ν.δ.ο $\rightsquigarrow [L_z, L_+] = \hbar L_+$

$$[L_z, L_+] = [L_z, L_x + iL_y] =$$

$$= [L_z, L_x] + [L_z, iL_y] =$$

$$= [L_z, L_x] + i[L_z, L_y] \quad (1)$$

Αλλά: $[L_z, L_x] = i\hbar L_y$ και $[L_z, L_y] = -i\hbar L_x \quad (2)$

Άρα: $(1) \overset{(2)}{\rightsquigarrow} [L_z, L_+] = i\hbar L_y + i(-i\hbar L_x) =$

$$= i\hbar L_y - i^2\hbar L_x =$$

$$= i\hbar L_y + \hbar L_x =$$

$$= \hbar(iL_y + L_x) = \hbar L_+ \quad \text{ο.ε.δ.}$$

Θ.4 17/6/2006.

$$H = \frac{L^2}{2I} + gL_z \qquad I, g: \text{σταθερές θετικές}$$

α/ $E = ?$

Οι εξισ. ιδιοτιμών των L^2 και L_z είναι:

$$L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m, \quad l = 0, 1, 2, \dots \qquad (1)$$

και $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m, \quad m = -l, \dots, 0, \dots, l \qquad (2)$

Επειδή $[H, L^2] = [H, L_z] = 0$ δηλ. η Hamiltonian H αντιμετατίθεται με τα L^2, L_z οπότε έχουν κοινό σύνολο ιδιοσυναρτήσεων τις σφαιρικές αρμονικές Y_l^m.

Εξίσωση ιδιοτιμών της H είναι:

$$H Y_l^m = E_{lm} Y_l^m \qquad (3)$$

Είναι: $H Y_l^m = \left(\frac{L^2}{2I} + gL_z\right) Y_l^m = \frac{L^2 Y_l^m}{2I} + g L_z Y_l^m =$

$$\overset{(1,2)}{=} \frac{1}{2I} l(l+1)\hbar^2 Y_l^m + g m\hbar Y_l^m \rightarrow$$

$$\rightarrow H Y_l^m = \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2I} + g m\hbar\right] Y_l^m \qquad (4)$$

Συγκρίνοντας τις (3) και (4) υπολογίζουμε τις ιδιοτιμές της ενέργειας ως:

$$\boxed{E_{lm} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I} + g m\hbar} \qquad l = 0, 1, 2, \dots \quad m = -l, \dots, 0, \dots, l$$

β/ Αν $Ig = \hbar$ ποιά η ενέργεια της 1ης διεγερμένης.

Είναι $Ig = \hbar \rightarrow g = \frac{\hbar}{I}$ οπότε:

$$E_{lm} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I} + \frac{\hbar}{I} m\hbar \rightarrow E_{lm} = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2I}}_{\varepsilon} \left[l(l+1) + 2m\right]$$

Άρα:

Για $l = 0, m = 0$: $E_{00} = 0$

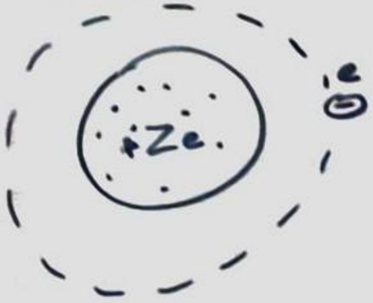
Για $l = 1, m = -1, 0, 1$: $E_{1-1} = 0$, $E_{10} = 2\varepsilon$, $E_{11} = 4\varepsilon$

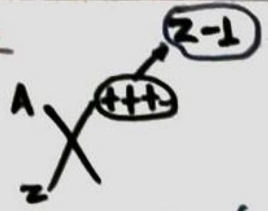
Για $l = 2, m = -2, -1, 0, 1, 2$: $E_{2-2} = 2\varepsilon$, $E_{2-1} = 4\varepsilon$, $E_{20} = 6\varepsilon$, $E_{21} = 8\varepsilon$, $E_{22} = 10\varepsilon$

Για $l = 3, m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$: $E_{3-3} = 6\varepsilon$, $E_{3-2} = 8\varepsilon$, $E_{3-1} = 10\varepsilon$, $E_{30} = 12\varepsilon$, $E_{31} = 14\varepsilon$, $E_{32} = 16\varepsilon$, $E_{33} = 18\varepsilon$

Στάθμη	Ενέργεια	Καταστάσεις	Εκφυλισμός
Θεμελιώδης	0	Y_0^0, Y_1^{-1}	2
1η Διεγερμένη	2ε	Y_1^0, Y_2^{-2}	2
2η Διεγερμένη	4ε	Y_1^1, Y_2^{-1}	2
3η Διεγερμένη	6ε	Y_2^0, Y_3^{-3}	2

ΥΔΡΟΓΟΝΟΕΙΔΗ ΑΤΟΜΑ.





