ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ
Εθνικόν και Καποδιστριακόν
Πανεπιστήμιον Αθηνών

Κβαντική Μηχανική ΙΙ

Ενότητα 5: Κεντρικά Δυναμικά

Αθανάσιος Λαχανάς
Σχολή Θετικών Επιστημών
Τμήμα Φυσικής

Περιεχόμενα 5ης ενότητας

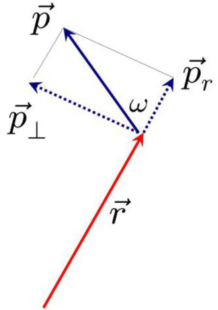
Κίνηση σε δυναμικό - Κεντρικά δυναμικά

Κλασική κίνηση

Η Χαμιλτωνιανή για κίνηση σε δυναμικό $V(\vec{r})$

$$H_{clas} = \frac{1}{2\mu}\vec{p}^{\,2} + V(\vec{r})$$

Η ορμή αναλύεται σε παράλληλη και κάθετη συνιστώσα ως προς το άνυσμα κίνησης



$$\vec{p}^{\,2} = \vec{p}_\perp^{\,2} + \vec{p}_r^{\,2}$$

$$\vec{p}_\perp^{\,2} = \vec{p}^{\,2}\, sin^2\omega$$

$$\Rightarrow$$

$$\vec{p}_\perp^{\,2} = \frac{\vec{L}^2}{r^2}$$

$$H_{cl} = \frac{1}{2\mu}\left(p_r^2 + \frac{\vec{L}^2}{r^2}\right) + V(\vec{r})$$

- Για "κεντρικό" δυναμικό $V(\vec{r}) = V(r) \Longrightarrow$

$$\{H_{cl}\,,\,L_i\} = 0 \Longrightarrow \{H_{cl}\,,\,\vec{L}^2\} = 0$$

- Η τροχιακή στροφορμή διατηρείται $\vec{L}$

$$\vec{L} = \sigma\tau\alpha\theta\epsilon\rho\alpha$$

- Η κίνηση γίνεται σε επίπεδο κάθετο στην τροχιακή στροφορμή.

$$H_{cl} = \frac{1}{2\,\mu}\left(p_r^2 + \frac{\vec{L}^2}{r^2}\right) + V(\vec{r})$$

- Για ¨κεντρικό¨ δυναμικό : $V(\vec{r}) = V(r) \implies$

$$\{\, H_{cl} \,,\, L_i \,\} = 0 \implies \{\, H_{cl} \,,\, \vec{L}^2 \,\} = 0$$

- Η τροχιακή στροφορμή διατηρείται $\vec{L}$

$$\vec{L} = \sigma\tau\alpha\theta\epsilon\rho\alpha$$

- Η κίνηση γίνεται σε επίπεδο κάθετο στην τροχιακή στροφορμή.

$$H_{cl} = \frac{1}{2\,\mu}\left(p_r^2 + \frac{\vec{L}^2}{r^2}\right) + V(\vec{r})$$

⇝ **Για ¨κεντρικό¨ δυναμικό :** $V(\vec{r}) = V(r) \Longrightarrow$

$$\{\, H_{cl} \,,\, L_i \,\} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \{\, H_{cl} \,,\, \vec{L}^2 \,\} = 0$$

⇝ **Η τροχιακή στροφορμή διατηρείται** $\vec{L}$

$$\vec{L} = \sigma\tau\alpha\theta\epsilon\varrho\alpha$$

⇝ **Η κίνηση γίνεται σε επίπεδο κάθετο στην τροχιακή στροφορμή.**

$$H_{cl} = \frac{1}{2\,\mu}\left(p_r^2 + \frac{\vec{L}^2}{r^2}\right) + V(\vec{r})$$

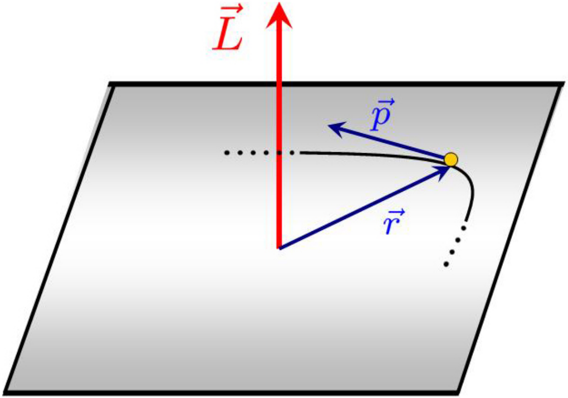
- Για "κεντρικό" δυναμικό : $V(\vec{r}) = V(r) \Longrightarrow$

$$\{\, H_{cl}\,,\, L_i \,\} = 0 \Longrightarrow \{\, H_{cl}\,,\, \vec{L}^2 \,\} = 0$$

- Η τροχιακή στροφορμή διατηρείται $\vec{L}$

$$\vec{L} = \sigma\tau\alpha\theta\varepsilon\rho\alpha$$

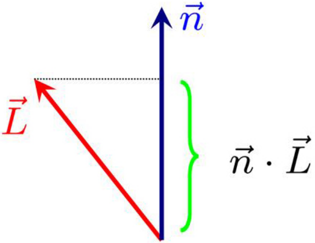
- Η κίνηση γίνεται σε επίπεδο κάθετο στην τροχιακή στροφορμή.


$\vec{L}$
$\vec{p}$
$\vec{r}$

Αν το δυναμικό (σύστημα) είναι συμμετρικό σε περιστροφή γύρω από έναν άξονα $\vec{n}$

$$\{ H_{cl} \, , \, \vec{n} \cdot \vec{L} \} = 0$$

Διατηρείται η προβολή της τροχιακής στροφορμής στον άξονα $\vec{n}$



Κβαντική κίνηση

- Το κβαντικό ανάλογο της κλασικής ακτινικής ορμής $p_r = \vec{p}\cdot\vec{r}/r$ είναι ο Ερμιτιανός τελεστής

$$\hat{p}_r \equiv \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbb{p}}\cdot\frac{\hat{\mathbb{r}}}{r} + \frac{\hat{\mathbb{r}}}{r}\cdot\hat{\mathbb{p}}\right)$$

- Μπορεί να αποδειχθεί (άσκηση !) ότι σε σφαιρικές συντεταγμένες παίρνει την μορφή

$$\hat{p}_r = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$$

Ενώ το τετράγωνο αυτού εύκολα βρίσκεται ότι έχει την ακόλουθη μορφή

$$\hat{p}_r^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) = -\hbar^2\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\,r\right)$$

Η δεύτερη γραφή είναι ισοδύναμη με την πρώτη (αποδείξτε το !)

- **Επομένως το τετράγωνο του τελεστή της ορμής όπως έχει δοθεί στο προηγούμενο κεφάλαιο (σύγκρινε με την έκφραση της σελίδας 114) είναι**

$$\hat{\mathbb{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\mathbb{L}}^2}{r^2}$$

Κβαντική κίνηση

- Το κβαντικό ανάλογο της κλασικής ακτινικής ορμής $p_r = \vec{p}\cdot\vec{r}/r$ είναι ο Ερμιτιανός τελεστής

$$\hat{p}_r \equiv \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbb{p}}\cdot\frac{\hat{\mathbb{r}}}{r} + \frac{\hat{\mathbb{r}}}{r}\cdot\hat{\mathbb{p}}\right)$$

- Μπορεί να αποδειχθεί (άσκηση !) ότι σε σφαιρικές συντεταγμένες παίρνει την μορφή

$$\hat{p}_r = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$$

Ενώ το τετράγωνο αυτού εύκολα βρίσκεται ότι έχει την ακόλουθη μορφή

$$\hat{p}_r^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) = -\hbar^2\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\,r\right)$$

Η δεύτερη γραφή είναι ισοδύναμη με την πρώτη (αποδείξτε το !)

- Επομένως το τετράγωνο του τελεστή της ορμής όπως έχει δοθεί στο προηγούμενο κεφάλαιο (σύγκρινε με την έκφραση της σελίδας 114) είναι

$$\hat{\mathbb{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\mathbb{L}}^2}{r^2}$$

Κβαντική κίνηση

- Το κβαντικό ανάλογο της κλασικής ακτινικής ορμής $p_r = \vec{p}\cdot\vec{r}/r$ είναι ο Ερμιτιανός τελεστής

$$\hat{p}_r \equiv \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbb{p}}\cdot\frac{\hat{\mathbb{r}}}{r} + \frac{\hat{\mathbb{r}}}{r}\cdot\hat{\mathbb{p}}\right)$$

- Μπορεί να αποδειχθεί (άσκηση !) ότι σε σφαιρικές συντεταγμένες παίρνει την μορφή

$$\hat{p}_r = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$$

Ενώ το τετράγωνο αυτού εύκολα βρίσκεται ότι έχει την ακόλουθη μορφή

$$\hat{p}_r^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) = -\hbar^2\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\,r\right)$$

Η δεύτερη γραφή είναι ισοδύναμη με την πρώτη (αποδείξτε το !)

