=0,5a_0, dr=0,02a_0, \theta=90^\circ, \varphi=0^\circ, d\theta=0,11^\circ, d\varphi=0,25^\circ}$$

$$\begin{aligned} \wp &= \frac{1}{64\pi} \frac{1}{a_0^3} \left(\frac{0,5a_0}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{0,5a_0}{a_0}} \sin^3\left(\frac{\pi}{2}\right) (0,5a_0)^2 (0,02a_0) (0,00192 \text{ rad}) (0,00436 \text{ rad}) = \\ &= 3,2 \times 10^{-11} \end{aligned}$$

---

## VI . ΜΑΓΝΗΤΙΚΗ ΔΙΠΟΛΙΚΗ ΡΟΠΗ ΤΟΥ ΜΟΝΟΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΟΥ ΑΤΟΜΟΥ

► **Η κλασική εικόνα.** Είναι γνωστό από τον κλασικό Ηλεκτρομαγνητισμό ότι ένας κλειστός βρόγχος που διαρρέεται από συνεχές ρεύμα αναπτύσσει μαγνητικό πεδίο παρόμοιο με αυτό ενός ραβδόμορφου μαγνήτη, όπως φαίνεται στο Σχήμα. Για το λόγο αυτό ονομάζεται και **μαγνητικό δίπολο**.

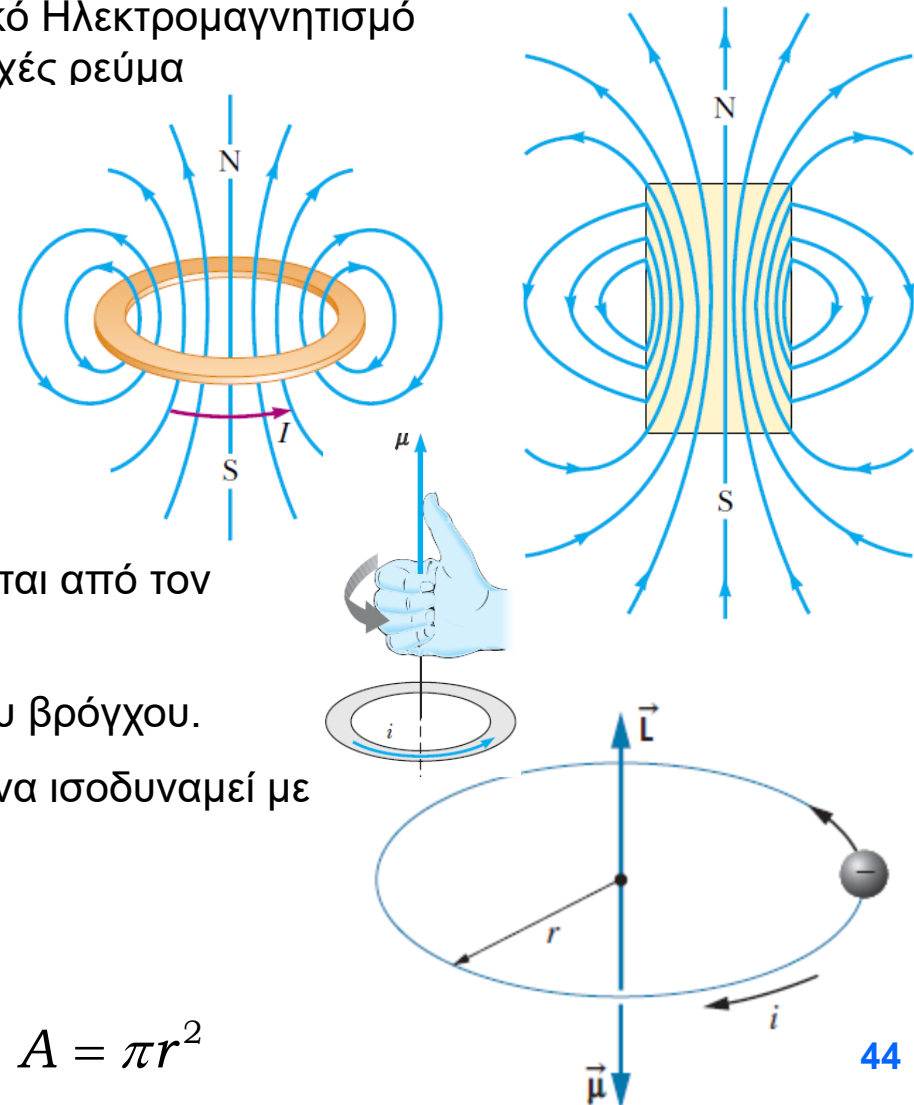
Ένα χαρακτηριστικό μέγεθος ενός μαγνητικού Διπόλου είναι η μαγνητική διπολική ροπή του, που αποτελεί ένα μέτρο του πόσο εύκολα μπορεί να περιστραφεί αυτό σε ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Είναι διανυσματικό μέγεθος με διεύθυνση Κάθετη στο επίπεδο του βρόγχου, φορά που βρίσκεται από τον κανόνα του δεξιόστροφου χεριού και μέτρο:

$$\mu = IA \quad \text{όπου } A \text{ το εμβαδό του βρόγχου.}$$

Το περιστρεφόμενο ηλεκτρόνιο γύρω από τον πυρήνα ισοδυναμεί με βρόγχο ρεύματος εντάσεως:

$$I = \frac{|q_e|}{T}$$

Παράλληλα: 
$$L = m_e v r, \quad v = \frac{2\pi r}{T}, \quad A = \pi r^2$$

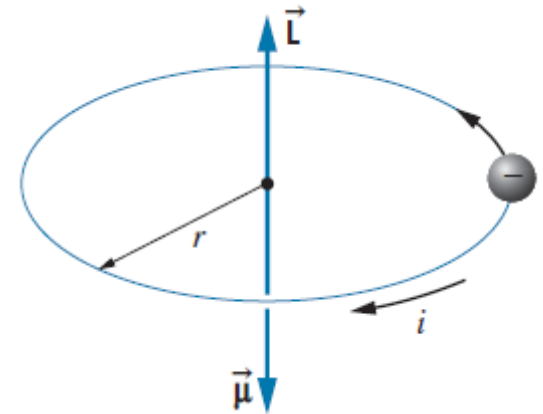


Συνδυάζοντας τις παραπάνω σχέσεις έχουμε για το μέτρο της μαγνητικής διπολικής ροπής του ηλεκτρονίου:

$$\mu = IA = \frac{|q_e|}{T} \frac{LT}{2m_e} \Rightarrow \mu = \frac{|q_e|}{2m_e} L \Rightarrow \frac{\mu}{L} = \frac{|q_e|}{2m_e} \quad \text{Γυρομαγνητικός λόγος}$$

