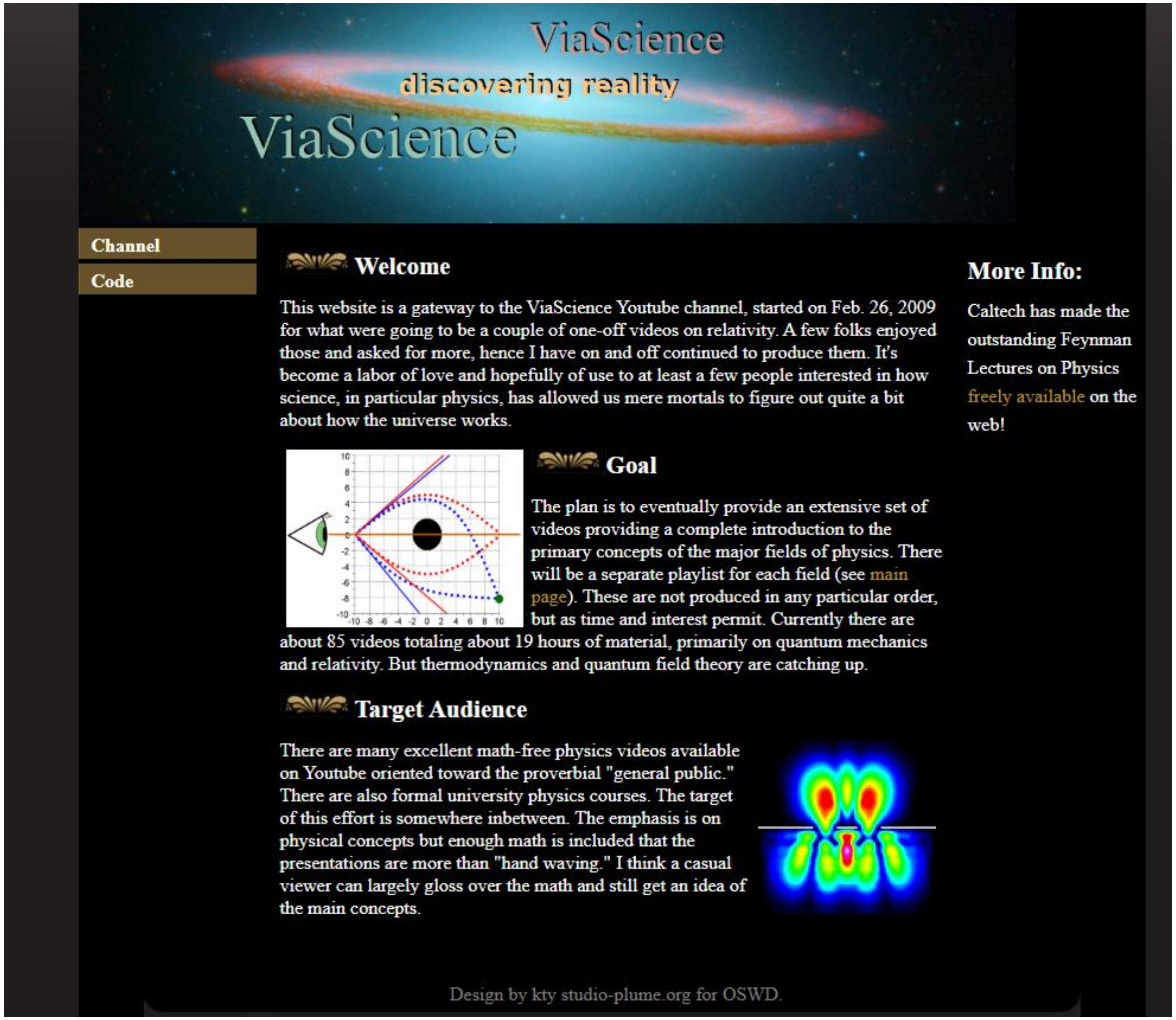
Κεφάλαιο 40 (Old 39) Κβαντική Μηχανική Ατόμων

Περιεχόμενα Κεφαλαίου 39

- Τα άτομα από την σκοπιά της κβαντικής μηχανικής.
- Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι κβαντικοί αριθμοί.
- Οι κυματοσυναρτήσεις του ατόμου του Υδρογόνου.
- Πολύπλοκα άτομα και το Exclusion Principle.
- Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων.
- Ατομικοί αριθμοί και φάσματα ακτινών X.
- Μαγνητικά δίπολα και συνολική Στροφορμή.

http://viascience.org/



ViaScience

discovering reality

ViaScience

Channel

Code

Welcome

This website is a gateway to the ViaScience Youtube channel, started on Feb. 26, 2009 for what were going to be a couple of one-off videos on relativity. A few folks enjoyed those and asked for more, hence I have on and off continued to produce them. It's become a labor of love and hopefully of use to at least a few people interested in how science, in particular physics, has allowed us mere mortals to figure out quite a bit about how the universe works.

Goal

The plan is to eventually provide an extensive set of videos providing a complete introduction to the primary concepts of the major fields of physics. There will be a separate playlist for each field (see main page). These are not produced in any particular order, but as time and interest permit. Currently there are about 85 videos totaling about 19 hours of material, primarily on quantum mechanics and relativity. But thermodynamics and quantum field theory are catching up.

Target Audience

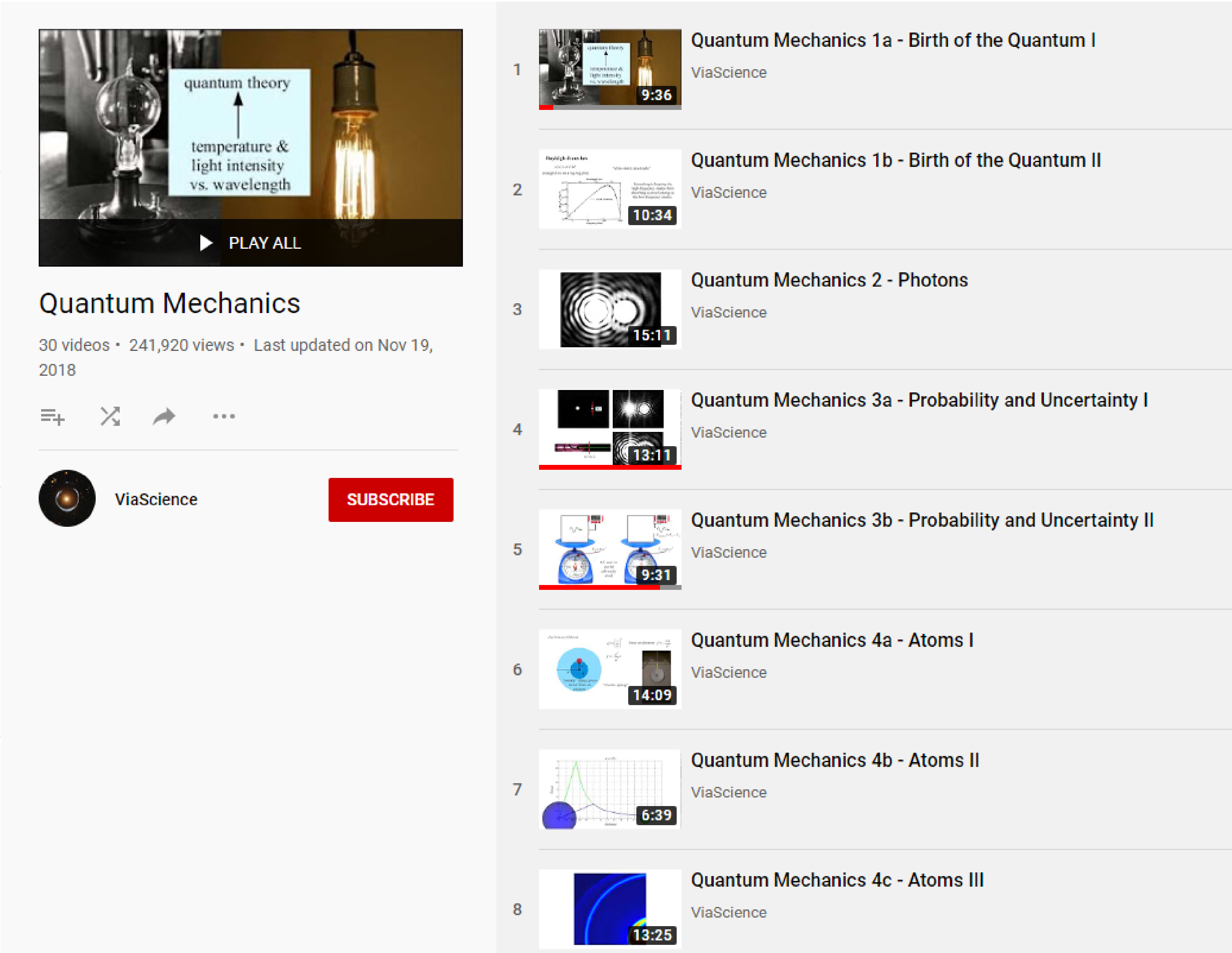
There are many excellent math-free physics videos available on Youtube oriented toward the proverbial "general public." There are also formal university physics courses. The target of this effort is somewhere inbetween. The emphasis is on physical concepts but enough math is included that the presentations are more than "hand waving." I think a casual viewer can largely gloss over the math and still get an idea of the main concepts.

More Info:

Caltech has made the outstanding Feynman Lectures on Physics freely available on the web!

Design by kty studio-plume.org for OSWD.

https://www.youtube.com/playlist?list=PL193BC0532FE7B02C

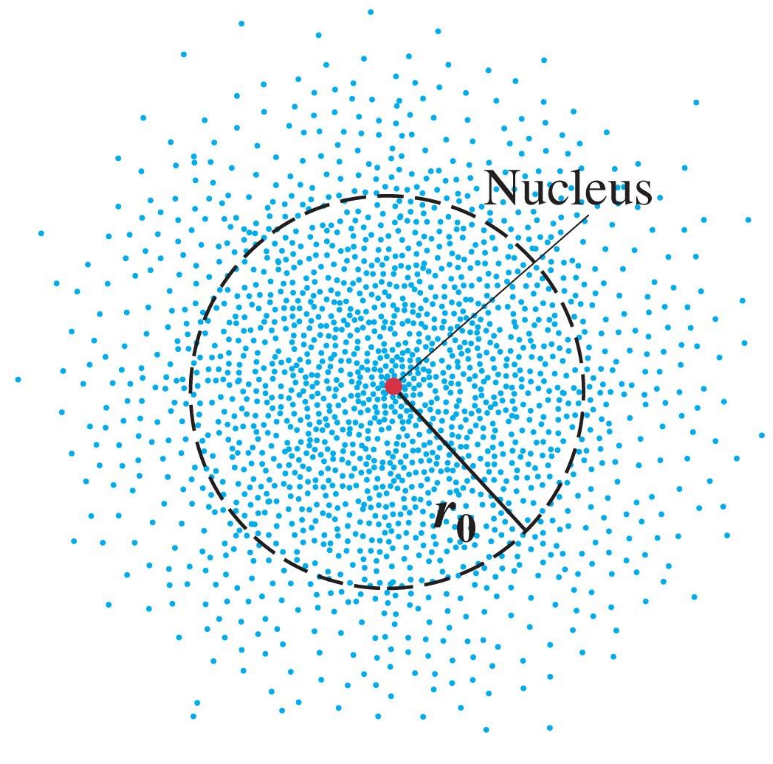


39.1 Τα άτομα από την σκοπιά της κβαντικής μηχανικής

Αφού ο ακριβής προσδιορισμός της θέσης του ηλεκτρονίου «δεν επιτρέπεται» από την κβαντική μηχανική, το μοντέλο του Bohr για το άτομο που προβλέπει «καθορισμένες τροχιές» πρέπει να απορριφτεί.