- **Επομένως το τετράγωνο του τελεστή της ορμής όπως έχει δοθεί στο προηγούμενο κεφάλαιο (σύγκρινε με την έκφραση της σελίδας 114) είναι**

$$\hat{\mathbb{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\mathbb{L}}^2}{r^2}$$

- **Η Κβαντική Χαμιλτωνιανή είναι**

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\,\hat{\mathbb{p}}^2 + V(\hat{\mathbb{r}}) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})$$

- και σύμφωνα με τα προηγούμενα μπορεί να τεθεί στην μορφή

$$\Longrightarrow \qquad \hat{H} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\mathbb{L}}^2}{r^2}\right) + V(\vec{r})$$

Παρατηρούμε ότι η Κβαντική Χαμιλτωνιανή μπορεί να γραφεί σε μορφή ανάλογη της κλασικής Χαμιλτωνιανής της σελίδας 129 !

- **Η Κβαντική Χαμιλτωνιανή είναι**

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\,\hat{\mathbb{p}}^2 + V(\hat{\mathbb{r}}) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})$$

- **και σύμφωνα με τα προηγούμενα μπορεί να τεθεί στην μορφή**

$$\Longrightarrow \qquad \hat{H} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\mathbb{L}}^2}{r^2}\right) + V(\vec{r})$$

Παρατηρούμε ότι η Κβαντική Χαμιλτωνιανή μπορεί να γραφεί σε μορφή ανάλογη της κλασικής Χαμιλτωνιανής της σελίδας 129 !

- **Για κεντρικό δυναμικό η Χαμιλτωνιανή μετατίθεται με την στροφορμή**

$$\left[\,\hat{H}\,,\,\hat{L}_k\,\right] = 0 \quad , \quad \gamma\iota\alpha \quad k = x, y, z$$

- Οι τελεστές $\hat{H}$, $\hat{\mathbb{L}}^2$ και μόνο μία συνιστώσα, έστω η $\hat{L}_z$ μετατίθενται

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{\mathbb{L}}^2\right] = \left[\hat{H}\,,\,\hat{L}_z\right] = \left[\hat{\mathbb{L}}^2\,,\,\hat{L}_z\right] = 0$$

$\Longrightarrow$ οι τελεστές $\hat{H}$, $\hat{\mathbb{L}}^2$, $\hat{L}_z$ έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις

$$\psi_{E\,\ell\,m}(\vec{r}\,) = R(\,r\,)\,Y_{\ell\,m}(\theta,\phi)$$

Οι καταστάσεις αυτές έχουν καθορισμένη ενέργεια E και καθορισμένη στροφορμή που χαρακτηρίζεται από τους κβαντικούς αριθμούς ℓ , m ! Το μέτρο της τροχιακής στροφορμής είναι $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ και η προβολή της στον άξονα - z ίση με $\hbar m$

- **Για κεντρικό δυναμικό η Χαμιλτωνιανή μετατίθεται με την στροφορμή**

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{L}_k\right] = 0 \quad , \quad \gamma\iota\alpha \quad k = x, y, z$$

- **Οι τελεστές $\hat{H}$, $\hat{\mathbb{L}}^2$ και μόνο μία συνιστώσα, έστω η $\hat{L}_z$, μετατίθενται**

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{\mathbb{L}}^2\right] = \left[\hat{H}\,,\,\hat{L}_z\right] = \left[\hat{\mathbb{L}}^2\,,\,\hat{L}_z\right] = 0$$

$\Longrightarrow$ **οι τελεστές $\hat{H}$, $\hat{\mathbb{L}}^2$, $\hat{L}_z$ έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις**

$$\psi_{E\ell m}(\vec{r}) = R(r)\,Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

Οι καταστάσεις αυτές έχουν καθορισμένη ενέργεια E και καθορισμένη στροφορμή που χαρακτηρίζεται από τους κβαντικούς αριθμούς ℓ , m ! Το μέτρο της τροχιακής στροφορμής είναι $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ και η προβολή της στον άξονα - z ίση με $\hbar m$

- Για κεντρικό δυναμικό η Χαμιλτωνιανή μετατίθεται με την στροφορμή

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{L}_k\right] = 0 \quad , \quad \gamma\iota\alpha \quad k = x, y, z$$

- Οι τελεστές $\hat{H}$, $\hat{\mathbb{L}}^2$ και μόνο μία συνιστώσα, έστω η $\hat{L}_z$, μετατίθενται

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{\mathbb{L}}^2\right] = \left[\hat{H}\,,\,\hat{L}_z\right] = \left[\hat{\mathbb{L}}^2\,,\,\hat{L}_z\right] = 0$$

$\Longrightarrow$ οι τελεστές $\hat{H}$, $\hat{\mathbb{L}}^2$, $\hat{L}_z$ έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις

$$\psi_{E\ell m}(\vec{r}) = R(r)\,Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

Οι καταστάσεις αυτές έχουν καθορισμένη ενέργεια E και καθορισμένη στροφορμή που χαρακτηρίζεται από τους κβαντικούς αριθμούς ℓ , m ! Το μέτρο της τροχιακής στροφορμής είναι $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ και η προβολή της στον άξονα - z ίση με $\hbar m$

- **Για κεντρικό δυναμικό η Χαμιλτωνιανή μετατίθεται με την στροφορμή**

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{L}_k\right] = 0 \quad , \quad \gamma\iota\alpha \quad k = x, y, z$$

- **Οι τελεστές $\hat{H}$, $\hat{\mathbb{L}}^2$ και μόνο μία συνιστώσα, έστω η $\hat{L}_z$, μετατίθενται**

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{\mathbb{L}}^2\right] = \left[\hat{H}\,,\,\hat{L}_z\right] = \left[\hat{\mathbb{L}}^2\,,\,\hat{L}_z\right] = 0$$

$\Longrightarrow$ **οι τελεστές $\hat{H}$, $\hat{\mathbb{L}}^2$, $\hat{L}_z$ έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις**

$$\psi_{E\ell m}(\vec{r}) = R(r)\,Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

Οι καταστάσεις αυτές έχουν καθορισμένη ενέργεια E και καθορισμένη στροφορμή που χαρακτηρίζεται από τους κβαντικούς αριθμούς ℓ , m ! Το μέτρο της τροχιακής στροφορμής είναι $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ και η προβολή της στον άξονα - z ίση με $\hbar m$

Από την εξίσωση ιδιοτιμών της ενέργειας

$$\hat{H}\,\psi \;=\; E\,\psi \qquad \Longrightarrow$$

Η ¨ακτινική¨ εξίσωση Schrödinger

$$-\,\frac{\hbar^2}{2\,\mu}\left(R'' \,+\, \frac{2}{r}\,R'\right) \,+\, \left(\frac{\hbar^2\,\ell\,(\ell+1)}{2\,\mu\,r^2} \,+\, V(r)\right)R \;=\; E\,R$$

η οποία για την συνάρτηση $u(r) \equiv r\,R(r)$ (όπως έχει διατυπωθεί και στην σελίδα 115)

$$-\,\frac{\hbar^2}{2\,\mu}\,u'' \,+\, \left(\frac{\hbar^2\,\ell\,(\ell+1)}{2\,\mu\,r^2} \,+\, V(r)\right)u \;=\; E\,u$$

Φυγοκεντρικό Δυναμικό

- **Στην ακτινική εξίσωση Schrödinger εκτός του πραγματικού δυναμικού $V(r)$ συνεισφέρει και ο φυγοκεντρικός όρος**

$$\frac{\hbar^2\,\ell\,(\ell+1)}{2\,\mu\,r^2}$$

Απωστικό δυναμικό (θετικό), αυξάνει όταν το σωματίδιο πλησιάζει το κέντρο τη δύναμης, δηλαδή το σημείο $r=0$, και είναι τόσο μεγαλύτερο όσο μεγαλύτερη είναι η τροχιακή τροφορμή του σωματιδίου !

- **Το ολικό δυναμικό**

$$U(r) \;=\; \frac{\hbar^2\,\ell\,(\ell+1)}{2\,\mu\,r^2} \;+\; V(r)$$

ονομάζεται και ¨ενεργό δυναμικό¨ .

Ακτινική πιθανότητα

- **Η φυσική σημασία της $u(r)$ είναι αυτή του πλάτους ακτινικής πιθανότητας**

$$|\, u(r) \,|^2 \, dr \;=\; P(\, r, r + dr \,)$$

$P(\, r, r + dr \,) \;=$ **Πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο σε σφαιρικό φλοιό με ακτίνες** r **και** $r + dr$ **.**

- **Ο τελεστής της ακτινικής ορμής $\hat{p}_r$ είναι αυτοσυζυγής, $\hat{p}_r \;=\; \hat{p}_r^{\dagger}$. Από αυτό προκύπτει**

$$u(0) \;=\; 0$$

Το πλάτος της ακτινικής πιθανότητας μηδενίζεται στην αρχή $r = 0$.