Αφού η φορά κινήσεως του ηλεκτρονίου είναι αντίθετη της συμβατικής φοράς του ρεύματος που αυτή δημιουργεί θα έχουμε σε διανυσματική μορφή ότι:

$$\vec{\mu} = -\frac{|q_e|}{2m_e} \vec{L}$$



► **Η κβαντική εικόνα.** Σύμφωνα με όσα έχουν προαναφερθεί, η στροφορμή του ηλεκτρονίου διαγράφει τον κώνο του Σχήματος περί τον άξονα Z και επομένως η μαγνητική διπολική ροπή του ηλεκτρονίου διαγράφει και αυτή αντίστοιχο κώνο όντας αντιπαράλληλη με τη στροφορμή του. Για να δηλώσουμε ότι η μαγνητική διπολική ροπή του ηλεκτρονίου συνδέεται με την τροχιακή του κίνηση, της επισυνάπτουμε τον δείκτη L, δηλαδή:

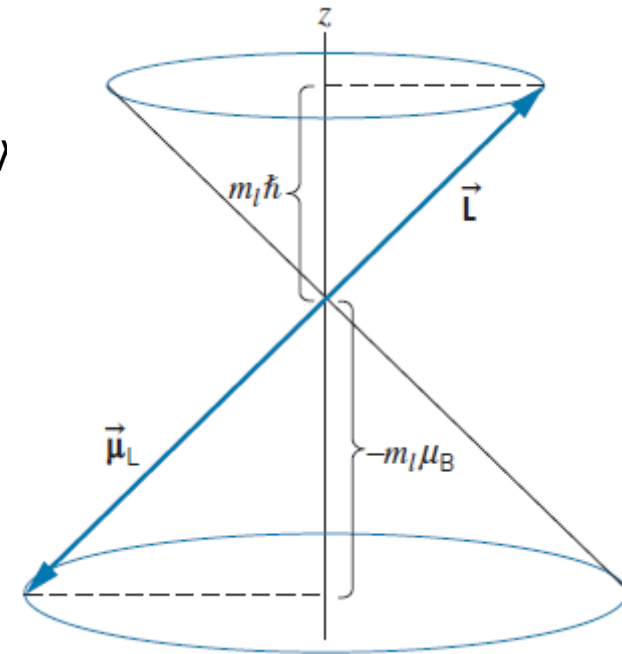
$$\vec{\mu}_L = -\frac{|q_e|}{2m_e} \vec{L}$$

Αφού  $L_z = m_\ell \hbar$  θα έχουμε και ότι:

$$\mu_{L,z} = -\frac{|q_e|}{2m_e} L_z = -\frac{|q_e|}{2m_e} m_\ell \hbar = -m_\ell \mu_B$$

όπου η ποσότητα  $\mu_B$  είναι γνωστή ως μαγνητόνη Bohr (το κβάντο μαγνητικής διπολικής ροπής) με τιμή:

$$\mu_B = \frac{|q_e| \hbar}{2m_e} = 9,274 \times 10^{-24} \text{ J / T}$$



► Η σημασία των μαγνητικών διπολικών ροπών.

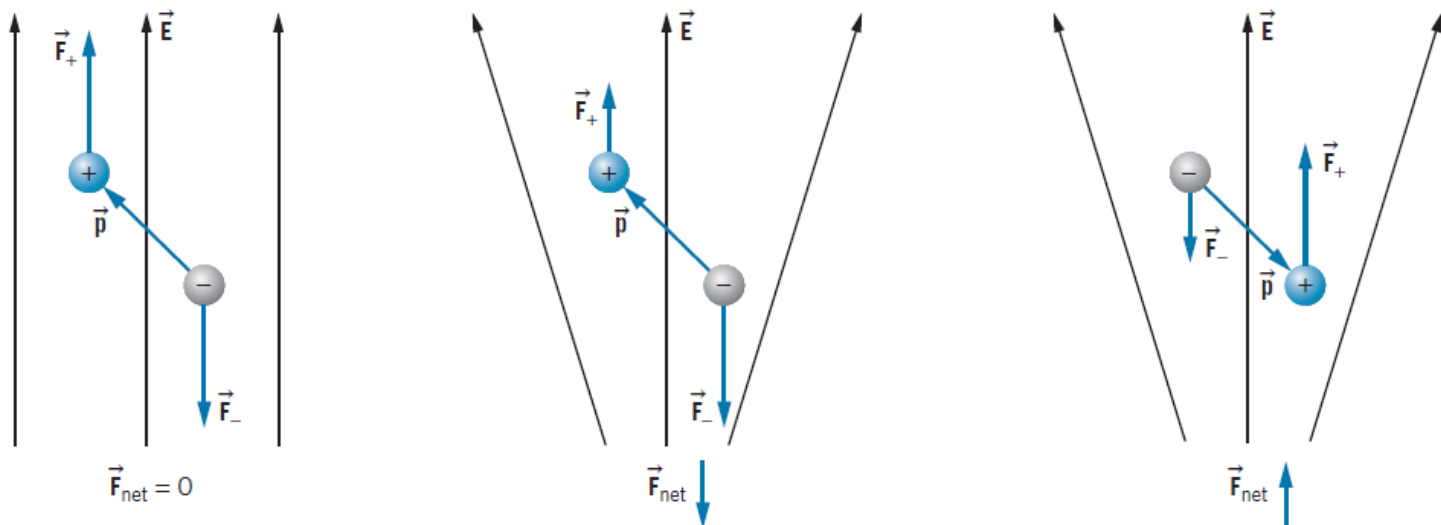
- Όπως είναι γνωστό από τον Ηλεκτρομαγνητισμό, η ηλεκτρική διπολική ροπή ενός ηλεκτρικού διπόλου αποτελεί ένα μέτρο του πόσο εύκολα μπορεί να στραφεί ένα ηλεκτρικό δίπολο μέσα σε ένα εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο και να παραλληλιστεί με τις δυναμικές γραμμές του. Εάν το ηλεκτρικό πεδίο είναι ομογενές, η συνισταμένη δύναμη είναι μηδέν και έχουμε μόνο περιστροφή του διπόλου, μέσω της μηχανικής ροπής ζεύγους δυνάμεων:

$$\vec{\tau} = \vec{p} \times \vec{E}$$

Εάν είναι ανομοιογενές έχουμε και καθαρή μετατόπιση μαζί με περιστροφή του διπόλου.

Σε κάθε περίπτωση η δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης ηλεκτρικού πεδίου-διπόλου είναι:

$$U = -\vec{p} \cdot \vec{E}$$



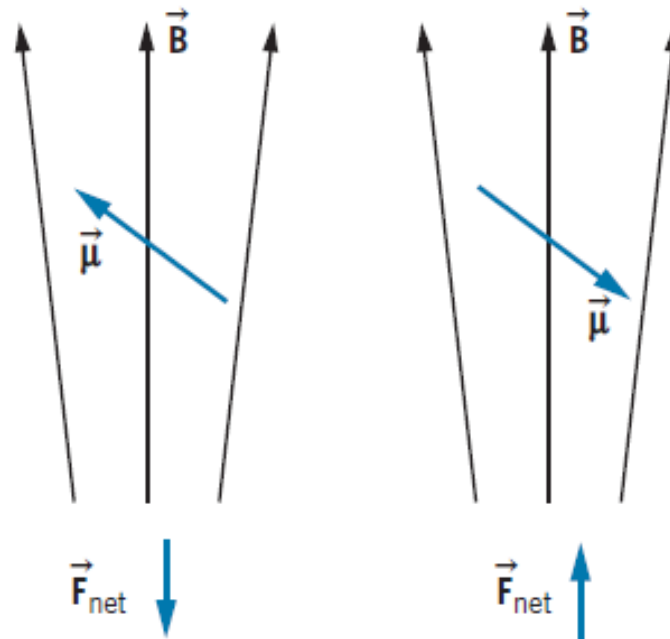
- Κατ' αναλογία η μαγνητική διπολική ροπή καθορίζει τη συμπεριφορά ενός μαγνητικού διπόλου σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Εάν το μαγνητικό πεδίο είναι ομογενές, η συνισταμένη δύναμη είναι μηδέν και έχουμε μόνο περιστροφή του διπόλου, μέσω της μηχανικής ροπής ζεύγους δυνάμεων:

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

Εάν είναι ανομοιογενές έχουμε και καθαρή μετατόπιση μαζί με περιστροφή του διπόλου.

Σε κάθε περίπτωση η δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης μαγνητικού πεδίου-διπόλου είναι:

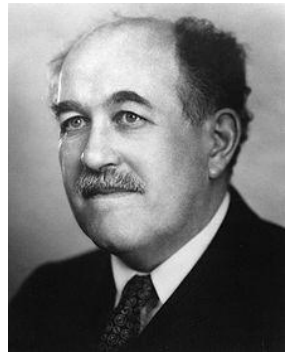
$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$





## VII. ΤΟ SPIN: Η ΚΑΘΑΡΑ ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΣΤΡΟΦΟΡΜΗ – Η ΟΛΙΚΗ ΣΤΡΟΦΟΡΜΗ ΤΟΥ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΟΥ

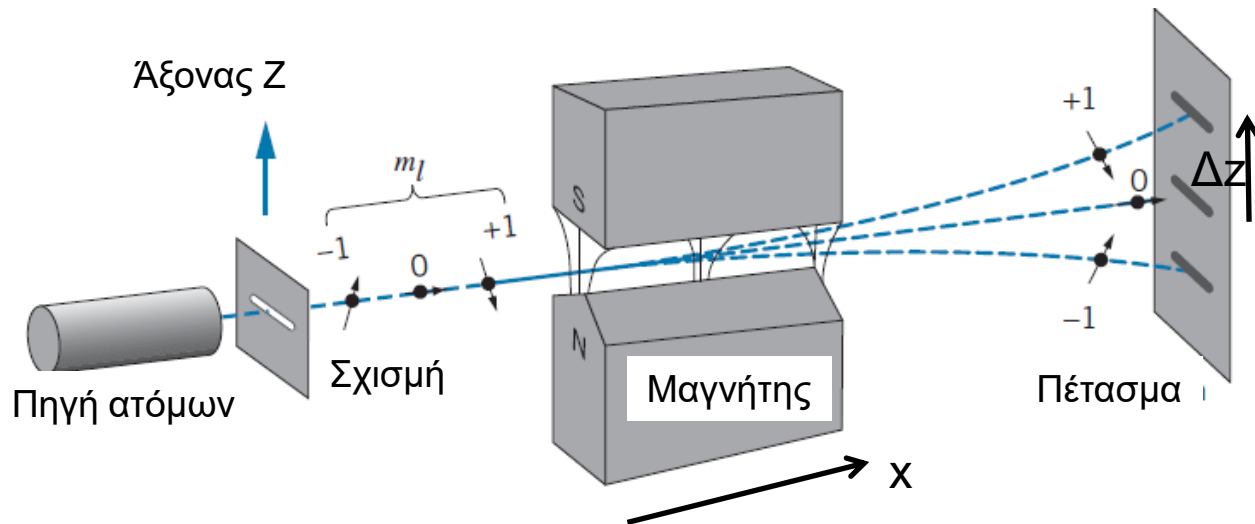
### (α) Το πείραμα των Stern-Gerlach (1921).