Η κατανομή (πιθανολογική) της θέσης του ηλεκτρονίου περιγράφεται κβαντομηχανικά :

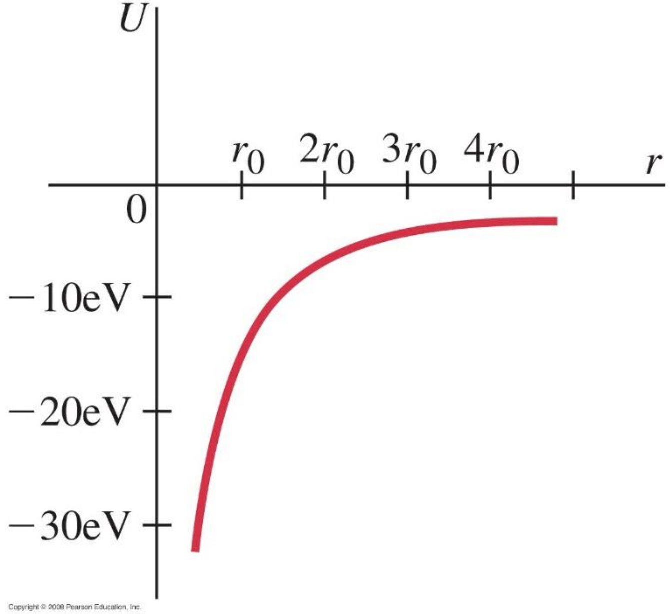
$$P_r = 4\frac{r^2}{r_0^3}e^{-\frac{r}{r_0}}$$



39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

Η δυναμική ενέργεια (ηλεκτρική) ατόμου του Υδρογόνου:

$$U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r}$$



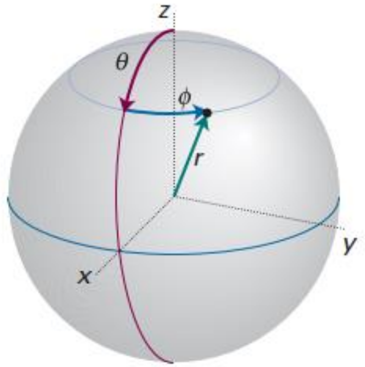
39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

http://www.nat.vu.nl/~wimu/EDUC/MNW-lect-2.pdf

https://en.wikipedia.org/wiki/Hydrogen_atom

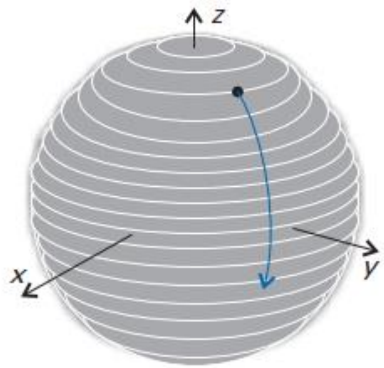
Η χρονικώς ανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger σε τρεις διαστάσεις είναι:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)-\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r}\psi = E\psi,$$



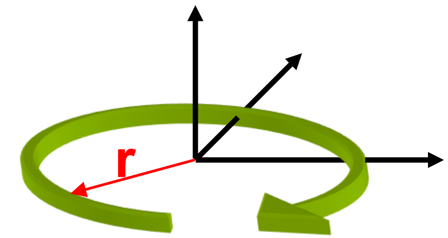
$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$



όπου $E_n = -\frac{13.6\text{ eV}}{n^2} \qquad n = 1, 2, 3, \cdots.$

Σωματίδιο σε δακτύλιο



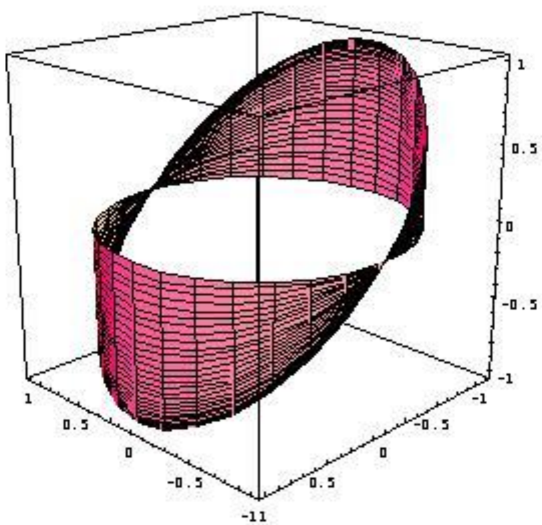
Με r και θ σταθερά ⇒

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = E\Phi(\varphi)}$$

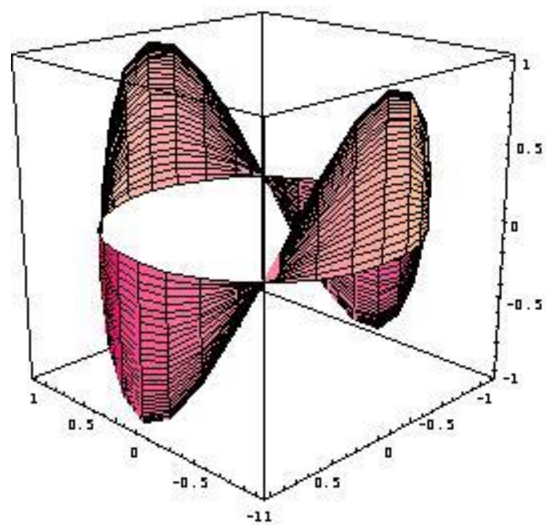
$$\boxed{\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im_l\phi} \quad \kappa\alpha\iota \quad E_{m_l} = \frac{\hbar^2}{2I}m_l{}^2, \quad m_l = 0,\pm 1,\pm 2,\ldots}$$

Όπου $I=mr^2$ είναι η *Ροπή Αδράνειας*

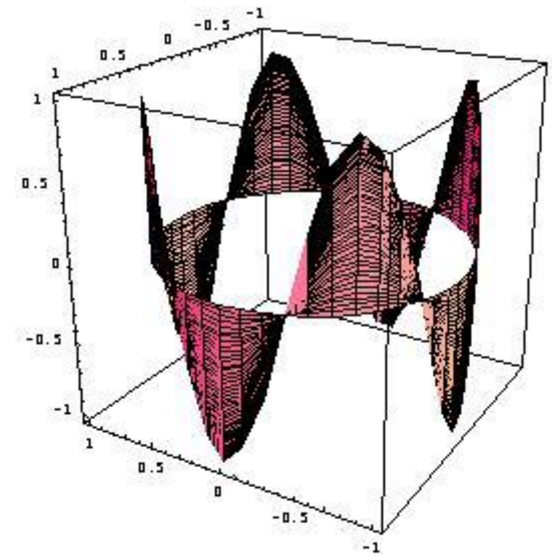
ReΦ(*φ*)



***m_l*=1**



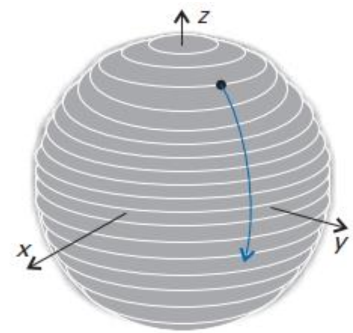
***m_l*=2**



***m_l*=4**

Σωματίδιο σε επιφάνεια σφαίρας

$$Y_{lm_l}(\theta,\varphi) = \Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\varphi)$$



Με r σταθερό ⇒

$$\nabla^2 = \cancel{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r}} + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 Y_{l,m_l}(\theta,\varphi) = E Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Theta_{l,m_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\varphi) - \frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Theta_{l,m_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\varphi) = E\Theta_{l,m_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\varphi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\Phi_{m_l}(\varphi)}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Theta_{l,m_l}(\theta) - \frac{\hbar^2 m_l^2}{2mr^2}\frac{\Phi_{m_l}(\varphi)}{\sin^2\theta}\Theta_{l,m_l}(\theta) = E\Theta_{l,m_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\varphi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Theta_{l,m_l}(\theta) - \frac{\hbar^2 m_l^2}{2mr^2\sin^2\theta}\Theta_{l,m_l}(\theta) = E\Theta_{l,m_l}(\theta)$$

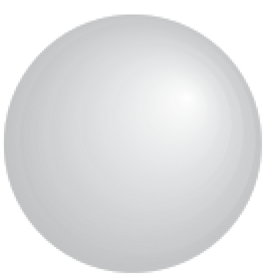
$$Y_{lm_l}(\theta,\varphi)=\Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\varphi)$$

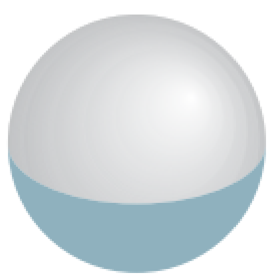
$$\Theta_{lm_l}(\theta)=\left\{\frac{(2l+1)(l-|m_l|)!}{2(l+|m_l|)!}\right\}^{1/2}P_l^{|m_l|}(\cos\theta)$$

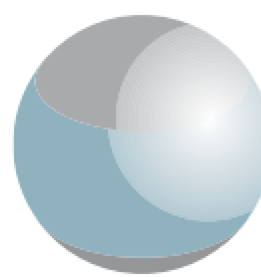
$$\Phi_{m_l}(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im_l\varphi}\,,\qquad m_l=0,\pm1,\pm2,\dots,\pm l$$

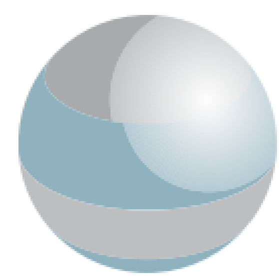
$$\boxed{E=\frac{\hbar^2}{2I}l(l+1),\qquad l=0,1,2\dots}$$

l	m_l	$Y_{l,m_l}(\theta,\phi)$
0	0	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$
1	0	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2}\cos\theta$
	±1	$\mp\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}$
2	0	$\left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2}(3\cos^2\theta-1)$
	±1	$\mp\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2}\cos\theta\sin\theta\, e^{\pm i\phi}$
	±2	$\left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}$