Μονοδιάστατο ανάλογο της ακτινικής εξίσωσης

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u'' + U(r)\,u = E\,u$$

Με την αντιστοιχία

$$r \Longrightarrow x$$
$$u(r) \Longrightarrow \psi(x)$$

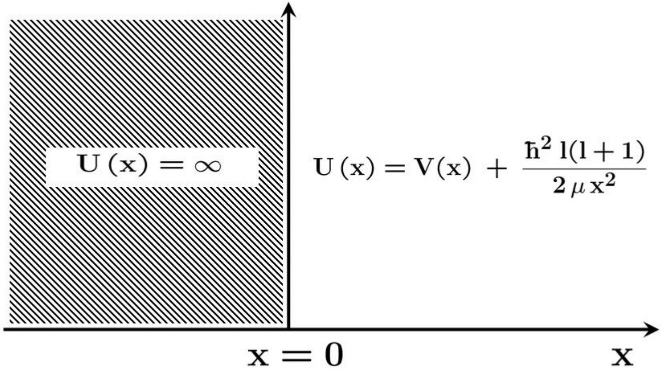
Το πρόβλημα γίνεται μαθηματικά ισοδύναμο με κίνηση σε μονοδιάστατο δυναμικό $U(x)$ όταν $x > 0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi'' + U(x)\,\psi = E\,\psi$$

Η συνθήκη $u(0) = 0$ αντιστοιχεί στην

$$\boxed{\psi(0) = 0}$$

Αυτό εξασφαλίζεται όταν το δυναμικό είναι απειρό για $x < 0$.



Εκφυλισμός του ενεργειακού φάσματος

- Η ακτινική εξίσωση δεν εξαρτάται από την τρίτη συνιστώσα της τροχιακής στροφορμής. Εξαρτάται μόνο από την ενέργεια και τον κβαντικό αριθμό της ολικής στροφορμής ℓ
- Το ακτινικό μέρος εξαρτάται από την ενέργεια και τον κβαντικό αριθμό της ολικής τροχιακής στροφορμής ℓ

$$R(r) = R_{E\,\ell}(r)$$

- Για την ίδια ενέργεια και την ίδια ολική τροχιακή στροφορμή υπάρχουν $2\ell + 1$ ανεξάρτητες καταστάσεις που αντιστοιχούν στις τιμές $L_z = \hbar\, m$ όπου $m = -\ell, -\ell + 1, \ldots \ell$

$$\boxed{\text{Εκφυλισμος} \quad 2\,\ell + 1}$$

- **Ιδιοσυνάρτηση ενέργειας E, στροφορμής ℓ και L_z συνιστώσας της τροχιακής στροφορμής ίση με $\hbar\, m$**

$$\psi(r,\theta,\phi) = R_{E\,\ell}(r)\, Y_{\ell\, m}(\theta,\phi)$$

- Οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμός αυτών χαρακτηρίζει κατάσταση με ενέργεια E, στροφορμή ℓ αλλά δεν είναι ιδιοσυνάρτηση του L_z !

$$\psi(r,\theta,\phi) = R_{E\,\ell}(r) \sum_m c_m\, Y_{\ell\, m}(\theta,\phi)$$

Η πιθανότητα να μετρηθεί τρίτη συνιστώσα $\hbar\, m$ είναι

$$P_m = \frac{|c_m|^2}{\sum_m |c_m|^2}$$

- Με αυτούς τους γραμμικούς συνδυασμούς μπορεί κανείς να κατασκευάσει καταστάσεις με ιδιαίτερα χαρακτηριστικά, π.χ καταστάσεις με ενέργεια E τροχιακή στροφορμή $\ell = 1$ που είναι ιδιοκαταστάσεις των συνιστωσών L_x η L_y

- Ιδιοσυνάρτηση ενέργειας E , στροφορμής ℓ και L_z συνιστώσας της τροχιακής στροφορμής ίση με $\hbar\, m$

$$\psi(r,\theta,\phi) = R_{E\,\ell}(r)\, Y_{\ell\, m}(\theta,\phi)$$

- Οποιοσδήποτε γραμμικός συνδιασμός αυτών χαρακτηρίζει κατάσταση με ενέργεια E , στροφορμή ℓ αλλά δεν είναι ιδιοσυνάρτηση του L_z !

$$\psi(r,\theta,\phi) = R_{E\,\ell}(r) \sum_m c_m\, Y_{\ell\, m}(\theta,\phi)$$

Η πιθανότητα να μετρηθεί τρίτη συνιστώσα $\hbar\, m$ είναι

$$P_m = \frac{|c_m|^2}{\sum_m |c_m|^2}$$

- Με αυτούς τους γραμμικούς συνδιασμούς μπορεί κανείς να κατασκευάσει καταστάσεις με ιδιαίτερα χαρακτηριστικά, π.χ καταστάσεις με ενέργεια E τροχιακή στροφορμή $\ell = 1$ που είναι ιδιοκαταστάσεις των συνιστωσών L_x η L_y

- **Ιδιοσυνάρτηση ενέργειας E , στροφορμής ℓ και L_z συνιστώσας της τροχιακής στροφορμής ίση με $\hbar\, m$**

$$\psi(r,\theta,\phi) \;=\; R_{E\,\ell}(r)\, Y_{\ell\, m}(\theta,\phi)$$

- **Οποιοσδήποτε γραμμικός συνδιασμός αυτών χαρακτηρίζει κατάσταση με ενέργεια E , στροφορμή ℓ αλλά δεν είναι ιδιοσυνάρτηση του L_z !**

$$\psi(r,\theta,\phi) \;=\; R_{E\,\ell}(r) \sum_m c_m\, Y_{\ell\, m}(\theta,\phi)$$

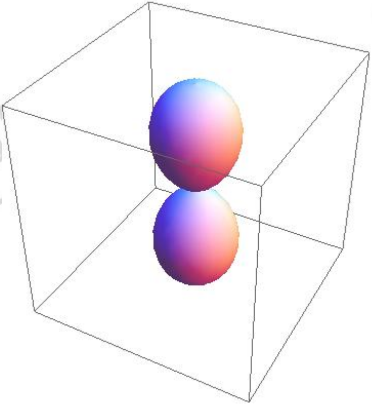
Η πιθανότητα να μετρηθεί τρίτη συνιστώσα $\hbar\, m$ είναι

$$P_m \;=\; \frac{|c_m|^2}{\sum_m |c_m|^2}$$

- **Με αυτούς τους γραμμικούς συνδιασμούς μπορεί κανείς να κατασκευάσει καταστάσεις με ιδιαίτερα χαρακτηριστικά, π.χ καταστάσεις με ενέργεια E τροχιακή στροφορμή $\ell = 1$ που είναι ιδιοκαταστάσεις των συνιστωσών L_x η L_y**

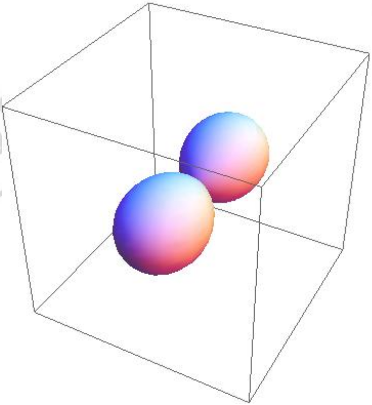
Ιδιοσυνάρτηση ενέργειας E και στροφορμής με $\ell = 1$ και $L_z = 0$

$$\psi(r,\theta,\phi) = R_{E1}(r)\, Y_{10}(\theta,\phi)$$



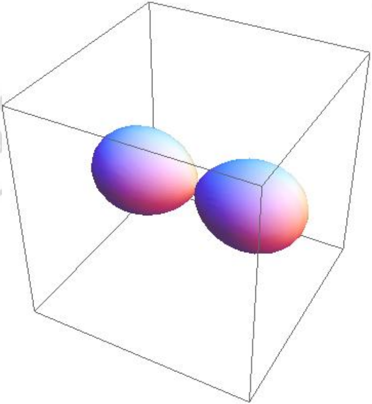
Ιδιοσυνάρτηση ενέργειας E και στροφορμής με $\ell = 1$ και $L_x = 0$

$$\psi(r,\theta,\phi) = R_{E1}(r)\,\frac{Y_{11}(\theta,\phi) - Y_{1\,-1}(\theta,\phi)}{\sqrt{2}}$$

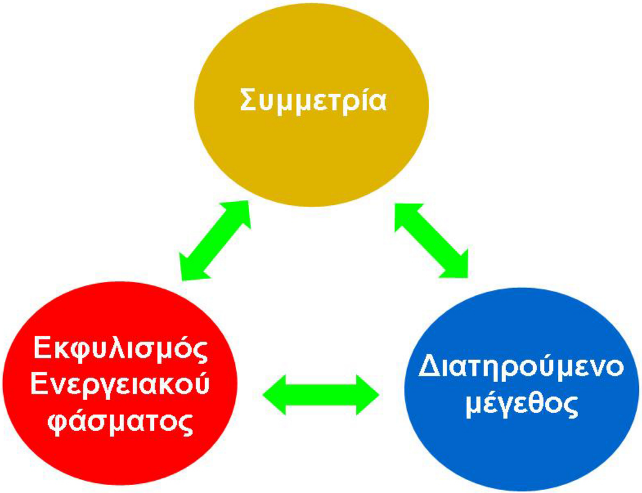


Ιδιοσυνάρτηση ενέργειας E και στροφορμής με $\ell = 1$ και $L_y = 0$

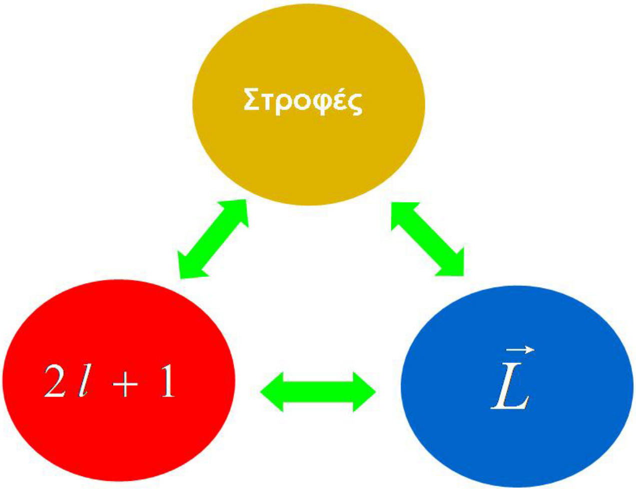
$$\psi(r,\theta,\phi) = R_{E1}(r)\,\frac{Y_{11}(\theta,\phi) + Y_{1\,-1}(\theta,\phi)}{\sqrt{2}}$$