π.χ. $^{2}_{1}H$, $^{4}_{2}He^{+}$, $^{6}_{3}Li^{++}$, $^{8}_{4}Be^{+++}$, $^{10}_{5}B^{++++}$, ...

Το ηλεκτρόνιο κινείται στο ηλεκτροστατικό σφαιρικό δυναμικό Coulomb του πυρήνα: $V=-\frac{Ze^2}{r}$

οπότε η ακτινική εξίσωση Schrödinger είναι:

$$\frac{d^2y}{dr^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E+\frac{Ze^2}{r}-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]y_{(r)}=0 \quad (1)$$

όπου $y_{(r)}=rR_{nl}(r) \rightarrow R_{nl}(r)=\frac{y_{(r)}}{r}$

Οι κυματοσυναρτήσεις που περιγράφουν κάθε υδρογονοειδές σύστημα επειδή είναι 3-d έχουν τη μορφή:

$$\underbrace{\Psi_{nlm}(r,\theta,\phi)=R_{nl}(r)\,Y_l^m(\theta,\phi)}_{\text{από σημειώσεις σελ. 392}} \quad \left[\begin{array}{l} n=1,2,3,\dots \\ l=0,1,\dots,n-1 \\ m=-l,\dots,0,\dots,l \end{array}\right.$$

κβαντικοί αριθμοί

Η λύση της (1) δίνει τις επιτρεπόμενες ενέργειες:

$$E_n=-\frac{Z^2}{n^2}\underbrace{\left(\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}\right)}_{=13{,}6eV} \longrightarrow \boxed{E_n=-\frac{Z^2}{n^2}\,13{,}6\,eV.}$$

σελ. 386 τηχ. $\boxed{E_n=-\frac{1}{2n^2}}$ ← για το υδρογόνο στο A.U.

1Hartree $=27{,}2eV=\frac{m_e e^4}{\hbar^2}$

• Αν σε μια άσκηση βγει ότι $E=-\frac{1}{8}$ A.U. $=-\frac{1}{8}$ Hartree $=-\frac{1}{8}\cdot 27{,}2eV=-3{,}4eV.$

• Για μετάβαση από το άτομο του υδρογόνου σε υδρογονοειδές κάνουμε την αντικατάσταση $e\rightarrow\sqrt{Z}e$

$$E_{n(H)}=-\frac{1}{2n^2} \xrightarrow{\text{αντιστοιχεί}} -\frac{1}{2n^2}\frac{m_e e^4}{\hbar^2} \quad (\text{για το H})$$

μετατροπή σε υδρογονοειδές $e\rightarrow\sqrt{Z}e$ δηλ. $e^4\rightarrow Z^2e^4$

$$E_{n\,(\text{υδρογονοειδές})}=-\frac{1}{2n^2}\frac{m_e Z^2 e^4}{\hbar^2}=-\frac{Z^2}{n^2}\underbrace{\left(\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}\right)}_{=13{,}6eV}$$

Αναπαράσταση κυματοσυναρτήσεων:

Οι σφαιρικές αρμονικές Y_l^m δεν επιδέχονται καμμία διόρθωση, οπότε τις χρησιμοποιούμε όπως είναι στον πίνακα 9.2.

• Οι ακτινικές κυματοσυναρτήσεις $R_{nl}(r)$ του πίνακα 9.3 επιδέχονται αντικατάσταση: όπου έχουμε $r\rightarrow Zr/a_0$ και πολλαπλασιασμό με $\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}$. Αν αφορούν για υδρογόνο βάζουμε $Z=1$.

$\Psi_{31-1}=?$ $\quad \Psi_{31-1}(r,\theta,\phi)=R_{31}(r)\,Y_1^{-1}(\theta,\phi)$

όπου $R_{31}=\frac{8r}{27\sqrt{6}}\left(1-\frac{r}{6}\right)e^{-r/3}=\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{8}{27\sqrt{6}}\frac{Zr}{a_0}\left(1-\frac{Zr}{6a_0}\right)e^{-Zr/3a_0}$

και $Y_1^{-1}=+\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{-i\phi}$

Άρα: $\boxed{\Psi_{31-1}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{8}{27\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0}\left(1-\frac{Zr}{6a_0}\right)e^{-Zr/3a_0}\sin\theta\, e^{-i\phi}}$

• Αν σε μια άσκηση βγει ότι $E = -\frac{1}{8}$ A.U. $= -\frac{1}{8}$ Hartree $=$

$= -\frac{1}{8} \cdot 27{,}2\,eV = -3{,}4\,eV$.