Otto Stern  
(1888 – 1969)



Walther  
Gerlach  
(1889 – 1979)



- Μονοηλεκτρονιακά άτομα που βρίσκονται σε ίσους αριθμούς στις καταστάσεις με  $n=2, \ell=1, m_\ell = 0, \pm 1$  διέρχονται με ταχύτητα  $u$  μέσα από ανομοιογενές κατά τον άξονα  $Z$  μαγνητικό πεδίο και προσπίπτουν σε πέτασμα αφήνοντας ίχνος. Η έκταση του μαγνητικού πεδίου στον άξονα  $X$  είναι  $x$ . Η δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης των ατόμων με το μαγνητικό πεδίο θα είναι:

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_{L,z} B_Z$$

Άρα:

$$F_Z = -\frac{dU}{dz} = \mu_{L,z} \frac{dB_Z}{dz}$$

$$a_z = \frac{F_Z}{m_{at}} = \frac{\mu_{L,z}}{m_{at}} \frac{dB_Z}{dz} \Rightarrow \Delta z = \frac{1}{2} \frac{\mu_{L,z}}{m_{at}} \frac{dB_Z}{dz} t^2, \quad t = \frac{x}{u}$$

Τα άτομα με  $m_\ell = 0$  ( $\mu_{Lz} = 0$ ) δεν αναμένεται να εκτραπούν. Θα εκτραπούν αυτά με  $m_\ell = +1$  ( $\mu_{Lz} = -\mu_B$ ) και  $m_\ell = -1$  ( $\mu_{Lz} = \mu_B$ ) συμμετρικά ως προς τον άξονα X. Άρα αναμένουμε τρία ίχνη στο πέτασμα. Το πείραμα με μονοηλεκτρονιακά άτομα στην πρώτη διεγερμένη κατάσταση δεν είναι εύκολο (ή ρεαλιστικό) δεδομένου ότι αυτή, όπως έχουμε πεί είναι πολύ βραχύβια ( $10^{-8}$  sec)

- Πιο ρεαλιστικό είναι το να επαναλάβουμε το πείραμα με άτομα στην κατάσταση  $n=1, \ell=0, m_\ell = 0$ . Θα αναμένουμε 1 ίχνος στο πέτασμα.

- Πειράματα αυτού του τύπου αποδεικνύουν την κβάντωση της κατεύθυνσης της στροφορμής στον χώρο. Τα πειραματικά αποτελέσματα όμως εμφανίζουν κάτι μη αναμενόμενο:

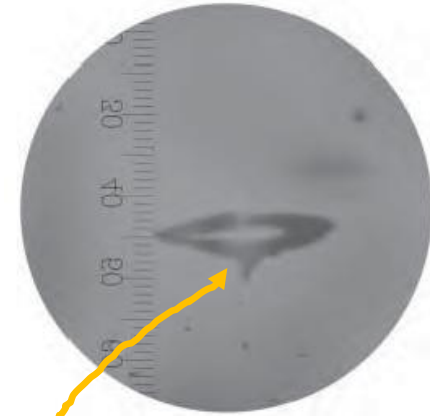
α) Στην ρεαλιστική περίπτωση  $n=1, \ell=0, m_\ell = 0$  σε αντίθεση με το αναμενόμενο μοναδικό ίχνος θα παρατηρήσουμε 2 ίχνη συμμετρικά ως προς τον άξονα X !!

α) Στην υποθετική περίπτωση  $n=2, \ell=1, m_\ell = 0, \pm 1$  σε αντίθεση με τα αναμενόμενα τρία ίχνη θα παρατηρούσαμε στο πέτασμα 6 ίχνη.

**Γενικά, ενώ περιμένουμε περιττό αριθμό ιχνών [ $2\ell+1$ - όσες και οι τιμές του  $m_\ell$  για κάθε  $\ell$ ], πάντα παίρνουμε άρτιο και μάλιστα τον διπλάσιο!!**

**Ιστορική Σημείωση:** Οι Stern-Gerlach πραγματοποίησαν το πείραμα χρησιμοποιώντας άτομα αργύρου στη θεμελιώδη τους κατάσταση. Παρά το ότι ο άργυρος είναι πολυηλεκτρονιακό άτομο, η τιμή του  $\ell$  στη θεμελιώδη του κατάσταση είναι μηδέν. Επομένως αναμένονταν ένα ίχνος. Αντ' αυτού παρατηρούνται δύο (Σχήμα). Τα δύο ίχνη είναι συμμετρικά ως προς τον άξονα  $X$  και αναμένεται να απέχουν μεταξύ τους απόσταση  $d=2\Delta z$ . Οι παράμετροι του πειράματος ήταν:  $dBz/dz = 1,4T/mm$ ,  $x = 3,5 \text{ cm}$ ,  $v = 750 \text{ m/s}$ . Η μάζα του ατόμου του αργύρου είναι :  $m_{Ag} = 1,8 \times 10^{-25} \text{ kg}$ . Επομένως:

$$d=0,16\text{mm}$$



Εικόνα για  $B \neq 0$

Το πείραμα επαναλήφθηκε το 1927 από τους Phipps και Taylor με άτομα υδρογόνου στη θεμελιώδη κατάσταση  $n=1, \ell=0, m_\ell = 0$ . Πάλι εμφανίστηκαν στο πέτασμα δύο ίχνη. Το αποτέλεσμα είναι ανεξάρτητο του ατόμου.