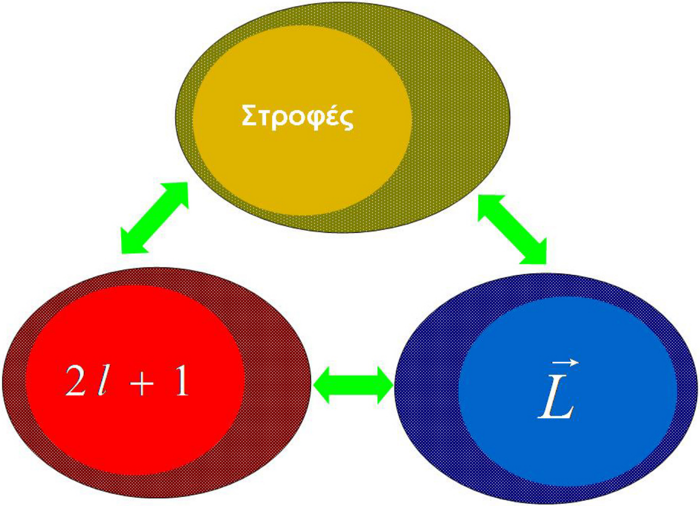
Εκφυλισμός και συμμετρία



Εκφυλισμός και συμμετρία περιστροφών



Εκφυλισμός με μεγαλύτερη συμμετρία



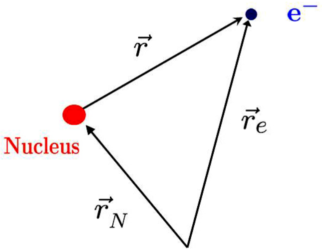
- Μεγαλύτερη συμμετρία
- Περισσότερες διατηρούμενες ποσότητες
- Μεγαλύτερος εκφυλισμός

Το άτομο του H_2 έχει μεγαλύτερο εκφυλισμό από τον αναμενόμενο από την περιστροφική συμμετρία του ! Αυτό σημαίνει ότι η συμμετρία του συστήματος είναι μεγαλύτερη της συμμετρίας περιστροφής και επομένως αναμένει κανείς ότι εκτός της τροχιακης του στροφορμής και άλλες ποσότητες διατηρούνται !

- **Μεγαλύτερη συμμετρία**
- **Περισσότερες διατηρούμενες ποσότητες**
- **Μεγαλύτερος εκφυλισμός**

Το άτομο του H_2 έχει μεγαλύτερο εκφυλισμό από τον αναμενόμενο από την περιστροφική συμμετρία του ! Αυτό σημαίνει ότι η συμμετρία του συστήματος είναι μεγαλύτερη της συμμετρίας περιστροφής και επομένως αναμένει κανείς ότι εκτός της τροχιακης του στροφορμής και άλλες ποσότητες διατηρούνται !

Υδρογονοειδή άτομα - Ατομο του Υδρογόνου



- Το δυναμικό εξαρτάται από την σχετική απόσταση :

$$\Psi(\vec{r}_N, \vec{r}_e) = \Phi(\vec{r}_{CM})\,\psi(\vec{r})$$

- Η ολική ενέργεια :

$$E_{tot} = E_{CM} + E$$

E η ενέργεια δέσμευσης του ηλεκτρονίου.

- Για άτομο Υδρογονοειδούς

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(R''_{E\ell} + \frac{2}{r} R'_{E\ell} \right) + \left(\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \frac{Z e^2}{r} \right) R_{E\ell} = E R_{E\ell}$$

μ είναι η ανηγμένη μάζα

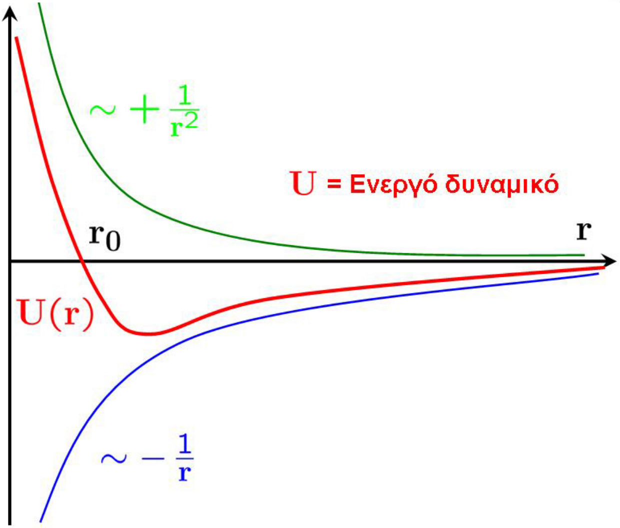
$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{M_{\pi\upsilon\varrho\eta\nu\alpha}}$$

- Το ενεργό δυναμικό του προβλήματος είναι

$$U(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \frac{Z e^2}{r}$$

που μηδενίζεται στο σημείο

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \frac{\ell(\ell+1)}{2Z}$$


$\sim +\frac{1}{r^2}$
U = Ενεργό δυναμικό
r_0
r
U(r)
$\sim -\frac{1}{r}$

- Για $r < r_0$ υπερισχύει ο φυγοκεντρικός όρος και το δυναμικό είναι απωστικό, εμποδίζοντας το ηλεκτρόνιο να προσεγγίσει τον πυρήνα
- για $r > r_0$ κυριαρχεί ο όρος Coulomb και επομένως το δυναμικό είναι ελκτικό.
- Η τιμή του r_0 είναι ανάλογη της σταθεράς μήκους

$$a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{\mu\, e^2} \simeq \frac{\hbar^2}{m_e\, e^2}$$

που καθορίζει την ατομική κλίμακα. Η ανηγμένη μάζα είναι περίπου ίση με την μάζα του ηλεκτρονίου και η σταθερά a_0 είναι πολύ κοντά στην ακτίνα Bohr με τιμή περίπου $0.53 \times 10^{-8}\ cm$.

- Το ελάχιστο του ενεργού δυναμικού είναι στο σημείο $r_{min} = 2\, r_0$ με τιμή ελαχίστου

$$U_{min} = -\frac{Z^2}{\ell\,(\ell+1)}\,\frac{\mu\, e^4}{2\,\hbar^2} = -\,13,6\,\frac{Z^2}{\ell\,(\ell+1)}\ eV$$

Το ελάχιστο είναι $-\infty$ για μηδενική στροφορμή !

- Για $r < r_0$ υπερισχύει ο φυγοκεντρικός όρος και το δυναμικό είναι απωστικό, εμποδίζοντας το ηλεκτρόνιο να προσεγγίσει τον πυρήνα

- για $r > r_0$ κυριαρχεί ο όρος Coulomb και επομένως το δυναμικό είναι ελκτικό.

- Η τιμή του r_0 είναι ανάλογη της σταθεράς μήκους

$$a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{\mu\, e^2} \simeq \frac{\hbar^2}{m_e\, e^2}$$

που καθορίζει την ατομική κλίμακα. Η ανηγμένη μάζα είναι περίπου ίση με την μάζα του ηλεκτρονίου και η σταθερά a_0 είναι πολύ κοντά στην ακτίνα Bohr με τιμή περίπου $0.53 \times 10^{-8}\ cm$.

- Το ελάχιστο του ενεργού δυναμικού είναι στο σημείο $r_{min} = 2\, r_0$ με τιμή ελαχίστου

$$U_{min} = -\frac{Z^2}{\ell(\ell+1)} \frac{\mu\, e^4}{2\,\hbar^2} = -13,6\, \frac{Z^2}{\ell(\ell+1)}\, eV$$

Το ελάχιστο είναι $-\infty$ για μηδενική στροφορμή !

- Για $r < r_0$ υπερισχύει ο φυγοκεντρικός όρος και το δυναμικό είναι απωστικό, εμποδίζοντας το ηλεκτρόνιο να προσεγγίσει τον πυρήνα

- για $r > r_0$ κυριαρχεί ο όρος Coulomb και επομένως το δυναμικό είναι ελκτικό.

- Η τιμή του r_0 είναι ανάλογη της σταθεράς μήκους

$$a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{\mu\, e^2} \simeq \frac{\hbar^2}{m_e\, e^2}$$

που καθορίζει την ατομική κλίμακα. Η ανηγμένη μάζα είναι περίπου ίση με την μάζα του ηλεκτρονίου και η σταθερά a_0 είναι πολύ κοντά στην ακτίνα Bohr με τιμή περίπου $0.53 \times 10^{-8}\ cm$.