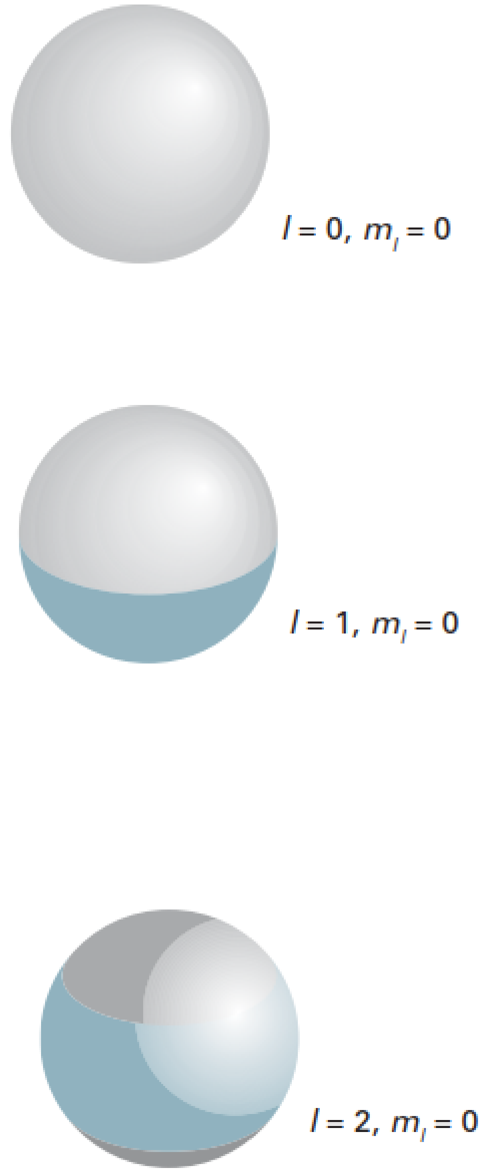

$l=0,\ m_l=0$


$l=1,\ m_l=0$

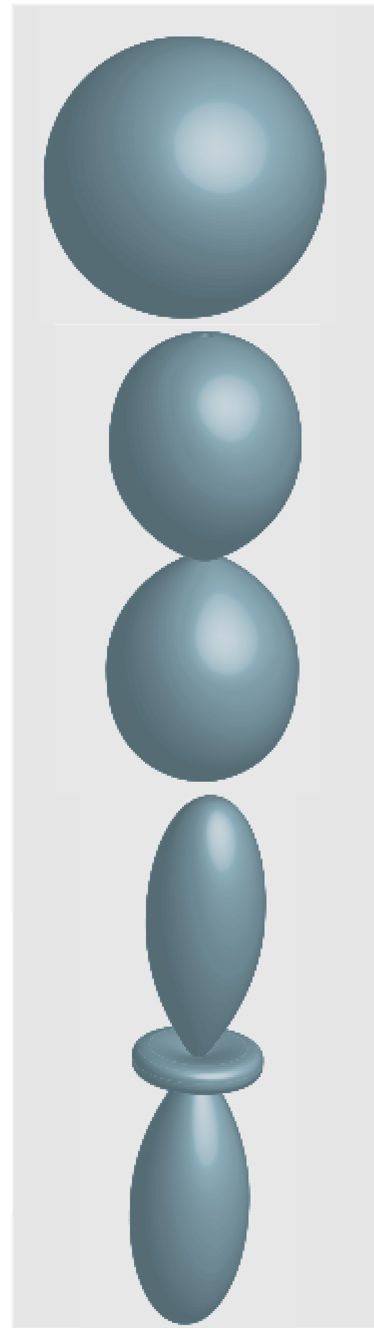

$l=2,\ m_l=0$


$l=3,\ m_l=0$

$Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)$



${Y^2}_{l,m_l}(\theta,\varphi)$



Η απόσταση από την αρχή των αξόνων είναι ανάλογη του ${Y^2}_{l,m_l}(\theta,\varphi)$

Το άτομο του Υδρογόνου

Θέτοντας $\Psi_{nlm_l}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(\mathrm{r})Y_{lm_l}(\theta,\varphi)$

$$\nabla^2\Psi_{nlm_l}(r,\theta,\varphi) = Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R_{nl}(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} + V(r) - E\right]R(r) = 0$$

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2Z}{na}\right)\left\{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}\rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

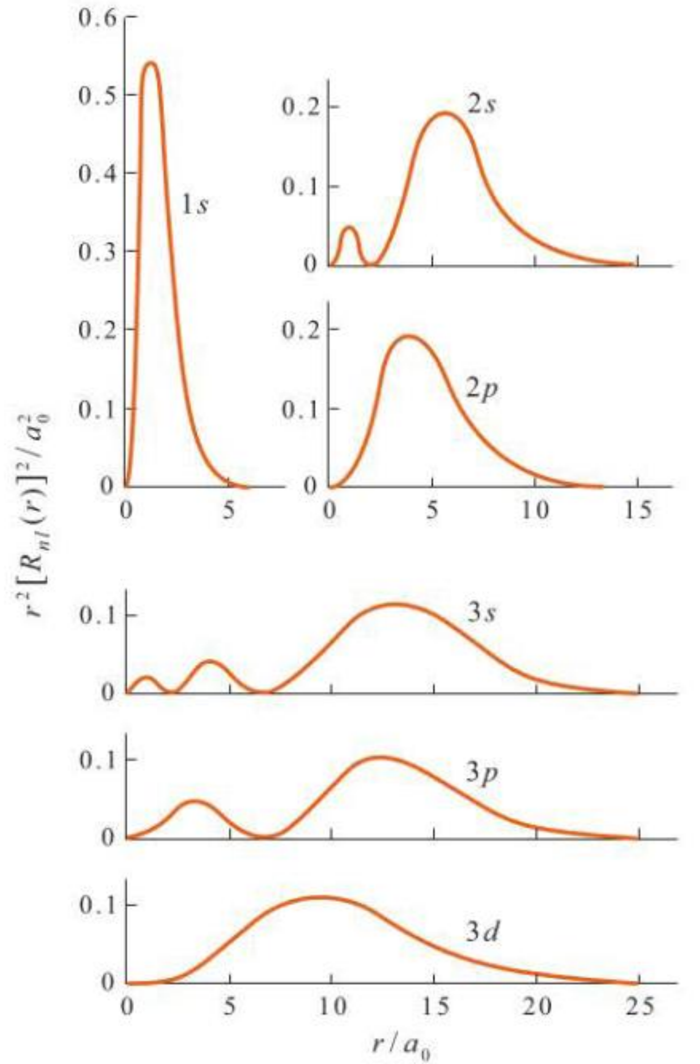
$$\rho = \frac{2Z}{na}\ \mathbf{r}$$

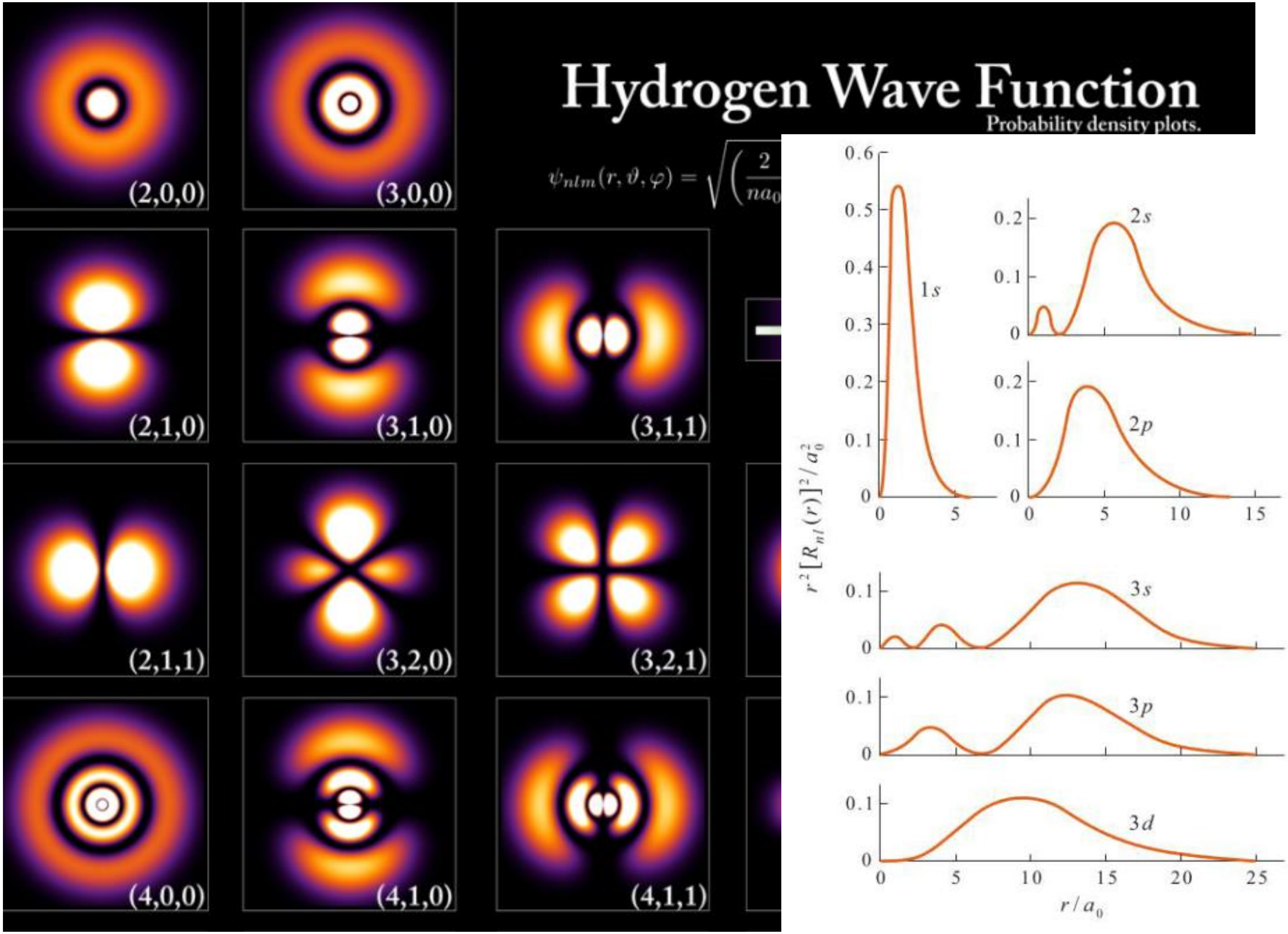
$$a = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$$

Z: Ατομικός Αριθμός
e: 1,602x10^{-19} C
ε_0: 8,854x10^{-12} C^2/(J m)
μ: ανηγμένη μάζα {πρωτονίου–e}

$$E_n = -\left[\frac{4\mu e^4}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2\hbar^2}\right]\frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3\ldots(l < n)$$

$$\boxed{E_n = -\frac{13.6\ \mathrm{eV}}{n^2}}$$





https://en.wikipedia.org/wiki/Atomic_orbital#/media/File:Hydrogen_Density_Plots.png

39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

http://www.nat.vu.nl/~wimu/EDUC/MNW-lect-2.pdf

https://en.wikipedia.org/wiki/Hydrogen_atom

Υπάρχουν τέσσερεις (4) κβαντικοί αριθμοί που απαιτούνται για την περιγραφή της κατάστασης ενός ηλεκτρονίου σε ένα άτομο.

1. Ο **κύριος κβαντικός αριθμός** n που περιγράφει την συνολική ενέργεια.