• Το αποτέλεσμα ερμηνεύεται με δύο τρόπους:

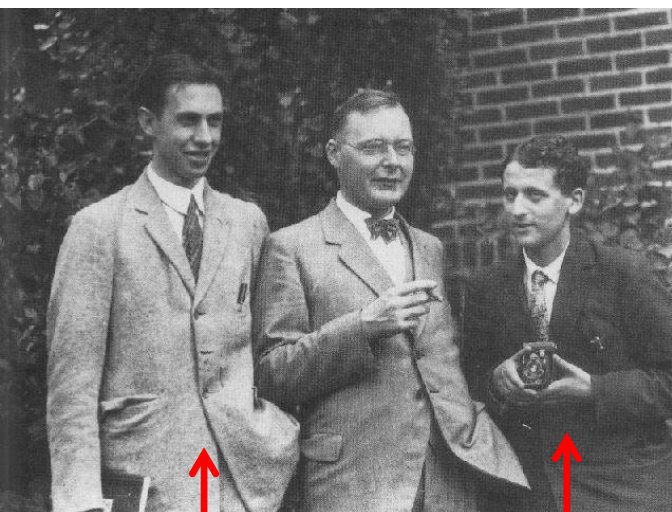
A) Ή θα δεχθούμε την ύπαρξη και ημιακέραιων τιμών για το  $\ell$  [π.χ εάν για  $n=1$  ήταν δυνατό το  $\ell=1/2$  τότε μπορούμε να αναμένουμε  $2 \times (1/2) + 1 = 2$  ίχνη]. Κάτι τέτοιο όμως δεν προβλέπεται από την επίλυση της εξίσωσης Schrödinger για τα μονοηλεκτρονιακά άτομα.

B) Ή θα δεχθούμε ότι υπάρχει και άλλη κρυφή συνεισφορά στην στροφορμή του ηλεκτρονίου που δεν προβλέπεται από την επίλυση της εξίσωσης Schrödinger και οδηγεί σε ημιακέραιες τιμές της ολικής στροφορμής του.

Από πού όμως μπορεί να προέρχεται;

**(β) Η εισαγωγή της ιδιοστροφομής (spin) του ηλεκτρονίου.**

Το αποτέλεσμα του πειράματος Stern-Gerlach ερμηνεύτηκε το 1925 από τους Uhlenbeck και Goudsmit αποδίδοντας στο ηλεκτρόνιο **μία ενδογενή ιδιότητα** που ονομάστηκε **ιδιοπεριστροφή (spin)**. Η κλασική αναπαράσταση θέλει το ηλεκτρόνιο να περιστρέφεται γύρω από τον εαυτό του, περιστρεφόμενο ταυτόχρονα γύρω από τον πυρήνα, όπως ένας πλανήτης γύρω από τον ήλιο. Το μέτρο του spin του ηλεκτρονίου είναι:



George Eugene Uhlenbeck  
(1900 – 1988)

Samuel Abraham Goudsmit  
(1902 – 1978)

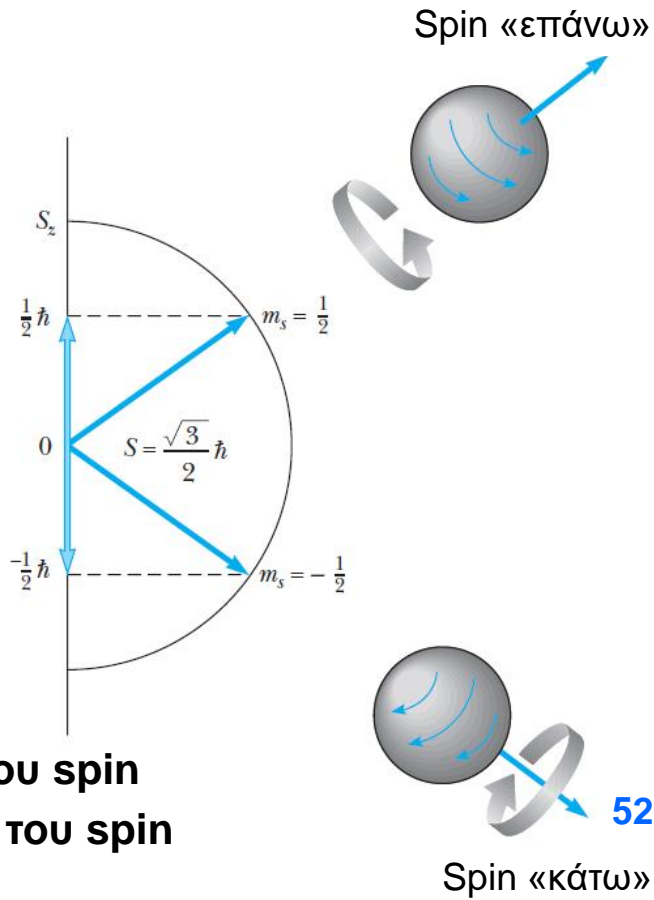
$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad , \quad s = \frac{1}{2}$$

Η προβολή του στον άξονα Z παίρνει μόνο τις τιμές:

$$S_z = m_s \hbar$$

$$m_s = \pm s = \pm \frac{1}{2}$$

Κβαντικός αριθμός του spin  
Μαγνητικός κβαντικός αριθμός του spin



- Παρατηρούμε ότι το μέτρο της ιδιοπεριστροφής του ηλεκτρονίου είναι σταθερό (σε αντίθεση με την τροχιακή του στροφορμή), δεδομένου ότι  $s=1/2$  :

$$S = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

Λέμε συνήθως ότι «το ηλεκτρόνιο έχει spin 1/2».