- Το ελάχιστο του ενεργού δυναμικού είναι στο σημείο $r_{min} = 2\, r_0$ με τιμή ελαχίστου

$$U_{min} = -\frac{Z^2}{\ell\,(\ell+1)}\,\frac{\mu\, e^4}{2\,\hbar^2} = -\,13,6\,\frac{Z^2}{\ell\,(\ell+1)}\ eV$$

Το ελάχιστο είναι $-\infty$ για μηδενική στροφορμή !

- Για $r < r_0$ υπερισχύει ο φυγοκεντρικός όρος και το δυναμικό είναι απωστικό, εμποδίζοντας το ηλεκτρόνιο να προσεγγίσει τον πυρήνα
- για $r > r_0$ κυριαρχεί ο όρος Coulomb και επομένως το δυναμικό είναι ελκτικό.
- Η τιμή του r_0 είναι ανάλογη της σταθεράς μήκους

$$a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{\mu\, e^2} \simeq \frac{\hbar^2}{m_e\, e^2}$$

που καθορίζει την ατομική κλίμακα. Η ανηγμένη μάζα είναι περίπου ίση με την μάζα του ηλεκτρονίου και η σταθερά a_0 είναι πολύ κοντά στην ακτίνα Bohr με τιμή περίπου $0.53 \times 10^{-8}\ cm$.

- Το ελάχιστο του ενεργού δυναμικού είναι στο σημείο $r_{min} = 2\, r_0$ με τιμή ελαχίστου

$$U_{min} = -\frac{Z^2}{\ell(\ell+1)}\,\frac{\mu\, e^4}{2\,\hbar^2} = -\,13,6\,\frac{Z^2}{\ell(\ell+1)}\; eV$$

Το ελάχιστο είναι $-\infty$ για μηδενική στροφορμή !

- Για $r < r_0$ υπερισχύει ο φυγοκεντρικός όρος και το δυναμικό είναι απωστικό, εμποδίζοντας το ηλεκτρόνιο να προσεγγίσει τον πυρήνα

- για $r > r_0$ κυριαρχεί ο όρος Coulomb και επομένως το δυναμικό είναι ελκτικό.

- Η τιμή του r_0 είναι ανάλογη της σταθεράς μήκους

$$a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{\mu\, e^2} \simeq \frac{\hbar^2}{m_e\, e^2}$$

που καθορίζει την ατομική κλίμακα. Η ανηγμένη μάζα είναι περίπου ίση με την μάζα του ηλεκτρονίου και η σταθερά a_0 είναι πολύ κοντά στην ακτίνα Bohr με τιμή περίπου $0.53 \times 10^{-8}\ cm$.

- Το ελάχιστο του ενεργού δυναμικού είναι στο σημείο $r_{min} = 2\, r_0$ με τιμή ελαχίστου

$$U_{min} = -\frac{Z^2}{\ell(\ell+1)}\,\frac{\mu\, e^4}{2\,\hbar^2} = -\,13,6\,\frac{Z^2}{\ell(\ell+1)}\ eV$$

Το ελάχιστο είναι $-\infty$ για μηδενική στροφορμή !

- Η συνάρτηση $u_{E\ell} = r R_{E\ell}(r)$ ικανοποιεί την εξίσωση

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} u''_{E\ell} + U(r)\, u_{E\ell} = E\, u_{E\ell}$$

Το ενεργό δυναμικό έχει αρνητικό ελάχιστο και μηδενίζεται όταν $r \rightarrow +\infty$.

- Οι δέσμιες ενέργειες, αν υπάρχουν, θα είναι στο διάστημα

$$U_{min} \leq E \leq 0$$

άρα θα είναι της τάξης των ολίγων eV όταν $\ell \neq 0$.

Απλοποίηση της ακτινικής εξίσωσης

- Η ακτινική εξίσωση απλουστεύεται αν ορίσουμε την αδιάστατη μεταβλητή

$$\rho = k\, r$$

- Η σταθερά k , με μονάδες αντιστρόφου μήκους, επιλέγεται ως

$$k = \left(\frac{8\,\mu\,|E|}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

- Η ακτινική εξίσωση γίνεται

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left(- \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right) u = 0$$

όπου $u(\rho)$ είναι η συνάρτηση $u_{E\,\ell}(r)$ με την αντικατάσταση $r = \rho/k$ και

$$\lambda \equiv Z\,\alpha \left(\frac{\mu\, c^2}{2\,|E|} \right)^{1/2}$$

- α είναι η " **σταθερά της λεπτής υφής** " ,

$$\alpha \equiv e^2/(\hbar c) = \frac{1}{137,059}$$

- Η ενέργεια ως συνάρτηση της παραμέτρου λ

$$|E| = \frac{Z^2}{\lambda^2}\,\frac{\alpha^2\,\mu\,c^2}{2} = 13,6\,\frac{Z^2}{\lambda^2}\ \mathrm{eV}$$

- Η επίλυση της ακτινικής εξίσωσης προσδιορίζει τις τιμές της παραμέτρου λ για τις οποίες υπάρχουν δέσμιες ενέργειες και επομένως και τις αντίστοιχες τιμές της ενέργειας.

- α είναι η ¨ **σταθερά της λεπτής υφής** ¨ ,

$$\alpha \equiv e^2/(\hbar c) \; = \; \frac{1}{137,059}$$

- Η ενέργεια ως συνάρτηση της παραμέτρου λ

$$|E| \; = \; \frac{Z^2}{\lambda^2}\,\frac{\alpha^2\,\mu\,c^2}{2} \; = \; 13,6\;\frac{Z^2}{\lambda^2}\;\; \mathrm{eV}$$

- Η επίλυση της ακτινικής εξίσωσης προσδιορίζει τις τιμές της παραμέτρου λ για τις οποίες υπάρχουν δέσμιες ενέργειες και επομένως και τις αντίστοιχες τιμές της ενέργειας.

- α είναι η " **σταθερά της λεπτής υφής** " ,

$$\alpha \equiv e^2/(\hbar c) = \frac{1}{137,059}$$

- Η ενέργεια ως συνάρτηση της παραμέτρου λ

$$|E| = \frac{Z^2}{\lambda^2}\,\frac{\alpha^2\,\mu\,c^2}{2} = 13,6\,\frac{Z^2}{\lambda^2}\ \mathrm{eV}$$

- Η επίλυση της ακτινικής εξίσωσης προσδιορίζει τις τιμές της παραμέτρου λ για τις οποίες υπάρχουν δέσμιες ενέργειες και επομένως και τις αντίστοιχες τιμές της ενέργειας.

- α είναι η ¨ **σταθερά της λεπτής υφής** ¨ ,

$$\alpha \equiv e^2/(\hbar c) \;=\; \frac{1}{137,059}$$

- Η ενέργεια ως συνάρτηση της παραμέτρου λ

$$|E| \;=\; \frac{Z^2}{\lambda^2}\,\frac{\alpha^2\,\mu\,c^2}{2} \;=\; 13,6\,\frac{Z^2}{\lambda^2}\;\;\mathrm{eV}$$

- Η επίλυση της ακτινικής εξίσωσης προσδιορίζει τις τιμές της παραμέτρου λ για τις οποίες υπάρχουν δέσμιες ενέργειες και επομένως και τις αντίστοιχες τιμές της ενέργειας.

Ασυμπτωτικές λύσεις

Για την επίλυση της ακτινικής εξίσωσης θα αναζητήσουμε πρώτα την συμπεριφορά του ακτινικού μέρους για μικρές και για μεγάλες τιμές του ρ .

- Για μικρές τιμές της ρ ο φυγοκεντρικός όρος $-\ell(\ell+1)/\rho^2$ κυριαρχεί έναντι των λ/ρ , $-1/4$. Οι ανεξάρτητες λύσεις για μικρά ρ

$$u(\rho) \simeq \rho^{\ell+1} , \rho^{-\ell} \quad , \rho << 1$$

Μόνο η πρώτη είναι συμβατή με την απαίτηση του μηδενισμού της $u(0)$.

- Για μεγάλες τιμές του ρ ο όρος $-1/4$ κυριαρχεί έναντι των άλλων δύο. Οι λύσεις σε αυτήν την περιοχή είναι

$$u(\rho) \simeq \exp(-\rho/2) , \exp(+\rho/2) \quad , \rho >> 1$$

Μόνο αυτή με τον αρνητικό εκθέτη μηδενίζεται για $r \to +\infty$ όπως απαιτείται για δέσμια κατάσταση.

Η ασυμπτωτική συμπεριφορά υποδεικνύει να γράψουμε την u ως

$$u = \rho^{\ell+1}\, e^{-\frac{\rho}{2}}\, H(\rho)$$

- Η $H(\rho)$ πρέπει να είναι μη μηδενική όταν $\rho = 0$, έτσι ώστε η u να συμπεριφέρεται ως $\rho^{\ell+1}$ για μικρές τιμές του ρ ,
- Η $H(\rho)$ για μεγάλες τιμές του ρ θα πρέπει να συμπεριφέρεται έτσι ώστε να εξασφαλίζεται ο μηδενισμός της u για $\rho \to +\infty$.