2. Ο κβαντικός αριθμός ℓ που λαμβάνει ακέραιες τιμές από 0 μέχρι n - 1της και συνδέεται με την **Τροχιακής Στροφορμή** L ως εξής:

$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)}\,\hbar$$

39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

https://en.wikipedia.org/wiki/Angular_momentum_operator

https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_number

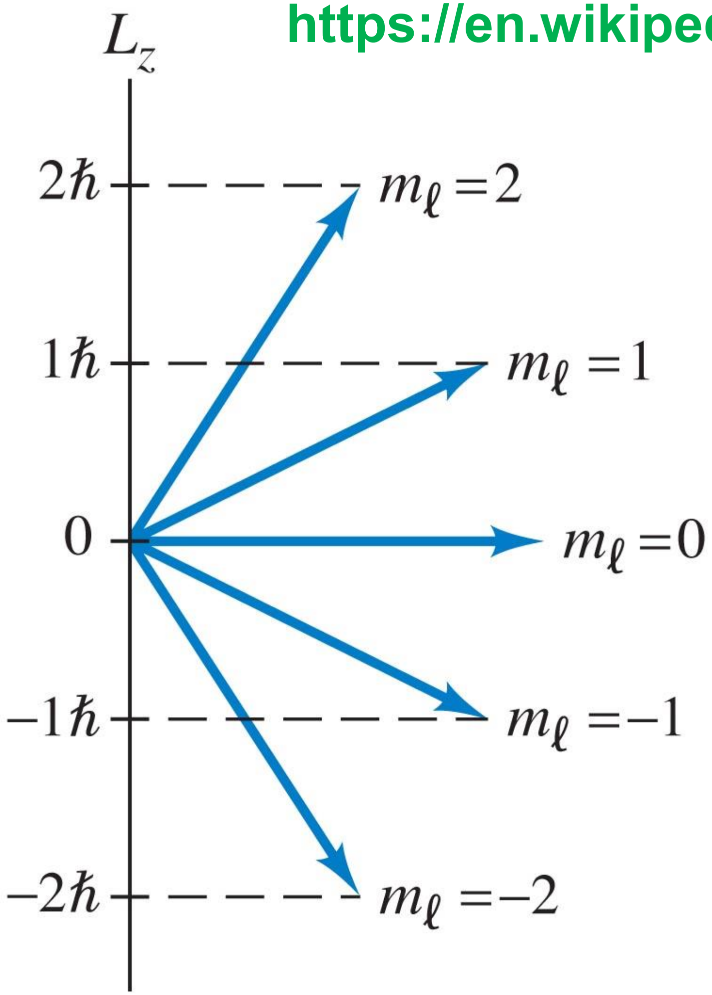
3. Ο **Μαγνητικός (αζιμουθιακός) κβαντικός αριθμός,** m_ℓ, που λαμβάνει ακέραιες τιμές από $+\ell$ μέχρι $-\ell$.

Εκφράζει την **προβολή της στροφορμής πάνω στον άξονα Z,** L_z :

$$L_z = m_\ell \hbar$$

39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_number



Η γραφική παράσταση δείχνει την κβάντωση της τροχιακής στροφορμής για $\ell = 2$.

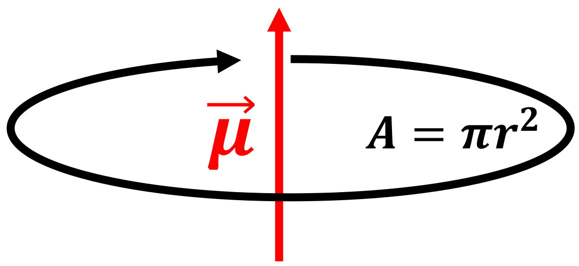
Η συνιστώσες της στροφορμής L_X και L_Y δεν έχουν τέτοια κβάντωση.

39.7 Μαγνητική Διπολική Ροπή. Συνολική Στροφορμή

https://en.wikipedia.org/wiki/Electron_magnetic_moment

Εάν θεωρήσουμε ότι το ηλεκτρόνιο κινείται σε κυκλική τροχιά με ακτίνα r και ταχύτητα v γύρω από τον πυρήνα, τότε η μαγνητική του ροπή δίδεται από τη σχέση:

$$|\vec{\mu}| = IA = \frac{-e}{T}\pi r^2 = -\frac{e}{\frac{2\pi r}{v}}\pi r^2 = -\frac{evr}{2} = \frac{e}{2m}(mvr) = \frac{e}{2m}\left|\vec{L}\right|$$



$$\vec{\mu} = -\frac{1}{2}\frac{e}{m}\vec{\mathbf{L}}$$

Όπου το μέτρο της στροφορμής είναι $L = mvr$.

Η εξίσωση αυτή, αν και απορρέει από την κλασική μηχανική/ηλεκτρομαγνητισμό ισχύει και στην κβαντική μηχανική, απλά η στροφορμή είναι κβαντισμένη.

39.7 Μαγνητική Διπολική Ροπή. Συνολική Στροφορμή

Η συνιστώσα της μαγνητικής διπολικής ροπής στο άξονα z, δηλ. τη διεύθυνση ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, δίδεται από τη σχέση:

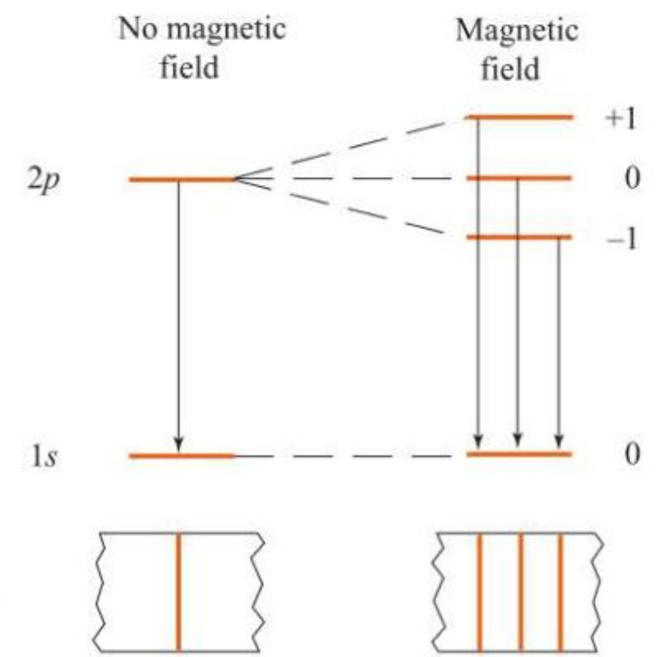
$$\mu_z = -\frac{e\hbar}{2m} m_\ell .$$

Ορίζουμε τη μαγνητόνη του Bohr ως: $$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}.$$

Και επομένως: $$\mu_z = -\mu_B m_\ell .$$

Επομένως, ένα άτομο που βρίσκεται μέσα σε μαγνητικό πεδίο, θα μετατοπίσει τα ενεργειακά του επίπεδα αναλόγως με την τιμή του m_l. **Αυτό είναι το φαινόμενο του Zeeman.**

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



39.7 Μαγνητική Διπολική Ροπή. Συνολική Στροφορμή

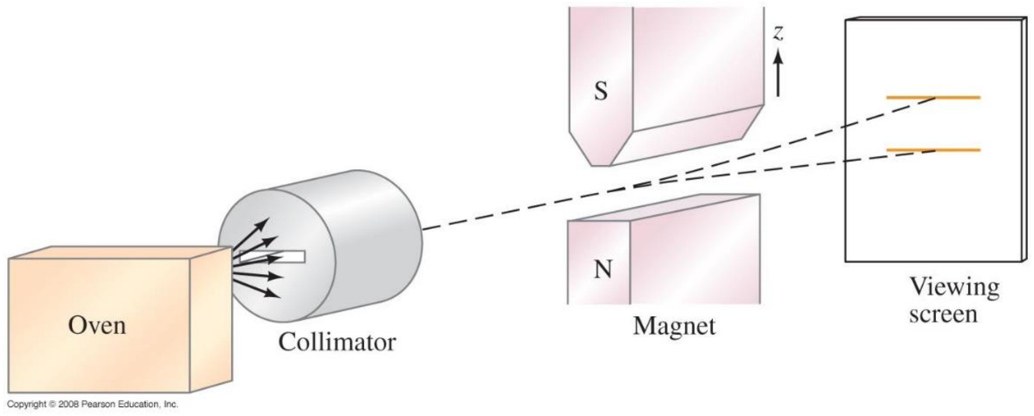
Στο πείραμα των Stern-Gerlach μια δέσμη ατόμων διέρχεται από ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο. Το πεδίο, προκαλεί απόκλιση στη διεύθυνση της δέσμης ανάλογη με τη μαγνητική διπολική ροπή των ατόμων.

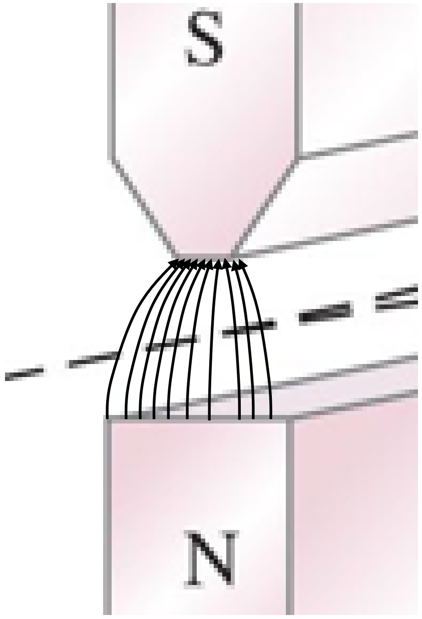
Ο κλασικός ηλεκτρομαγνητισμός προβλέπει μια συνεχή κατανομή στις γωνίες απόκλισης της μοριακής δέσμης.

39.7 Μαγνητική Διπολική Ροπή. Συνολική Στροφορμή

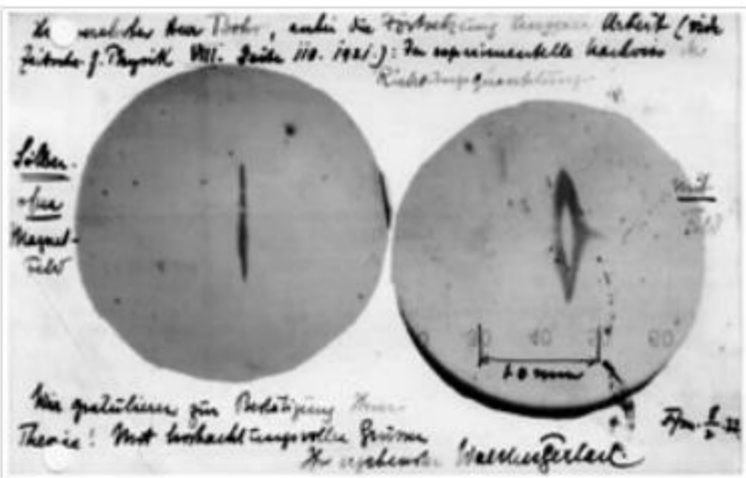
https://en.wikipedia.org/wiki/Stern–Gerlach_experiment

Αντίθετα, οι Stern-Gerlach παρατήρησαν «διακριτές γωνίες απόκλισης» που ερμηνεύτηκαν ως κβάντωση της μαγνητικής διπολικής ροπής.





https://www.youtube.com/watch?v=rg4Fnag4V-E



Postcard from Gerlach to Bohr. Image courtesy of Niels Bohr Archive, Copenhagen.

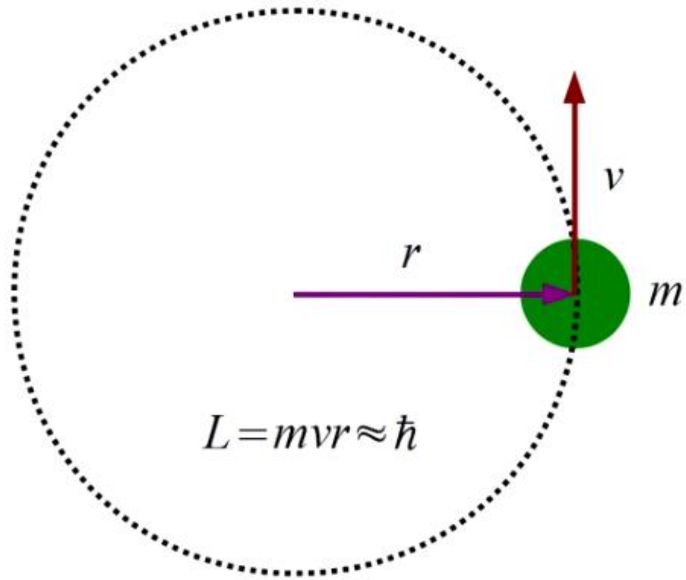
After venting to release the vacuum, Gerlach removed the detector flange. But he could see no trace of the silver atom beam and handed the flange to me. With Gerlach looking over my shoulder as I peered closely at the plate, we were surprised to see gradually emerge the trace of the beam. . . . Finally we realized what [had happened]. I was then the equivalent of an assistant professor. My salary was too low to afford good cigars, so I smoked bad cigars. These had a lot of sulfur in them, so my breath on the plate turned the silver into silver sulfide, which is jet black, so easily visible. It was like developing a photographic film.[7]

7. D. Herschbach, *Angew. Chemie Int. Ed. Engl.* **26**, 1225 (1987). The reminiscences by Stern included in this article are not actual quotations, but recollections cast in a first-person voice to capture his way of telling stories.