- Παρά το ότι το spin έχει όλα τα χαρακτηριστικά της στροφορμής, και η κλασική εικόνα βοηθά στην απεικόνιση της συνολικής εικόνας του ηλεκτρονίου, δεν είναι δυνατόν να δεχθούμε ότι αντιπροσωπεύει ιδιοπεριστροφή του ηλεκτρονίου γιατί:

α) Το ηλεκτρόνιο είναι σημειακό φορτίο χωρίς κατανομή φορτίου στον όγκο του. Εάν ίσχυε κάτι τέτοιο θα αποτελούσαν από σύνολο στοιχειδών φορτίων  $\Delta q$  και μάζας  $\Delta m$  με  $\Delta q / \Delta m = \text{σταθερό}$ . Η περιστροφή κάθε στοιχειώδους φορτίου θα δημιουργούσε στοιχειώδη μαγνητική διπολική ροπή

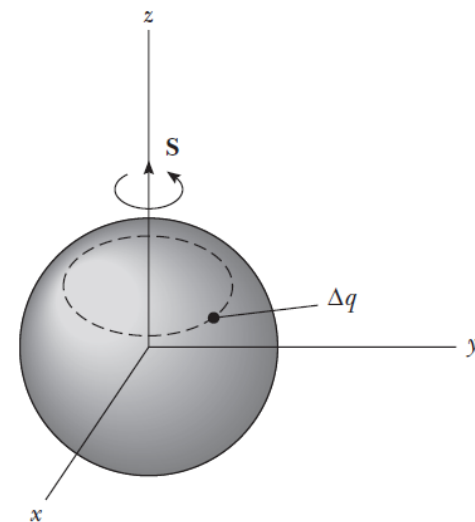
$$\Delta \vec{\mu}_S = -\frac{|\Delta q|}{2\Delta m} \Delta \vec{S} = -\frac{|q_e|}{2m_e} \Delta \vec{S}$$

Άρα:

$$\vec{\mu}_S = \sum_i \Delta \vec{\mu}_{Si} = -\frac{|q_e|}{2m_e} \vec{S}$$

Το πείραμα, όμως, δείχνει διπλάσια μαγνητική διπολική ροπή λόγω spin (μαγνητική ανωμαλία του spin).

β) Κατά τις συγκρούσεις του με άλλα σωματίδια θα διεγείρονταν σε καταστάσεις υψηλότερης ιδιοστροφορμής. Κάτι τέτοιο όμως δεν παρατηρείται. Και σε αυτές τις περιπτώσεις έχουμε πάντα  $s=1/2$ .



**Παράδειγμα 46: (Λύθηκε και στο Μάθημα)** Θεωρώντας το ηλεκτρόνιο όχι σαν σημειακό φορτίο, αλλά σαν ένα ομοιόμορφα φορτισμένο σφαιρίδιο ακτίνας  $r = 5 \times 10^{-17} \text{m}$  και το spin του σαν ιδιοπεριστροφή του ηλεκτρονίου να υπολογίσετε την ταχύτητα περιστροφής ενός σημείου του «ισημερινού» του. Θεωρείστε γνωστό ότι η ροπή αδρανείας μίας συμπαγούς σφαίρας που περιστρέφεται περί άξονα που διέρχεται από το κέντρο της είναι:  $I = (2/5) mr^2$ .

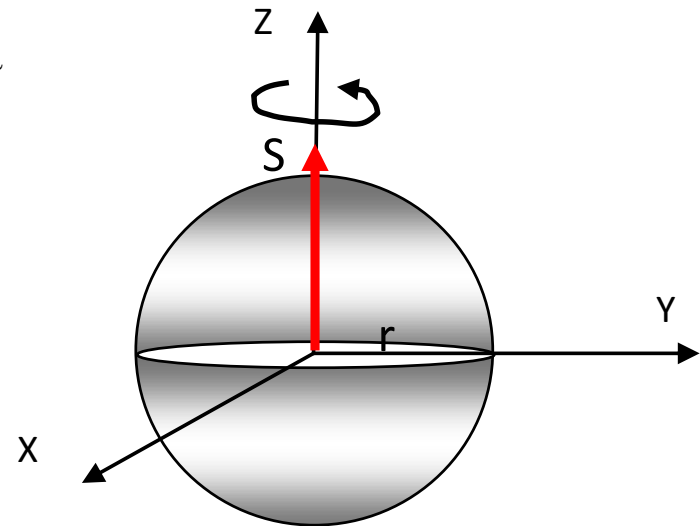
**Λύση:** Η ιδιοστροφομή (spin) του ηλεκτρονίου έχει μέτρο:

$$S = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

Θα ισχύει ότι:

$$S = I\omega \Rightarrow \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar = \frac{2}{5} m_e r^2 \frac{v}{r} \Rightarrow$$

$$v = \frac{5\sqrt{3}}{4} \frac{\hbar}{m_e r} = \frac{(5\sqrt{3})(1,05 \times 10^{-34} \text{ Js})}{4(9,11 \times 10^{-31} \text{ Kgr})(5 \times 10^{-17} \text{ m})} \approx 5,01 \times 10^{12} \frac{\text{m}}{\text{s}} = 1,67 \times 10^4 c!!!!$$



Κατά συνέπεια είναι αδύνατον το spin να αποτελεί πραγματικά ιδιοπεριστροφή του ηλεκτρονίου.

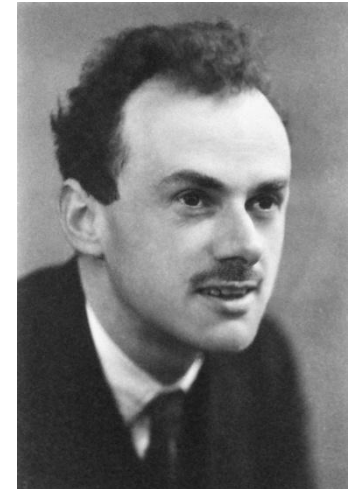
**(γ) Το spin και η Σχετικιστική Κβαντομηχανική (1929).**