Θέτωντας αυτήν στην Δ.Ε. εξίσωση του u προκύπτει

$$H'' + \left(\frac{2\,(\ell+1)}{\rho} - 1\right) H' + \frac{\lambda - \ell - 1}{\rho}\, H = 0$$

η οποία επιλύεται εύκολα αν η H αναπτυχθεί σε **δυναμοσειρά** !

Επίλυση της εξίσωσης - Ενεργειακό φάσμα

⇝

$$H(\rho) \;=\; \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \, \rho^k$$

Ο συντελεστής α_0 θα πρέπει να είναι μη μηδενικός γιατί $H(0) \neq 0$.

⇝ Από την Δ.Ε. προσδιορίζεται η ακόλουθη σχέση μεταξύ των συντελεστών

$$\alpha_{k+1} \;=\; \alpha_k \, \frac{k+\ell+1-\lambda}{(k+1)\,(k+2+2\,\ell)}$$

⇝ Για μεγάλους ακεραίους k η αναδρομική σχέση γίνεται

$$\alpha_{k+1} \;=\; \frac{\alpha_k}{k}$$

όπως συμβαίνει στους συντελεστές του $e^{\,\rho}$. Αρα η H συμπεριφέρεται ως $H \simeq e^{\,\rho}$ και η $u = \rho^{\,\ell+1}\, e^{-\rho/2}\, H(\rho)$ απειρίζεται για $\rho = +\infty$!

■ ΑΝ ΣΥΝΕΒΑΙΝΕ ΓΙΑ ΚΑΘΕ λ ΔΕΝ ΘΑ ΥΠΗΡΧΑΝ ΥΔΡΟΓΟΝΟΕΙΔΗ ΑΤΟΜΑ !

Επίλυση της εξίσωσης - Ενεργειακό φάσμα

- $$H(\rho) \;=\; \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k\, \rho^k$$

  Ο συντελεστής α_0 θα πρέπει να είναι μη μηδενικός γιατί $H(0) \neq 0$.

- Από την Δ.Ε. προσδιορίζεται η ακόλουθη σχέση μεταξύ των συντελεστών

$$\alpha_{k+1} \;=\; \alpha_k\, \frac{k+\ell+1-\lambda}{(k+1)\,(k+2+2\,\ell)}$$

- Για μεγάλους ακεραίους k η αναδρομική σχέση γίνεται

$$\alpha_{k+1} \;=\; \frac{\alpha_k}{k}$$

όπως συμβαίνει στους συντελεστές του e^{ρ} . Αρα η H συμπεριφέρεται ως $H \simeq e^{\rho}$ και η $u = \rho^{\ell+1}\, e^{-\rho/2}\, H(\rho)$ απειρίζεται για $\rho = +\infty$!

- **ΑΝ ΣΥΝΕΒΑΙΝΕ ΓΙΑ ΚΑΘΕ λ ΔΕΝ ΘΑ ΥΠΗΡΧΑΝ ΥΔΡΟΓΟΝΟΕΙΔΗ ΑΤΟΜΑ !**

Επίλυση της εξίσωσης - Ενεργειακό φάσμα

- $$H(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \, \rho^k$$

  Ο συντελεστής α_0 θα πρέπει να είναι μη μηδενικός γιατί $H(0) \neq 0$.

- Από την Δ.Ε. προσδιορίζεται η ακόλουθη σχέση μεταξύ των συντελεστών

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k \, \frac{k+\ell+1-\lambda}{(k+1)\,(k+2+2\,\ell)}$$

- Για μεγάλους ακεραίους k η αναδρομική σχέση γίνεται

$$\alpha_{k+1} = \frac{\alpha_k}{k}$$

όπως συμβαίνει στους συντελεστές του $e^{\,\rho}$. Αρα η H συμπεριφέρεται ως $H \simeq e^{\,\rho}$ και η $u = \rho^{\,\ell+1} \, e^{-\rho/2} \, H(\rho)$ απειρίζεται για $\rho = +\infty$!

ΑΝ ΣΥΝΕΒΑΙΝΕ ΓΙΑ ΚΑΘΕ λ ΔΕΝ ΘΑ ΥΠΗΡΧΑΝ ΥΔΡΟΓΟΝΟΕΙΔΗ ΑΤΟΜΑ !

Επίλυση της εξίσωσης - Ενεργειακό φάσμα

- $$H(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \, \rho^k$$

  Ο συντελεστής α_0 θα πρέπει να είναι μη μηδενικός γιατί $H(0) \neq 0$.

- Από την Δ.Ε. προσδιορίζεται η ακόλουθη σχέση μεταξύ των συντελεστών

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k \, \frac{k+\ell+1-\lambda}{(k+1)\,(k+2+2\,\ell)}$$

- Για μεγάλους ακεραίους k η αναδρομική σχέση γίνεται

$$\alpha_{k+1} = \frac{\alpha_k}{k}$$

όπως συμβαίνει στους συντελεστές του $e^{\,\rho}$. Αρα η H συμπεριφέρεται ως $H \simeq e^{\,\rho}$ και η $u = \rho^{\,\ell+1} \, e^{-\rho/2} \, H(\rho)$ απειρίζεται για $\rho = +\infty$!

■ **ΑΝ ΣΥΝΕΒΑΙΝΕ ΓΙΑ ΚΑΘΕ λ ΔΕΝ ΘΑ ΥΠΗΡΧΑΝ ΥΔΡΟΓΟΝΟΕΙΔΗ ΑΤΟΜΑ !**

Αν όμως η σταθερά λ έχει τιμή

$$\lambda = \ell + 1 + n_r$$

όπου n_r ένας ακέραιος και θετικός αριθμός, $n_r = 0, 1, 2, \cdots$, τότε όλοι οι συντελεστές α_k με δείκτες $k \geq n_r + 1$ μηδενίζονται. Τότε η συνάρτηση $H(\rho)$ είναι πολυώνυμο βαθμού n_r και δεν αυξάνει εκθετικά ! Επομένως $\Longrightarrow$
Στην περίπτωση αυτή η $u(\rho)$ μηδενίζεται για $\rho = +\infty$ όπως απαιτείται για δέσμια κατάσταση !

- Επομένως μόνο για ακέραιες τιμές της $\lambda = n$ υπάρχουν δέσμιες καταστάσεις, όπου

$$n \equiv \ell + 1 + n_r$$

- Η ενέργεια παίρνει τιμές

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2}\,\frac{\alpha^2\,\mu\,c^2}{2} \quad , \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

  Ο "n" καλείται **"κύριος κβαντικός αριθμός"** .

- Ο " n_r " που χαρακτηρίζει τον βαθμό του πολυωνύμου H ονομάζεται **"ακτινικός κβαντικός αριθμός"** .

Αν όμως η σταθερά λ έχει τιμή

$$\lambda = \ell + 1 + n_r$$

όπου n_r ένας ακέραιος και θετικός αριθμός, $n_r = 0, 1, 2, \cdots$, τότε όλοι οι συντελεστές α_k με δείκτες $k \geq n_r + 1$ μηδενίζονται. Τότε η συνάρτηση $H(\rho)$ είναι πολυώνυμο βαθμού n_r και δεν αυξάνει εκθετικά ! Επομένως $\Longrightarrow$
Στην περίπτωση αυτή η $u(\rho)$ μηδενίζεται για $\rho = +\infty$ όπως απαιτείται για δέσμια κατάσταση !

- Επομένως μόνο για ακέραιες τιμές της $\lambda = n$ υπάρχουν δέσμιες καταστάσεις, όπου

$$n \equiv \ell + 1 + n_r$$

- Η ενέργεια παίρνει τιμές

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2}\frac{\alpha^2 \mu c^2}{2} \quad , \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Ο "n" καλείται **"κύριος κβαντικός αριθμός"** .

- Ο " n_r " που χαρακτηρίζει τον βαθμό του πολυωνύμου H ονομάζεται **"ακτινικός κβαντικός αριθμός "** .

- Για δεδομένη ενέργεια E_n το άθροισμα $\ell + n_r$ είναι πάντα $n-1$

ℓ	0	1	2	$\cdots$	$n-1$
n_r	$n-1$	$n-2$	$n-3$	$\cdots$	0

- Σε κάθε τιμή του ℓ αντιστοιχουν $2\ell+1$ τιμές της τρίτης συνιστώσας της τροχιακής στροφορμής, $m = -\ell, -\ell+1, \ldots \ell-1, \ell$.

Αριθμός καταστάσεων για δεδομένη ενέργεια

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

- Για κάθε ενέργεια υπάρχουν n^2 διαφορετικές καταστάσεις. Ο βαθμός του εκφυλισμού των ατόμων των Υδρογονοειδών είναι μεγαλύτερος από αυτόν που αναμένεται για ένα κεντρικό δυναμικό !

- Για δεδομένη ενέργεια E_n το άθροισμα $\ell + n_r$ είναι πάντα $n-1$

ℓ	0	1	2	$\cdots$	$n-1$
n_r	$n-1$	$n-2$	$n-3$	$\cdots$	0

- Σε κάθε τιμή του ℓ αντιστοιχουν $2\,\ell+1$ τιμές της τρίτης συνιστώσας της τροχιακής στροφορμής, $m = -\ell, -\ell+1, \ldots \ell-1, \ell$.