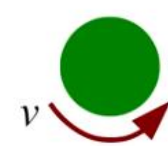
https://www.youtube.com/watch?v=W4zOYTIVU&list=PL193BC0532FE7B02C&index=15

1924 - The electron has a "two-valuedness not describable classically"

Wolfgang Pauli, 1945 Nobel Prize



$$L = mvr \approx \hbar$$

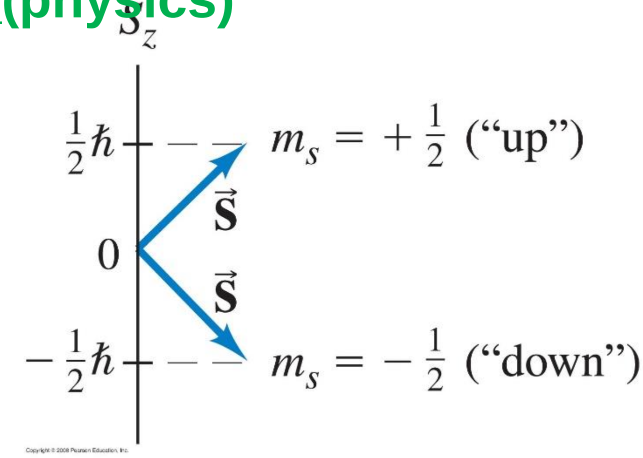


$$L = mvr \approx \hbar$$

if $r \leq 10^{-15}\,\mathrm{m}$, then $v \approx \dfrac{\hbar}{mr} \gg c$

39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

https://en.wikipedia.org/wiki/Spin_(physics)



4. Ο κβαντικός αριθμός, m_s, Spin, που για το ηλεκτρόνιο λαμβάνει τις τιμές +½ ή -½.

Η ανάγκη «ορισμού» αυτού του αριθμού προέκυψε πειραματικά.

Το Spin είναι μία εγγενής ιδιότητα των σωματιδίων, που από μαθηματικής πλευράς έχει χαρακτηριστικά στροφορμής. *Με άλλα λόγια δεν προκύπτει ο κβαντικός αυτός αριθμός από την ιδιοστροφορμή του ηλεκτρονίου!*

39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

Ο πίνακας κάνει μια σύνοψη των κύριων κβαντικών αριθμών.

TABLE 39–1 Quantum Numbers for an Electron

Name	Symbol	Possible Values
Principal	n	$1, 2, 3, \cdots, \infty$.
Orbital	ℓ	For a given n: ℓ can be $0, 1, 2, \cdots, n-1$.
Magnetic	m_ℓ	For given n and ℓ: m_ℓ can be $\ell, \ell-1, \cdots, 0, \cdots, -\ell$.
Spin	m_s	For each set of n, ℓ, and m_ℓ: m_s can be $+\frac{1}{2}$ or $-\frac{1}{2}$.

39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 40-1. **Πιθανές καταστάσεις για $n = 3$.** Πόσες είναι οι διαφορετικές δυνατές καταστάσεις για ένα ηλεκτρόνιο με κύριο κβαντικό αριθμό $n = 3$;

ΑΠΑΝΤΗΣΗ Για $n = 3$, το ℓ μπορεί να έχει τις τιμές ℓ =2, 1, 0. Για $\ell = 2$, το m_ℓ μπορεί να είναι 2, 1, 0,−1,−2 δηλαδή πέντε διαφορετικές τιμές. Για κάθε μια από αυτές, το m_s, μπορεί να είναι είτε πάνω είτε κάτω ($+\frac{1}{2}$ ή $-\frac{1}{2}$). Οπότε για ℓ =2 υπάρχουν 2×5=10 καταστάσεις. Για ℓ =1, το m_ℓ μπορεί να είναι 1, 0,−1 και επειδή το m_s είναι $+\frac{1}{2}$ ή $-\frac{1}{2}$ για κάθε μία από αυτές, έχουν 6 επιπλέον δυνατές καταστάσεις. Τέλος, για ℓ =0, το m_ℓ μπορεί να λαμβάνει μόνο την τιμή 0 και υπάρχουν συνολικά 2 καταστάσεις που αντιστοιχούν σε $m_s = +\frac{1}{2}$ και $-\frac{1}{2}$. Ο συνολικός αριθμός καταστάσεων είναι 10 + 6 + 2 = 18, όπως παρατίθενται στον παρακάτω πίνακα.

n	ℓ	m_ℓ	m_s	n	ℓ	m_ℓ	m_s
3	2	2	$\frac{1}{2}$	3	1	1	$\frac{1}{2}$
3	2	2	$-\frac{1}{2}$	3	1	1	$-\frac{1}{2}$
3	2	1	$\frac{1}{2}$	3	1	0	$\frac{1}{2}$
3	2	1	$-\frac{1}{2}$	3	1	0	$-\frac{1}{2}$
3	2	0	$\frac{1}{2}$	3	1	−1	$\frac{1}{2}$
3	2	0	$-\frac{1}{2}$	3	1	−1	$-\frac{1}{2}$
3	2	−1	$\frac{1}{2}$	3	0	0	$\frac{1}{2}$
3	2	−1	$-\frac{1}{2}$	3	0	0	$-\frac{1}{2}$
3	2	−2	$\frac{1}{2}$				
3	2	−2	$-\frac{1}{2}$				

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 40-2. **E και L για $n = 3$.** Προσδιορίστε α) την ενέργεια και β) την τροχιακή στροφορμή για ένα ηλεκτρόνιο σε κάθε μια από τις καταστάσεις του ατόμου του υδρογόνου του Παρ. 40.1.

ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ Η ενέργεια μιας κατάστασης εξαρτάται μόνο από το n, εκτός από τις πολύ μικρές διορθώσεις που περιγράφηκαν παραπάνω, τις οποίες θα αγνοήσουμε εδώ. Η ενέργεια υπολογίζεται όπως και στη θεωρία Bohr, $E_n = -13{,}6eV/n^2$. Για τη στροφορμή χρησιμοποιούμε την Εξ. 40.3.

ΛΥΣΗ α) Αφού n =3 για όλες τις καταστάσεις θα έχουν όλες και την ίδια ενέργεια,

$$E_3 = -\frac{13{,}6eV}{(3)^2} = -1{,}51eV.$$

β) Για ℓ =0, η Εξ. 40.3 δίνει

$$L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar = 0$$

Για ℓ =1,

$$L = \sqrt{121+1)}\hbar = \sqrt{2}\hbar = 1{,}49 \times 10^{-34} J \cdot s.$$

Για ℓ =0,

$$L = \sqrt{2(2+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar.$$

ΣΗΜΕΙΩΣΗ Οι τιμές της ατομικής στροφορμής εκφράζονται γενικά ως πολλαπλάσια του $\hbar$ ($\sqrt{2}\hbar$ ή $\sqrt{6}\hbar$ σε αυτήν την περίπτωση), αντί για μονάδες SI.

39.3 Οι κυματοσυναρτήσεις του ατομικού Υδρογόνου

http://www.nat.vu.nl/~wimu/EDUC/MNW-lect-2.pdf

https://en.wikipedia.org/wiki/Hydrogen_atom

Η κυματοσυνάρτηση της βασικής κατάστασης το ατομικού υδρογόνου, είναι:

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi r_0^3}} e^{-\frac{r}{r_0}}$$

Η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε ένα στοιχειώδες στοιχείο όγκου dV πέριξ κάποιου σημείου είναι $|\psi|^2\, dV$.

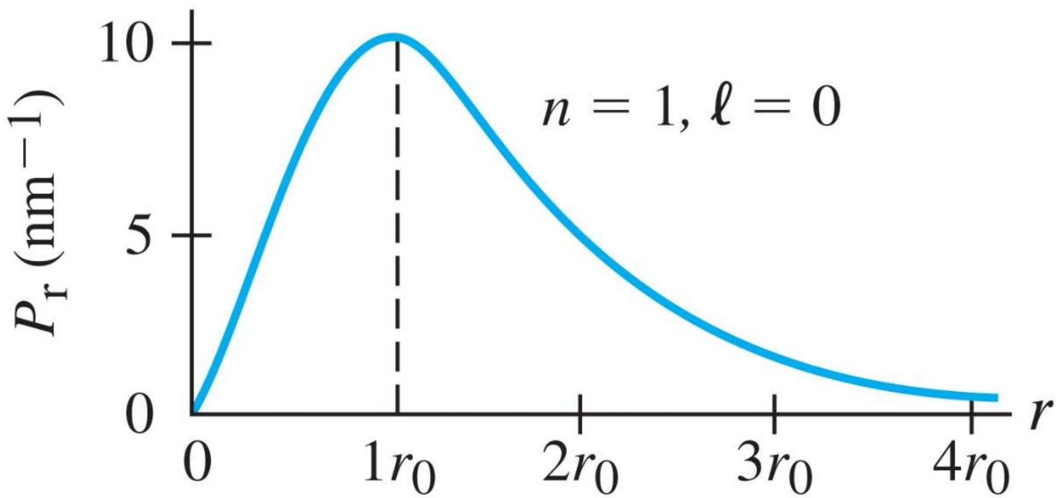
$$\psi_{100}^{*}\psi_{100} r^2 sin\theta dr d\theta d\varphi$$

39.3 Οι κυματοσυναρτήσεις του ατομικού Υδρογόνου

Η βασική κατάσταση έχει σφαιρική συμμετρία. Η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε απόσταση r και $r + dr$ από το πυρήνα είναι:

$$P_r dr = \int_0^{\pi} sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \, \psi_{100}^* \psi_{100} r^2 dr$$

$$P_r = 4\frac{r^2}{r_0^3} e^{-\frac{r}{r_0}}$$



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 40-3. **Πιθανότερη ακτίνα ηλεκτρονίου στο υδρογόνου.** Προσδιορίστε την πιο πιθανή απόσταση r από τον πυρήνα στην οποία μπορεί να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στη θεμελιώδη κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου.

ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ Το μέγιστο της καμπύλης στο Σχ. 40.7 αντιστοιχεί στην πιο πιθανή τιμή του r. Σε αυτό το σημείο, η καμπύλη έχει μηδενική κλίση, οπότε παίρνουμε την παράγωγο της Εξ. 40.7, την εξισώνουμε με το μηδέν και την επιλύουμε ως προς r.

ΛΥΣΗ Έχουμε

$$\frac{d}{dr}\left(4\frac{r^2}{r_0^3}e^{-\frac{2r}{r_0}}\right)=0\left(8\frac{r}{r_0^3}-\frac{8r^2}{r_0^4}\right)e^{-\frac{2r}{r_0}}=0$$

Επειδή το $e^{-\frac{2r}{r_0}}$ γίνεται μηδέν μόνο για $r=\infty$, θα πρέπει να είναι μηδενικός ο όρος στην παρένθεση:

$$8\frac{r}{r_0^3}-8\frac{r^2}{r_0^4}=0.$$

Οπότε

$$\frac{r}{r_0^3}=\frac{r^2}{r_0^4}$$

ή

$$r=r_0.$$

Η πιο πιθανή ακτινική απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα, σύμφωνα με την κβαντομηχανική είναι η ακτίνα Bohr, μια ενδιαφέρουσα σύμπτωση.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 40-4. **Υπολογισμός πιθανότητας.** Καθορίστε την πιθανότητα εντοπισμού του ηλεκτρονίου σε ακτινική απόσταση ίση με δυο ακτίνες Bohr για τη θεμελιώδη κατάσταση του υδρογόνου.

ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ Θα πρέπει να ολοκληρώσουμε το P_r από $r=0$ έως $r=2r_0$.

ΛΥΣΗ Θέλουμε να βρούμε το

$$P=\int_{r=0}^{2r_0}|\psi|^2 dV=\int_0^{2r_0} 4\frac{r^2}{r_0^3}e^{-\frac{2r}{r_0}}dr.$$

Αριχικά κάνουμε την αντικατάσταση

$$x=2\frac{r}{r_0}$$

και στη συνέχεια ολοκληρώνουμε κατά παράγοντες ($\int u dv = uv - \int v du$) θέτοντας $u=x^2$ και $dv=e^{-x}dx$ (και λαμβάνοντας υπόψη ότι $dx=2dr/r_0$ και ότι το άνω όριο είναι $x=2(2r_0)/r_0=4$):

$$P=\frac{1}{2}\int_{x=0}^{4}x^2e^{-x}dx=\frac{1}{2}\left[-x^2e^{-x}+\int 2xe^{-x}dx\right]\Bigg|_0^4.$$

Ολοκληρώνουμε κατά τον ίδιο τρόπο και το δεύτερο όρο με $u=2x$ και $dv=e^{-x}dx$:

$$P=\frac{1}{2}\left[-x^2e^{-x}-2xe^{-x}+2\int e^{-x}dx\right]\Bigg|_0^4=(-\frac{1}{2}x^2-x-1)e^{-x}\Bigg|_0^4.$$

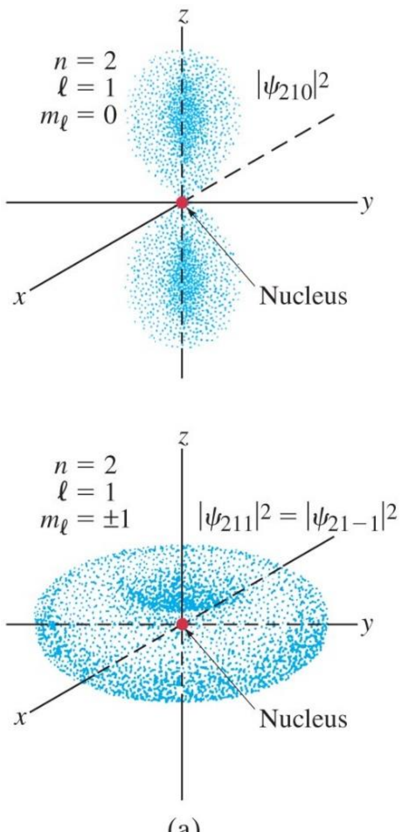
Υπολογίζουμε την παραπάνω σχέση στο $x=0$ και $x=4$:

ΣΗΜΕΙΩΣΗ Το παραπάνω αποτέλεσμα εξαρτάται από την κατάλληλη κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης, η οποία πραγματοποιείται όπως είδαμε θέτοντας $r\to\infty$ και ολοκληρώνοντας για όλο το χώρο: $\int_0^\infty|\psi|^2dV=1$, δηλαδή θέτοντας το άνω όριο της εξίσωσης με ∞.

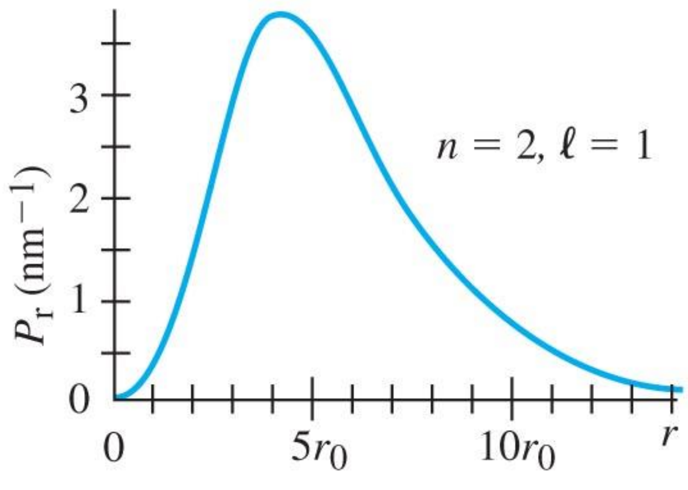
39.3 Οι κυματοσυναρτήσεις του ατομικού Υδρογόνου

https://en.wikipedia.org/wiki/Atomic_orbital

Τρεις «γωνιακές» κατανομές, και η κατανομή κατά μήκος της ακτίνας.



(a)



(b)

39.4 Σύνθετα άτομα, η αρχή του Pauli

https://en.wikipedia.org/wiki/Pauli_exclusion_principle

Σε άτομα πέραν του υδρογόνου, οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων πρέπει να ληφθούν υπόψη στον προσδιορισμό των ενεργειακών επιπέδων. Αυτό σημαίνει ότι η συνολική ενέργεια εξαρτάται τόσο από το n όσο και το ℓ.

Ένα ουδέτερο άτομο με Z ηλεκτρόνια, θα έχει και Z πρωτόνια. Ο Z ονομάζεται ατομικός αριθμός.

39.4 Σύνθετα άτομα, η αρχή του Pauli

https://en.wikipedia.org/wiki/Pauli_exclusion_principle

Η αρχή του Pauli ορίζει ότι:

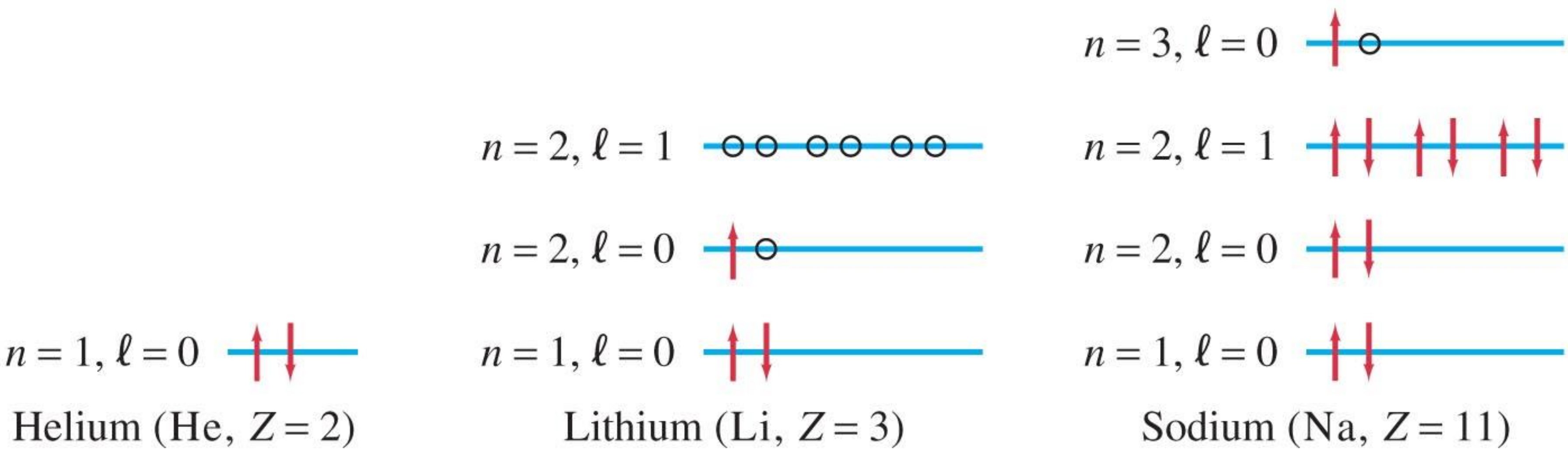
Δύο ηλεκτρόνια στο ίδιο άτομο δεν μπορούν να καταλαμβάνουν την ΙΔΙΑ κβαντική κατάσταση

Επειδή η κβαντική κατάσταση περιγράφεται από τους τέσσερεις κύριους κβαντικούς αριθμούς, κανένα ζεύγος ηλεκτρονίων στο ίδιο άτομο δεν μπορεί να ταυτίζει το σύνολο των κύριων κβαντικών αριθμών.

39.4 Σύνθετα άτομα, η αρχή του Pauli

https://en.wikipedia.org/wiki/Pauli_exclusion_principle

Παραδείγματα για τα άτομα He, Li, και Na.



39.5 Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων

https://en.wikipedia.org/wiki/Periodic_table

Είμαστε τώρα σε θέση να ερμηνεύσουμε την οργάνωση του περιοδικού πίνακα των στοιχείων.

Ηλεκτρόνια με τον ίδιο κύριο κβαντικό αριθμό n «ανήκουν» στον ίδιο «φλοιό». Ηλεκτρόνια με τούς ίδιους n και ℓ ανήκουν στους ίδιους «υποφλοιούς».

Η αρχή του Pauli περιορίζει το μέγιστο αριθμό ηλεκτρονίων σε κάθε υποφλοιό σε $2\ell(\ell+1)$.

39.5 Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων

TABLE 39–2 Ground-State Quantum Numbers

n	ℓ	m_ℓ	m_s
Helium, $Z = 2$			
1	0	0	$\frac{1}{2}$
1	0	0	$-\frac{1}{2}$
Lithium, $Z = 3$			
1	0	0	$\frac{1}{2}$
1	0	0	$-\frac{1}{2}$
2	0	0	$\frac{1}{2}$
Sodium, $Z = 11$			
1	0	0	$\frac{1}{2}$
1	0	0	$-\frac{1}{2}$
2	0	0	$\frac{1}{2}$
2	0	0	$-\frac{1}{2}$
2	1	1	$\frac{1}{2}$
2	1	1	$-\frac{1}{2}$
2	1	0	$\frac{1}{2}$
2	1	0	$-\frac{1}{2}$
2	1	−1	$\frac{1}{2}$
2	1	−1	$-\frac{1}{2}$
3	0	0	$\frac{1}{2}$

Για κάθε τιμή του ℓ δίδουμε ένα «όνομα» στο υποφλοιό.

s : sharp
p : principal
d : diffuse
f : fundamental

Οι ονομασίες προέκυψαν από την εμφάνιση των χαρακτηριστικών φασματοσκοπικών γραμμών

39.5 Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων

https://en.wikipedia.org/wiki/Periodic_table

Η ηλεκτρονική διαμόρφωση δίδεται με την αναγραφή του n, ακολουθούμενο από το «όνομα» του υποφλοιού με εκθέτη τον αριθμό των ηλεκτρονίων του.

Για παράδειγμα η ηλεκτρονική διαμόρφωση της βασικής κατάστασης του του Νατρίου είναι:

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$$

39.5 Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων

Ο πίνακας εμφανίζει τη διαμόρφωση των εξωτερικών ηλεκτρονίων.