Η εξίσωση Schrödinger αφορά στη διαπραγμάτευση μη σχετικιστικών μικροσκοπικών συστημάτων. Ο Dirac το 1929 θα θεμελιώσει τη Σχετικιστική Κβαντομηχανική συνδυάζοντας την Ειδική Θεωρία της Σχετικότητας με την Κβαντομηχανική. Στα πλαίσια αυτής της θεμελίωσης η εξίσωση Schrödinger αντικαθίσταται από την ομώνυμη **εξίσωση Dirac από την επίλυση της οποίας αναδύεται αβίαστα το spin ως ενδογενής ιδιότητα των σωματιδίων χωρίς κλασικό ανάλογο.**

Στα πλαίσια αυτής της διαπραγμάτευσης αναδεικνύεται ότι η «ιδιοπεριστροφή» του ηλεκτρονίου οδηγεί σε μία επιπλέον συνιστώσα μαγνητικής διπολικής ροπής, της μαγνητικής διπολικής ροπής του spin:

$$\vec{\mu}_S = -\frac{|q_e|}{m_e} \vec{S}$$

$$\mu_{S,z} = -2\mu_B m_S = \pm \mu_B$$



Paul Adrien Maurice Dirac  
(1902-1984)

- Στην πραγματικότητα το spin είναι μία ενδογενής ιδιότητα του ηλεκτρονίου χωρίς κλασικό ανάλογο που παίζει καθοριστικό ρόλο στην αλληλεπίδρασή του με εξωτερικά μαγνητικά πεδία.
- Spin έχουν όλα τα σωματίδια. Το πρωτόνιο έχει  $s=1/2$ . Το νετρόνιο έχει επίσης  $s=1/2$ . Το φωτόνιο έχει  $s=1$ .

- Η συνολική μαγνητική διπολική ροπή του μονοηλεκτρονιακού ατόμου θα είναι:

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S \Rightarrow \vec{\mu} = -\frac{|q_e|}{2m_e} (\vec{L} + 2\vec{S})$$

$$\mu_z = \mu_{L,z} + \mu_{S,z} = -(m_\ell \mu_B + 2\mu_B m_s) \rightarrow \pm \mu_B$$

- Στο πείραμα Stern-Gerlach το άτομο αλληλεπιδρά με το μαγνητικό πεδίο μέσω της συνολικής μαγνητικής διπολικής ροπής του.

A) Για πρόσπτωση μονοηλεκτρονιακού ατόμου στη θεμελιώδη του κατάσταση ( $n=1$ ) θα έχουμε ότι:  $\ell=0$  και  $m_\ell=0$ . Όμως  $m_s=\pm 1/2$ . Επομένως  $\mu_z=\pm \mu_B$  και αναμένουμε **δύο** ίχνη (κανένα κεντρικό) στο πέτασμα αντί για ένα.

B) Για πρόσπτωση μονοηλεκτρονιακού ατόμου στην πρώτη διεγερμένη του κατάσταση με  $n=2, \ell=1, m_\ell=0, \pm 1$  θα έχουμε ότι:

$\ell=1$  και  $m_\ell=-1, 0, 1$ . Όμως  $m_s=\pm 1/2$ . Επομένως  $\mu_z=\pm \mu_B, \pm 2\mu_B, 0$  (κεντρικό),  $0$  (κεντρικό) και αναμένουμε **έξι** ίχνη στο πέτασμα αντί για τρία (το κεντρικό θα ήταν διπλάσιου πάχους από αυτό που θα παρατηρούσαμε εάν αγνοούσαμε το spin).



**(δ) Η συνολική στροφορμή του ηλεκτρονίου – Σύνθεση Στροφορμών.**

Το spin παρουσιάζει όλα τα χαρακτηριστικά στροφορμής (χωρίς να δεχόμαστε ως πειστική εξήγηση κάποια ιδιοπεριστροφή του ηλεκτρονίου). Το γεγονός αυτό, όμως, μας επιτρέπει να ορίσουμε «ολική στροφορμή» για το ηλεκτρόνιο συνθέτοντας την γνωστή τροχιακή στροφορμή του με το spin. Αποδεικνύεται ότι η ολική στροφορμή του ηλεκτρονίου ενός μονοηλεκτρονιακού ατόμου δίνεται από την έκφραση:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

με:

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

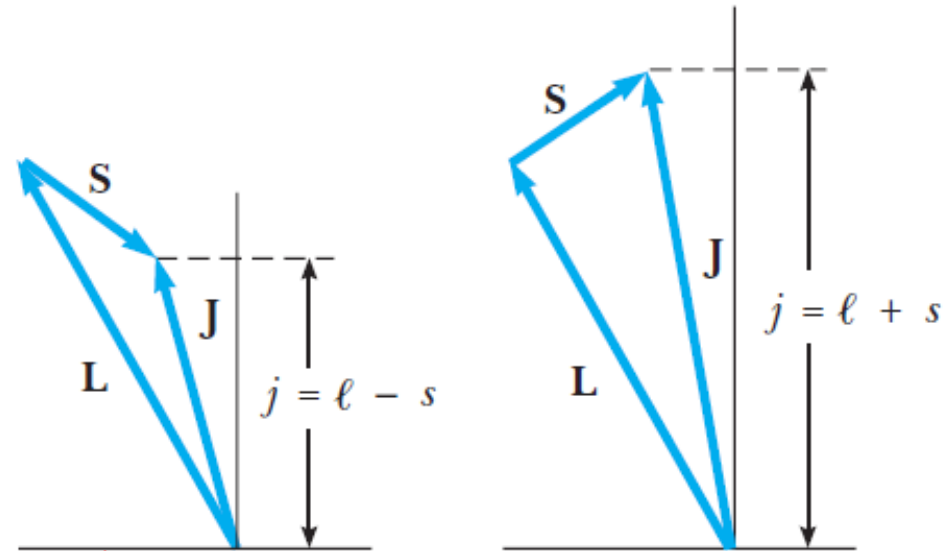
$$j = \ell + s, \ell + s - 1, \dots, |\ell - s|$$

(Κβαντικός αριθμός της ολικής στροφορμής)

$$m_j = -j, -(j-1), \dots, 0, \dots, (j-1), j$$

(Μαγνητικός κβαντικός αριθμός της ολικής στροφορμής)

Θεωρώντας κατ' αρχήν ανεξάρτητη τροχιακή περιστροφή και «ιδιοπεριστροφή» του ηλεκτρονίου έχουμε τα διπλανά αντιπροσωπευτικά διανυσματικά διαγράμματα με τη συνολική στροφορμή να διαγράφει κώνο περί τον άξονα Z.