• Για μετάβαση από το άτομο του υδρογόνου σε υδρογονοειδές κάνουμε την αντικατάσταση $e \to \sqrt{Z}\,e$

$$E_{n\,(H)} = -\frac{1}{2n^2} \xrightarrow{\text{αντικατάσταση}} -\frac{1}{2n^2}\frac{m_e e^4}{\hbar^2} \quad (\text{για το } H)$$

μετατροπή σε υδρογονοειδές $e \to \sqrt{Z}e$ δηλ. $e^4 \to Z^2 e^4$

$$E_{n\,(\text{υδρογονοειδές})} = -\frac{1}{2n^2}\frac{m_e Z^2 e^4}{\hbar^2} = -\frac{Z^2}{n^2}\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}$$

$\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = 13{,}6\,eV$

Οι ιδιοτιμές ενέργειας E_n παρουσιάζουν εκφυλισμό τάξης n^2 !!

γιατί σε κάθε κβαντικό n αντιστοιχούν περισσότερες τιμές για τους l, m.

Πράγματι: για $n=1$: $l=0, m=0$ (1 μη εκφυλισμένη στάθμη)

• Για $n=2$ $\begin{cases} l=0 \to m=0 & \leftarrow (2,0,0) \\ l=1 \to m=-1,0,1 & \leftarrow (2,1,-1),(2,1,0),(2,1,1) \end{cases}$

(4 στάθμες εκφυλισμός 4)

$$L^2\Psi_{nlm} = L^2 R_{nl} Y_l^m = R_{nl} \underbrace{L^2 Y_l^m} = R_{nl}\, l(l+1)\hbar^2 Y_l^m =$$

$$= l(l+1)\hbar^2 R_{nl} Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 \Psi_{nlm}$$

και $L_z\Psi_{nlm} = L_z R_{nl} Y_l^m = R_{nl} L_z Y_l^m = R_{nl}\, m\hbar\, Y_l^m = m\hbar R_{nl} Y_l^m =$

$= m\hbar \Psi_{nlm}$.

δηλ. οι L^2, L_z δρουν μόνο στο γωνιακό μέρος των Ψ_{nlm}.

$,n-1$

$,0,\dots,l$

$=1,2,\dots$

$= \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = E$

Ασκ. 6 3η εργασία 2016-17.

$$\psi(\vec{r},0) = C\left[(1-i)\psi_{211}(\vec{r}) + i\,\psi_{32-2}(\vec{r}) + \psi_{31-1}(\vec{r})\right]$$

α) Βρείτε την κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση για τυχαία χρονική στιγμή t. $\psi(\vec{r},t) = ?$

Συνθήκη κανονικοποίησης: $\langle\psi(\vec{r},0)|\psi(\vec{r},0)\rangle = 1 \rightarrow$

$$\rightarrow |C(1-i)|^2 + |C\,i|^2 + |C|^2 = 1 \rightarrow 2|C|^2 + |C|^2 + |C|^2 = 1 \rightarrow$$

$$\rightarrow 4|C|^2 = 1 \rightarrow |C|^2 = \frac{1}{4} \rightarrow \boxed{C = \frac{1}{2}}$$

Άρα. $\psi(\vec{r},0) = \frac{(1-i)}{2}\psi_{211}(\vec{r}) + \frac{i}{2}\psi_{32-2}(\vec{r}) + \frac{1}{2}\psi_{31-1}(\vec{r})$

Χρονική εξέλιξη: $\psi(\vec{r},t) = \hat{U}(t)\,\psi(\vec{r},0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\,\psi(\vec{r},0) =$

$$\rightarrow \boxed{\psi(\vec{r},t) = \frac{(1-i)}{2}e^{-\frac{iE_2}{\hbar}t}\psi_{211}(\vec{r}) + \frac{i}{2}e^{-\frac{iE_3}{\hbar}t}\psi_{32-2}(\vec{r}) + \frac{1}{2}e^{-\frac{iE_3 t}{\hbar}}\psi_{31-1}(\vec{r})}$$

όπου: $E_n = -\cancel{Z^2}\frac{13{,}6\,eV}{n^2}$ οπότε: $E_2 = -\frac{13{,}6}{4}eV = -3{,}4\,eV$

$$E_3 = -\frac{13{,}6}{9}eV = -1{,}51\,eV.$$

$\langle E\rangle = ?$

$$\langle E\rangle = \langle\psi(\vec{r},t)|\hat{H}|\psi(\vec{r},t)\rangle = \sum_n |c_{nlm}|^2 E_n =$$

$$= \left|\frac{(1-i)}{2}e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}}\right|^2 E_2 + \left|\frac{i}{2}e^{-\frac{iE_3}{\hbar}t}\right|^2 E_3 + \left|\frac{1}{2}e^{-\frac{iE_3 t}{\hbar}}\right|^2 E_3 =$$

$$= \frac{2}{4}E_2 + \frac{1}{4}E_3 + \frac{1}{4}E_3 = \frac{1}{2}E_2 + \frac{1}{2}E_3 = \frac{1}{2}(E_2 + E_3) =$$

$$= \frac{1}{2}(-3{,}4 - 1{,}51)\,eV \rightarrow \boxed{\langle E\rangle = -2{,}455\,eV}$$

ανεξάρτητο του χρόνου

HOMEWORK: $\Delta L_z = ?$ $\Delta L^2 = ?$