TABLE 39–3 Value of ℓ

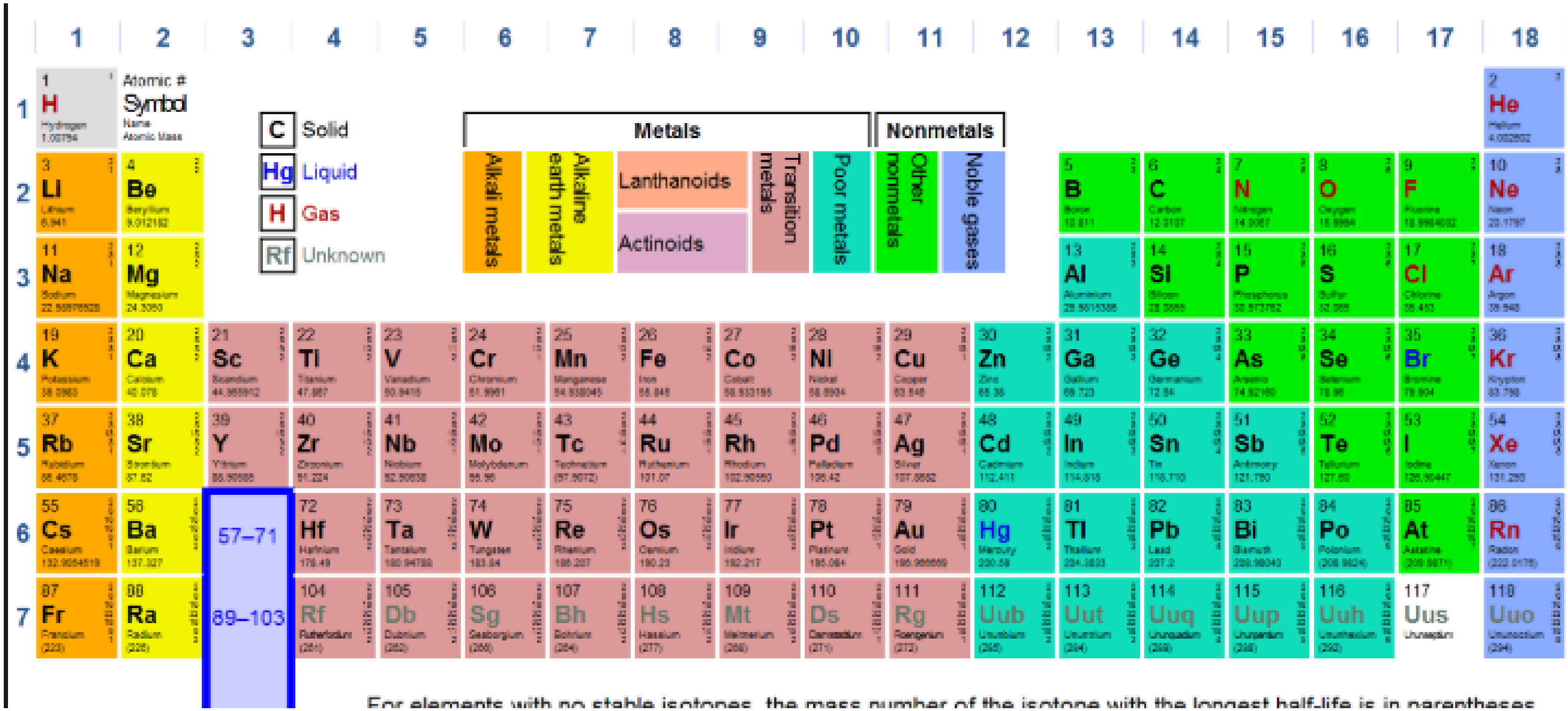
Value of ℓ	Letter Symbol	Maximum Number of Electrons in Subshell
0	*s*	2
1	*p*	6
2	*d*	10
3	*f*	14
4	*g*	18
5	*h*	22
⋮	⋮	⋮

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 40-5. **Διάταξη Ηλεκτρονίων.** Ποιες από τις ακόλουθες διατάξεις ηλεκτρονίων είναι δυνατές και ποιες όχι: α) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^3$, β) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5 4s^2$, γ) $1s^2 2s^2 2p^6 2d^1$;

ΑΠΑΝΤΗΣΗ α) Δεν είναι επιτρεπτή, επειδή για την υποστοιβάδα s της στοιβάδας M (n =3) δίνονται πολλά ηλεκτρόνια (τρία). Η υποστοιβάδα s έχει m_ℓ =0, με δυο υποδοχές μόνο για ηλεκτρόνια με σπιν πάνω και σπιν κάτω. β) Επιτρέπεται, αλλά είναι διεγερμένη κατάσταση. Ένα από τα ηλεκτρόνια από την υποστοιβάδα $3p$ έχει μεταπηδήσει στην υποστοιβάδα $4s$. Επειδή υπάρχουν 19 ηλεκτρόνια, το στοιχείο είναι το ποτάσιο. γ) Δεν είναι επιτρεπτή, επειδή δεν υπάρχει d (ℓ =2) υποστοιβάδα στη στοιβάδα $n = 2$ (Πίν. 40.1). Το εξώτατο ηλεκτρόνιο θα πρέπει να βρίσκεται (τουλάχιστον) στη στοιβάδα $n = 3$.

39.5 Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων

Τα άτομα που φέρουν τον ίδιο αριθμό ηλεκτρονίων στην εξωτερική τους στοιβάδα (φλοιό), παρουσιάζουν «παρόμοια χημική συμπεριφορά», και καταλαμβάνουν την ίδια στήλη στον περιοδικό πίνακα.



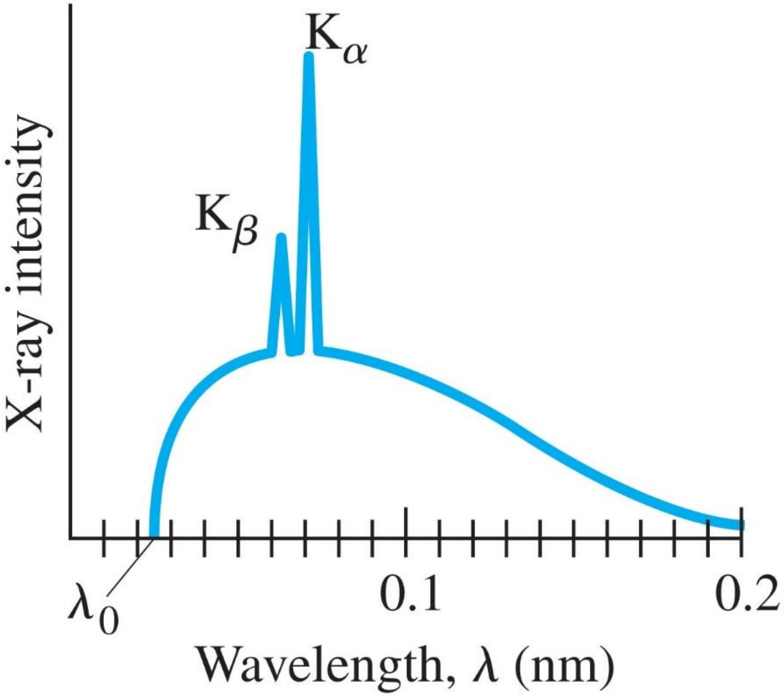
39.6 Ατομικός Αριθμός και φάσματα ακτινών Χ

Το ουσιαστικό φορτίο που «βλέπει» ένα ηλεκτρόνιο στον πυρήνα είναι «μικρότερο» από το πραγματικό λόγω θωράκισης από τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια. Μόνο τα ηλεκτρόνια της πρώτης στοιβάδας «βλέπουν» το πραγματικό φορτίο του πυρήνα.

Η ενέργεια ενός επιπέδου είναι ανάλογο του Z^2, και συνεπώς τα μήκη κύματος που απαιτούν μεταπτώσεις από την n = 1 κατάσταση για άτομα με μεγάλο Z, αντιστοιχούν σε ακτίνες Χ.

39.6 Ατομικός Αριθμός και φάσματα ακτινών Χ

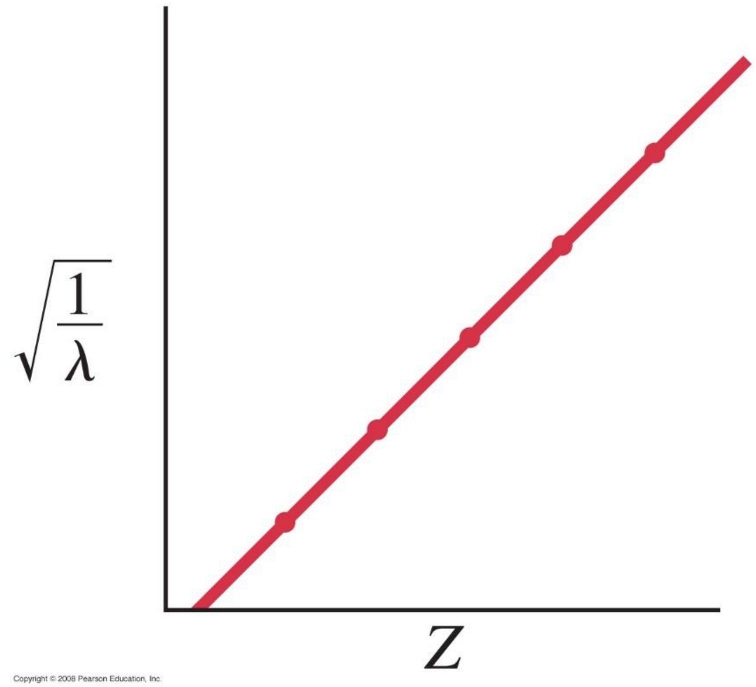
Ηλεκτρόνια εσωτερικών στοιβάδων μπορεί να εξαχθούν από δέσμες ηλεκτρονίων με πολύ υψηλή ενέργεια. Παράγεται με αυτό το τρόπο ένα χαρακτηριστικό φάσμα για κάθε άτομο.



Το φάσμα αυτό είναι για το Μολυβδαίνιο.

39.6 Ατομικός Αριθμός και φάσματα ακτινών Χ

Μετρώντας αυτά τα χαρακτηριστικά φάσματα επιτρέπει τόσο τον προσδιορισμό της ενέργειας των εσωτερικών στοιβάδων όσο και το Z, επειδή τα μήκη των κυμάτων των βραχυτέρων ακτινών Χ είναι αντιστρόφως ανάλογες Z^2.



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 40-6. **Μήκος κύματος ακτίνων-Χ.** Εκτιμήστε το μήκος κύματος για μια μετάβαση από $n = 2$ σε $n = 1$ του μολυβδένιου ($Z = 42$). Ποια είναι η ενέργεια ενός τέτοιου φωτονίου;

ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ Θα εφαρμόσουμε τον τύπο του Bohr, Εξ. 38.15 για $1/\lambda$, αντικαθιστώντας το Z^2 με το $(Z-1)^2 = (41)^2$.

ΛΥΣΗ Η Εξ. 38.15 δίνει

$$\frac{1}{\lambda} = \left(\frac{e^4 m}{8\epsilon_0^2 h^3 c}\right)(Z-1)^2\left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

όπου $n = 2$ και $n' = 1$. Αντικαθιστώντας τις αριθμητικές τιμές:

$$\frac{1}{\lambda} = (1{,}097 \times 10^7 m^{-1})(41)^2\left(\frac{1}{1} - \frac{1}{4}\right) = 1{,}38 \times 10^{10} m^{-1}.$$

Οπότε

$$\lambda = \frac{1}{1{,}38 \times 10^{10} m^{-1}} = 0{,}072 nm.$$

Η τιμή αυτή είναι αρκετά κοντινή με τη μετρούμενη (Σχ. 40.11) 0,071 nm. Κάθε ένα από αυτά τα φωτόνια θα έχει ενέργεια (σε eV):

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda} = \frac{(6{,}63 \times 10^{-34} J \cdot s)(3{,}00 \times 10^8 m/s)}{(7{,}2 \times 10^{-11} m)(1{,}60 \times 10^{-19} J/eV)} = 17 keV.$$

Ο παρονομαστής περιλαμβάνει το συντελεστή μετατροπής από joules σε eV.