Π.χ. για  $\ell=1$  και  $s=1/2$  θα έχουμε ότι  $j=3/2$  και  $j=1/2$ .

• Για  $j=3/2$  θα έχουμε:

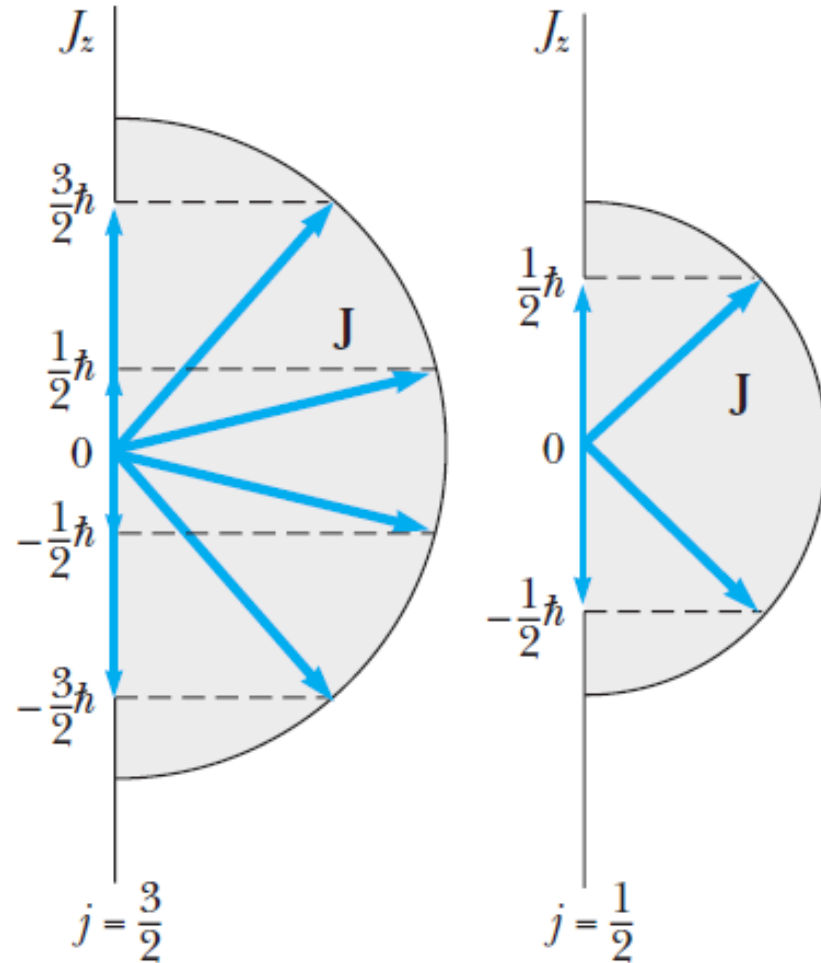
$$J = \sqrt{\frac{3}{2} \left(\frac{3}{2} + 1\right) \hbar} = \frac{\sqrt{15}}{2} \hbar$$

$$J_z = -\frac{3}{2} \hbar, -\frac{1}{2} \hbar, \frac{1}{2} \hbar, \frac{3}{2} \hbar$$

• Για  $j=1/2$  θα έχουμε:

$$J = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1\right) \hbar} = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

$$J_z = -\frac{1}{2} \hbar, \frac{1}{2} \hbar$$



**Ενώ για την τροχιακή στροφορμή έχουμε πάντα περιττό  $[2\ell+1]$  αριθμό προβολών στον άξονα  $Z$  για την ολική στροφορμή έχουμε πάντα άρτιο !**



**(ε) Εκφυλισμός λόγω spin.** Η ύπαρξη του spin αυξάνει το πλήθος των εκφυλισμένων καταστάσεων του ηλεκτρονίου σε κάθε ενέργειά του στο μονοηλεκτρονιακό άτομο.

n	l	$m_l$	$m_s$	Καταστάσεις για κάθε l	Συνολικές Καταστάσεις σε φλοιό				
1	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	2 (K)				
2	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	8 (L)				
						1	-1	$\pm \frac{1}{2}$	6
	0	$\pm \frac{1}{2}$							
1	$\pm \frac{1}{2}$	6							
3	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	18 (M)				
						1	-1	$\pm \frac{1}{2}$	6
	1	$\pm \frac{1}{2}$	6						
	2	-2	$\pm \frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}$		10			
							-1	$\pm \frac{1}{2}$	
0					$\pm \frac{1}{2}$				
1					$\pm \frac{1}{2}$				
2	$\pm \frac{1}{2}$								

Η ύπαρξη του spin δεν επηρεάζει σημαντικά την ενέργεια του ηλεκτρονίου που εξακολουθεί να καθορίζεται από τον κύριο κβαντικό αριθμό n.

## ΤΙ ΝΑ ΔΙΑΒΑΣΕΤΕ ΠΡΟΣΕΚΤΙΚΑ

Η ύλη της Ενότητας αυτής βρίσκεται στον Krane [σελ. 262-282] και στον Serway [σελ. 231-248]. Διαβάστε κυρίως από τον παρόντα Οδηγό Μελέτης.

Δεν χρειάζεται να ξέρετε να κατασκευάζεται τις κυματοσυναρτήσεις. Θα σας δίνονται έτοιμες. Κοιτάξτε τις σχετικές εφαρμογές των σελίδων 13-18 της παρούσας Ενότητας του Οδηγού Μελέτης εάν θέλετε (απλά για να δελιτε πως κατασκευάζονται).