Αριθμός καταστάσεων για δεδομένη ενέργεια

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

- Για κάθε ενέργεια υπάρχουν n^2 διαφορετικές καταστάσεις. Ο βαθμός του εκφυλισμού των ατόμων των Υδρογονοειδών είναι μεγαλύτερος από αυτόν που αναμένεται για ένα κεντρικό δυναμικό !

- Για δεδομένη ενέργεια E_n το άθροισμα $\ell + n_r$ είναι πάντα $n-1$

ℓ	0	1	2	$\cdots$	$n-1$
n_r	$n-1$	$n-2$	$n-3$	$\cdots$	0

- Σε κάθε τιμή του ℓ αντιστοιχουν $2\,\ell+1$ τιμές της τρίτης συνιστώσας της τροχιακής στροφορμής, $m = -\ell, -\ell+1, \ldots \ell-1, \ell$.

Αριθμός καταστάσεων για δεδομένη ενέργεια

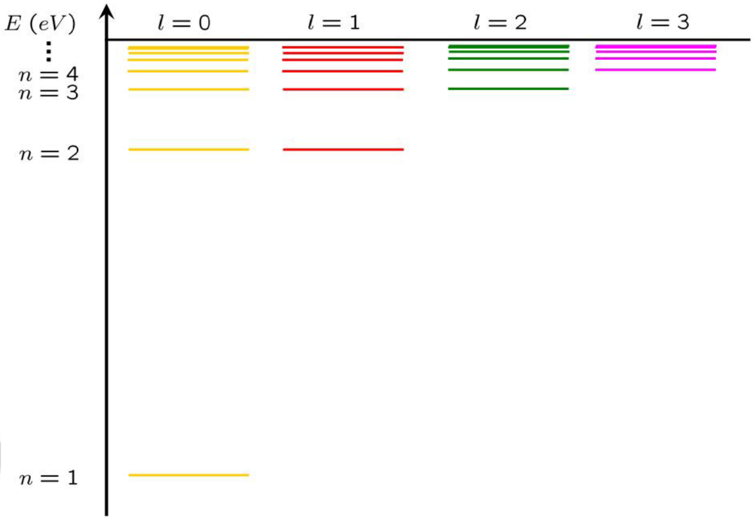
$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) \;=\; n^2$$

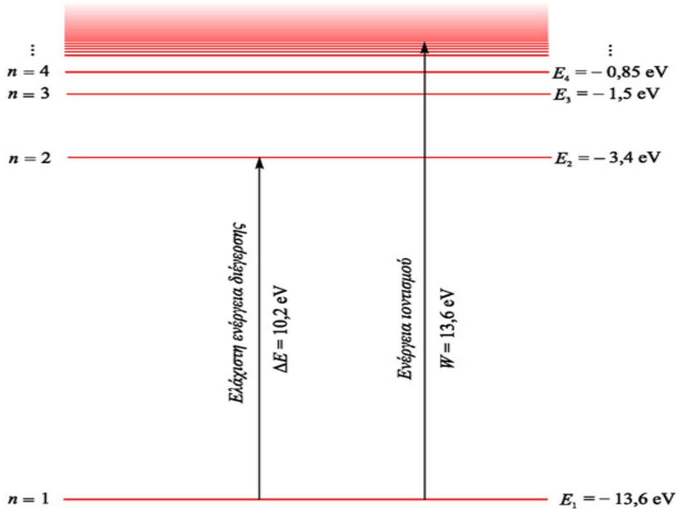
- Για κάθε ενέργεια υπάρχουν n^2 διαφορετικές καταστάσεις. Ο βαθμός του εκφυλισμού των ατόμων των Υδρογονοειδών είναι μεγαλύτερος από αυτόν που αναμένεται για ένα κεντρικό δυναμικό !

Ατομο του Υδρογόνου , $Z = 1$

n	ℓ	n_r	Αρ. καταστάσεων	E_n
1	0	0	1	-13.60 eV
2	0 1	1 0	$1 + 3 = 4$	-3.40 eV
3	0 1 2	2 1 0	$1 + 3 + 5 = 9$	-1.51 eV
4	0 1 2 3	3 2 1 0	$1 + 3 + 5 + 7 = 16$	-0.85 eV
...	...	...	...	...

- s = sharp
- p = principal
- d = diffuse
- f = fundamental
- ...


$E\ (eV)$
$l=0$
$l=1$
$l=2$
$l=3$
$n=4$
$n=3$
$n=2$
$n=1$


n = 4
n = 3
n = 2
n = 1
E₄ = − 0,85 eV
E₃ = − 1,5 eV
E₂ = − 3,4 eV
E₁ = − 13,6 eV
Ελάχιστη ενέργεια διέγερσης
ΔE = 10,2 eV
Ενέργεια ιοντισμού
W = 13,6 eV

Οι κυματικές συναρτήσεις των Υδρογονοειδών ατόμων

- Το ακτινικό μέρος έχει την γενική μορφή

$$R(\rho) = \rho^{\ell}\, e^{-\frac{\rho}{2}}\, H(\rho)$$

και εξαρτάται από τους κβαντικούς αριθμούς n και ℓ.

- Η αδιάστατη μεταβλητή ρ συνδέεται με την r με την σχέση

$$\rho = k\, r \quad , \quad k = \left(\frac{8\,\mu\,|E|}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

- Η σταθερά n εξαρτάται από την ενέργεια και για την E_n στάθμη έχει τιμή $k = 2Z/n\,a_0$ οπότε

$$\rho = \frac{1}{n}\,\frac{2Z}{a_0}\, r$$

- Για δεδομένους κβαντικούς αριθμούς n και ℓ, όπου $\ell \leq n-1$, η συνάρτηση $H(\rho)$ είναι πολυώνυμο βαθμού $n_r = n - \ell - 1$ και στην βιβλιογραφία αναφέρεται ως πολυώνυμο Laguerre $L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}(\rho)$

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = N_{\ell m} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} [\, \rho^{\ell} \, e^{-\frac{\rho}{2}} \, L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}(\rho) \,] \, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

$$\rho = \frac{2\,Z}{a_0}\,\frac{r}{n} \quad , \quad (\, a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{\mu\, e^2} \,)$$

Η σταθερά νορμαλισμού

$$N_{\ell m} = \frac{2}{n^2} \left[\frac{(n-\ell-1)\,!}{((n+\ell)\,!)^3} \right]^{1/2}$$

- Στην μαθηματική βιβλιογραφία τα πολυώνυμα Laguerre $L^p_k(\rho)$, ικανοποιούν την διαφορική εξίσωση

$$L^{p\,\prime\prime}_k + \left(\frac{p+1}{\rho} - 1\right) L^{p\,\prime}_k + \frac{k}{\rho}\, L^p_k = 0$$

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = N_{\ell m}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}[\,\rho^{\ell}\, e^{-\frac{\rho}{2}}\, L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}(\rho)\,]\, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

$$\rho = \frac{2\,Z}{a_0}\,\frac{r}{n} \quad , \quad (\,a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{\mu\, e^2}\,)$$

Η σταθερά νορμαλισμού

$$N_{\ell m} = \frac{2}{n^2}\left[\frac{(n-\ell-1)\,!}{((n+\ell)\,!)^3}\right]^{1/2}$$

- Στην μαθηματική βιβλιογραφία τα πολυώνυμα Laguerre $L^{p}_{k}(\rho)$, ικανοποιούν την διαφορική εξίσωση

$$L^{p\,\prime\prime}_{k} + \left(\frac{p+1}{\rho} - 1\right) L^{p\,\prime}_{k} + \frac{k}{\rho}\, L^{p}_{k} = 0$$

Ατομο του Υδρογόνου - Οι καταστάσεις s, p

- Θεμελειώδης κατάσταση **1*s*** :

$$\psi_{100} = (\pi\, a_o{}^3)^{-1/2}\, e^{-r/a_o}$$

- Η πρώτη διεγερμένη στάθμη περιλαμβάνει τις καταστάσεις **2*s*, 2*p***

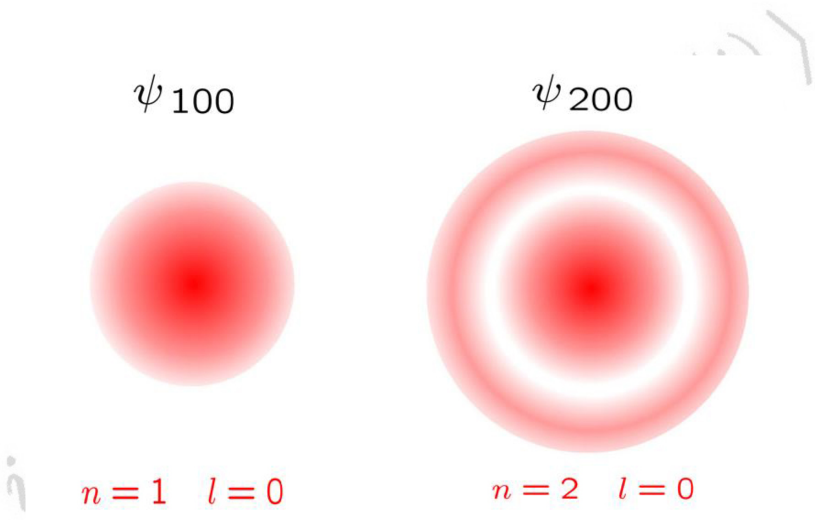
Κατάσταση 2*s* :

$$\psi_{200} = (32\,\pi\, a_o{}^3)^{-1/2} \left(2 - \frac{r}{a_o}\right) e^{-r/2a_o}$$

Καταστάσεις 2*p* :

$$\psi_{210} = (32\,\pi\, a_o{}^3)^{-1/2} \left(\frac{r}{a_o}\right) e^{-r/2a_o}\, \cos\theta$$

$$\psi_{21,\pm1} = (64\,\pi\, a_o{}^3)^{-1/2} \left(\frac{r}{a_o}\right) e^{-r/2a_o}\, \sin\theta\, e^{\pm i\,\phi}$$


ψ_{100}
ψ_{200}
$n=1 \quad l=0$
$n=2 \quad l=0$

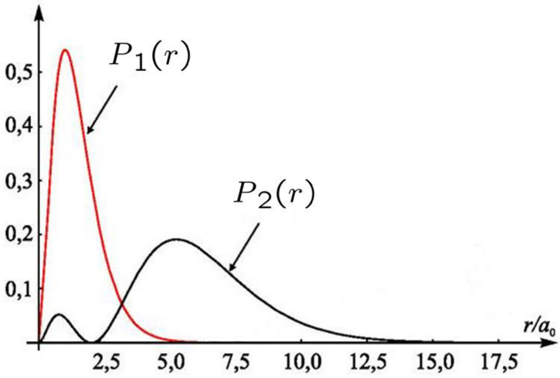
Ακτινική πιθανότητα της $1s$ και $2s$

Κατάσταση $1s$:

$$P_1(r) = \frac{4}{a_0^3}\, r^2\, e^{-2r/a_0}$$

Κατάσταση $2s$:

$$P_2(r) = \frac{1}{8\, a_0^3}\, r^2 \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/a_0}$$


$P_1(r)$
$P_2(r)$
0,5
0,4
0,3
0,2
0,1
r/a_0
2,5
5,0
7,5
10,0
12,5
15,0
17,5

Ενεργειακός εκφυλισμός του Υδρογόνου

Το άτομο του H_2 έχει μεγαλύτερο εκφυλισμό από τον αναμενόμενο από την συμμετρία του σε στροφές !

- Μεγαλύτερος εκφυλισμός $\Longrightarrow$
- Μεγαλύτερη συμμετρία $\Longrightarrow$
- Περισσότερες διατηρούμενες ποσότητες εκτός της τροχιακής στροφορμής !

Η εύρεση των διατηρουμένων μεγεθών θα καθορίσει και την συμμετρία του συστήματος !

Ενεργειακός εκφυλισμός του Υδρογόνου

Το άτομο του H_2 έχει μεγαλύτερο εκφυλισμό από τον αναμενόμενο από την συμμετρία του σε στροφές !

- **Μεγαλύτερος εκφυλισμός** $\Longrightarrow$
- Μεγαλύτερη συμμετρία $\Longrightarrow$
- Περισσότερες διατηρούμενες ποσότητες εκτός της τροχιακής στροφορμής !

Η εύρεση των διατηρουμένων μεγεθών θα καθορίσει και την συμμετρία του συστήματος !

Ενεργειακός εκφυλισμός του Υδρογόνου

Το άτομο του H_2 έχει μεγαλύτερο εκφυλισμό από τον αναμενόμενο από την συμμετρία του σε στροφές !

- **Μεγαλύτερος εκφυλισμός** $\Longrightarrow$
- **Μεγαλύτερη συμμετρία** $\Longrightarrow$
- Περισσότερες διατηρούμενες ποσότητες εκτός της τροχιακής στροφορμής !

Η εύρεση των διατηρουμένων μεγεθών θα καθορίσει και την συμμετρία του συστήματος !

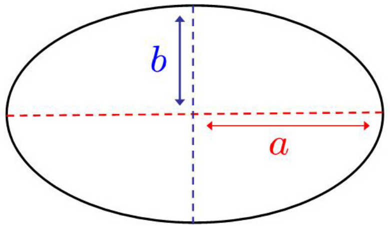
Ενεργειακός εκφυλισμός του Υδρογόνου

Το άτομο του H_2 έχει μεγαλύτερο εκφυλισμό από τον αναμενόμενο από την συμμετρία του σε στροφές !

- **Μεγαλύτερος εκφυλισμός** $\Longrightarrow$
- **Μεγαλύτερη συμμετρία** $\Longrightarrow$
- **Περισσότερες διατηρούμενες ποσότητες εκτός της τροχιακής στροφορμής !**

Η εύρεση των διατηρουμένων μεγεθών θα καθορίσει και την συμμετρία του συστήματος !

- Για την κλασική κίνηση σε δυναμικό Coulomb η τροχιά είναι έλλειψη με ημιάξονες a , b



- Η ενέργεια και το μέτρο στροφορμής είναι

$$|E| = \frac{g}{2a} \quad , \quad |\vec{L}| = mga(1-\epsilon^2)$$

- Για δεδομένη ενέργεια εκτός της τροχιακής στροφορμής υπάρχουν και άλλα μεγέθη που διατηρούνται !

Το μήκος και η διεύθυνση των ημιαξόνων !

- Για κίνηση σε δυναμικό **Coulomb**

$$V(r) = -\frac{g}{r} \qquad (g > 0)$$

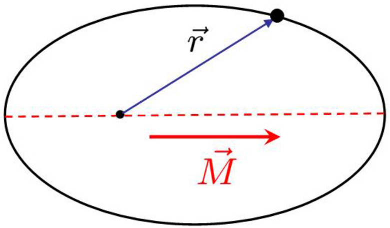
- διατηρείται το άνυσμα

$$\vec{M} = \vec{L} \times \vec{v} + g\,\frac{\vec{r}}{r} \qquad \textbf{Runge} - \textbf{Lenz}$$

- Η κατεύθυνση του είναι αυτή του μεγάλου ημιάξονα και το μήκος του σχετίζεται με την εκκεντρότητα της έλλειψης

$$|\,\vec{M}\,| = g\,\epsilon$$

Εκκεντρότητα $\qquad \epsilon = \sqrt{\dfrac{a^2 - b^2}{a^2}}$


$\vec{r}$
$\vec{M}$

Με την προσθήκη μικρού διαταρακτικού όρου, που δεν έχει την μορφή Coulomb

$$-\frac{g}{r} \Longrightarrow -\frac{g}{r} + \delta \neq \textbf{Coulomb}$$

$\Longrightarrow$ η τροχία υφίσταται μετάπτωση (precession) !

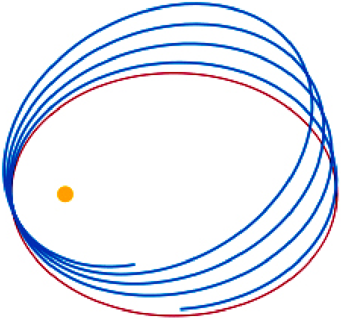


Table 2-2 Precision of planetary orbits

Planet	n (orbits/century)	ϵ	$r_{\min}$ (AU)†	$n\,\Delta\phi$ (arc seconds/century) General relativity	Observed
Mercury	415.2	0.206	0.307	43.0	43.1 ± 0.5
Venus	162.5	0.0068	0.717	8.6	8.4 ± 4.8
Earth	100.0	0.017	0.981	3.8	5.0 ± 1.2
Icarus‡	89.3	0.827	0.186	10.0	9.8 ± 0.8

†Astronomical unit (AU) = mean Earth-sun distance = 1.50×10^{11} m.
‡Icarus is one of several thousand minor planets, or asteroids. It is included here because the perihelion of its orbit lies inside Mercury's orbit, closer to the sun than any other asteroid.

- Το άνυσμα της στροφορμής διατηρείται Κβανομηχανικά για κίνηση σε κεντρικό δυναμικό

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{\mathbb{L}}\right] = 0$$

Η Χαμιλτωνιανή έχει **συμμετρία περιστροφής** , $O(3)$

- Το άνυσμα **Runge - Lenz** διατηρείται Κβανομηχανικά για κίνηση σε δυναμικό **Coulomb**

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{\mathbb{M}}\right] = 0$$

Η Χαμιλτωνιανή έχει μεγαλύτερη **συμμετρία** , $O(4)$

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Σημειώματα

Σημείωμα Ιστορικού Εκδόσεων Έργου

Το παρόν έργο αποτελεί την έκδοση 1.1

Η έκδοση 1.0 είναι διαθέσιμη εδώ.

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Εθνικόν και Καποδιστριακόν Πανεπιστήμιον Αθηνών. Αθανάσιος Λαχανάς. «Κβαντική Μηχανική ΙΙ. Ενότητα 5: Κεντρικά Δυναμικά». Έκδοση: 0.1. Αθήνα 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: http://opencourses.uoa.gr/courses/PHYS9/.

Σημείωμα Αδειοδότησης

Διατήρηση Σημειωμάτων

Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:

- το Σημείωμα Αναφοράς
- το Σημείωμα Αδειοδότησης
- τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων

μαζί με τους συνοδευόμενους υπερσυνδέσμους.