39.6 Ατομικός Αριθμός και φάσματα ακτινών Χ

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 40-7. **Προσδιορισμός ατομικού αριθμού.** Τα ηλεκτρόνια υψηλής ενέργειας χρησιμοποιούνται για το βομβαρδισμό ενός άγνωστου υλικού. Η μεγαλύτερη αιχμή εμφανίζεται για ακτίνες-Χ που εκπέμπονται με ενέργεια 66,3 keV. Κάντε μια υπόθεση ποιο υλικό είναι αυτό.

ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ Η μεγαλύτερη ένταση ακτίνων-Χ συμπίπτει γενικά με τη γραμμή K_α (Σχ. 40.11) και συμβαίνει όταν εξωτερικά ηλεκτρόνια υψηλής ενέργειας συγκρούονται με ηλεκτρόνια της στοιβάδας K (εσώτατη τροχιά, $n = 1$) αποδεσμεύοντάς τα και η θέση τους καταλαμβάνεται από ηλεκτρόνια της στοιβάδας L ($n = 2$). Χρησιμοποιούμε το μοντέλο Bohr και υποθέτουμε, ότι τα ηλεκτρόνια «αισθάνονται» ένα φορτίο πυρήνα $Z - 1$ (θωρακίζεται από ενα ηλεκτρόνιο).

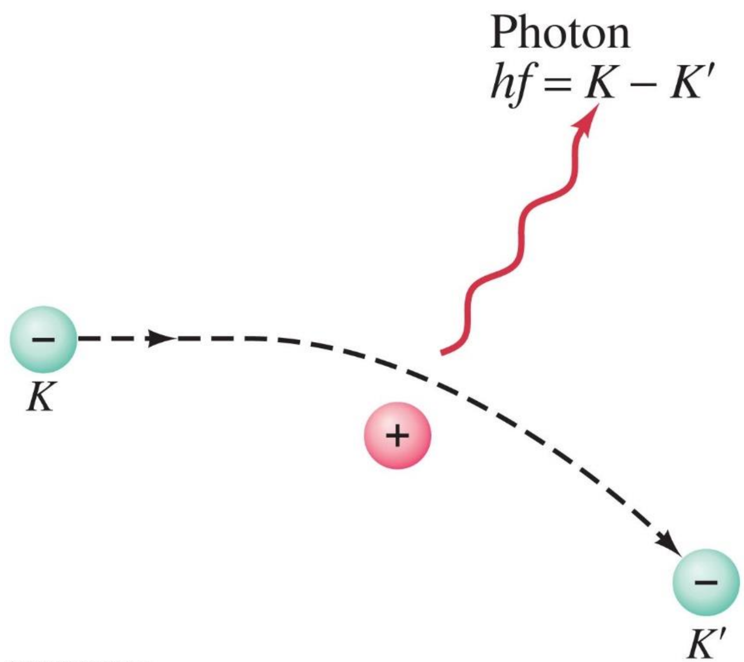
ΛΥΣΗ Η μετάβαση υδρογόνου $n = 2$ σε $n = 1$ θα εκλύσει περίπου 10,2 eV (βλ Σχ. 37.26 ή Παρ. 37.13). Η ενέργεια E είναι ανάλογη του Z^2 (Εξ. 37.14) ή ορθότερα του $(Z-1)^2$, επειδή ο πυρήνας θωρακίζεται από το ένα ηλεκτρόνιο στην κατάσταση 1s (βλ. παραπάνω), οπότε μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τους λόγους:

$$\frac{(Z-1)^2}{1^2} = \frac{66{,}3 \times 10^3 eV}{10{,}2 eV} = 6{,}50 \times 10^3,$$

άρα $Z - 1 = \sqrt{6500} = 81$ και $Z = 82$. Επομένως το στοιχείο είναι ο μόλυβδος.

39.6 Ατομικός Αριθμός και φάσματα ακτινών Χ

Το συνεχές κομμάτι του φάσματος των ακτινών Χ προέρχεται από ηλεκτρόνια που «επιβραδύνονται» λόγω αλληλεπιδράσεων μέσα στο υλικό και επομένως εκπέμπουν ακτινοβολία. Η ακτινοβολία ονομάζεται *bremsstrahlung* (das Bremse=το φρένο, die Strahlung=ακτινοβολία radiation”).



39.6 Ατομικός Αριθμός και φάσματα ακτινών Χ

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 40-8. **Μήκος κύματος αποκοπής.** Ποιο είναι το φωτόνιο ακτίνων-Χ μικρότερου μήκους κύματος που εκπέμπεται σε ένα σωλήνα ακτίνων-Χ υπό τάση 50 kV;

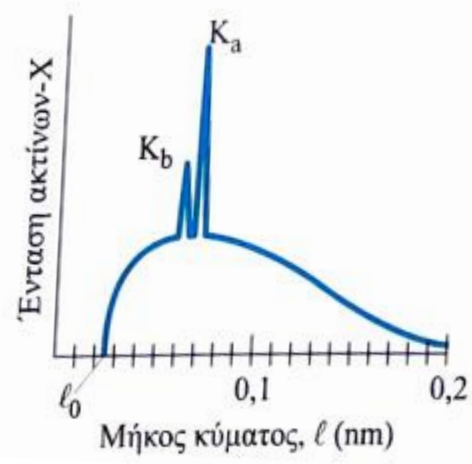
ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ Τα ηλεκτρόνια που προσκρούουν στο στόχο έχουν όλα μια κινητική ενέργεια 50 kV. Τα φωτόνια μικρότερου μήκους κύματος οφείλονται σε συγκρούσεις, στις οποίες όλη η κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων προσδίδεται στο φωτόνιο, οπότε $K = eV = hf_0$.

ΛΥΣΗ Από την Εξ. 40.10 έχουμε

$$\lambda_0 = \frac{hc}{eV} = \frac{(6{,}63 \times 10^{-34} J \cdot s)(3{,}0 \times 10^{8} m/s)}{(1{,}6 \times 10^{-19} C)(5{,}0 \times 10^{4} V)} = 2{,}5 \times 10^{-11} m,$$

ή 0,025 nm.

ΣΗΜΕΙΩΣΗ Το αποτέλεσμα συμφωνεί πολύ καλά με το πείραμα, Σχ. 40.11.



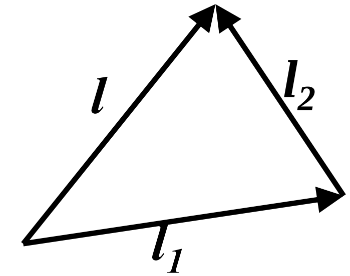
39.7 Μαγνητική Διπολική Ροπή. Συνολική Στροφορμή

Η συνολική στροφορμή (διανυσματικό άθροισμα τροχιακής στροφορμής και spin angular momenta) είναι επίσης κβαντισμένη:

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

Η κατάσταση ενός ηλεκτρονίου συμβολίζεται ως nL_j, όπως π.χ. $2P_{3/2}$ ($n = 2$, $\ell = 1, j = 3/2$) and $1S_{1/2}$ (θεμελιώδης κατάσταση του Υδρογόνου). Ο συμβολισμός αυτός ονομάζεται φασματοσκοπικός όρος.

5. *Ατομική Φασματοσκοπία*



Για δύο ηλεκτρόνια η *συνολική στροφορμή και το συνολικό spin* προσδιορίζεται από *διανυσματικό άθροισμα* δηλ.

$$L = l_1 + l_2,\ l_1 + l_2 - 1,\ l_1 + l_2 - 2,\ \ldots |l_1 - l_2|$$

$$S = s_1 + s_2,\ s_1 + s_2 - 1,\ s_1 + s_2 - 2,\ \ldots |s_1 - s_2|$$

***Η συνολική στροφορμή ως προς τον άξονα z* προσδιορίζεται από το *αλγεβρικό άθροισμα* δηλ.**

$$m_L = m_{l_1} + m_{l_2}$$

***Φασματοσκοπικοί Όροι*: $^{2S+1}L_J$ όπου**

$$J = L + S,\ L + S - 1,\ L + S - 2, \ldots, |L - S|$$

Π.χ. Για sp:

$$\left.\begin{matrix} l_1 = 0 \\ l_2 = 1 \end{matrix}\right\} L = 1$$

$$\left.\begin{matrix} s_1 = \frac{1}{2} \\ s_2 = \frac{1}{2} \end{matrix}\right\} \begin{matrix} S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \\ S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} - 1 = 0 \end{matrix}$$

$$\left.\begin{matrix} L = 1 \\ S = 1 \end{matrix}\right\} J = 2, 1, 0 \qquad \left.\begin{matrix} L = 1 \\ S = 0 \end{matrix}\right\} J = 1$$

Οι όροι που προκύπτουν είναι: $^3P_{2,1,0}$, $^1P_1$

	s		p			
	m_1	**s_1**	**m_2**	**s_2**	**M_L**	**M_S**
1	0	0,5	-1	0,5	-1	1
2	0	0,5	0	0,5	0	1
3	0	0,5	1	0,5	1	1
4	0	0,5	-1	-0,5	-1	0
5	0	0,5	0	-0,5	0	0
6	0	0,5	1	-0,5	1	0
7	0	-0,5	-1	-0,5	-1	-1
8	0	-0,5	0	-0,5	0	-1
9	0	-0,5	1	-0,5	1	-1
10	0	-0,5	-1	0,5	-1	0
11	0	-0,5	0	0,5	0	0
12	0	-0,5	1	0,5	1	0

- **Γράφουμε όλους τους δυνατούς συνδυασμού των ζευγών (m_i,s_i)**
- **Υπολογίζουμε τα αθροίσματα M_L, M_S**
- **Προσδιορίζουμε αριθμό των ισοδύναμων ζευγών (M_L, M_S) και σχηματίζουμε πίνακα**

$m_L \backslash m_s$	**1**	**0**	**–1**
1	1	2	1
0	1	2	1
–1	1	2	1

Από τις μέγιστες τιμές των M_L, M_S προσδιορίζουμε σχηματίζουμε τον *μέγιστο φασματοσκοπικό όρο* (εδώ είναι ^3P) και αφαιρούμε τα ζεύγη που αντιστοιχούν στο όρο αυτό από τον πίνακα.

$m_L \backslash m_s$	**1**	**0**	**–1**
1	1	2	1
0	1	2	1
–1	1	2	1

Αφαιρούμε τις ^3P καταστάσεις (3)

$m_L \backslash m_s$	**1**	**0**	**–1**
1	0	1	0
0	0	1	0
–1	0	1	0

Αφαιρούμε τις ^1P καταστάσεις (1)

$m_L \backslash m_s$	**1**	**0**	**–1**
1	0	0	0
0	0	0	0
–1	0	0	0

Οι τιμές του *J* υπολογίζονται από την σχέση

$$J = L+S,\ L+S-1,\ L+S-2,\ldots,\ |L-S|$$

Δηλ. έχουμε $^3P_{2,1,0}$ και $^1P_1$

Για κλειστά τροχιακά (πλήρως συμπληρωμένα) π.χ. s^2, p^6, d^{10} ο φασματοσκοπικός όρος που αντιστοιχεί είναι το $^1S_0$

p^2

	1	0	-1		m1	s1	m2	s2		mL	mS
1	ud				1	0,5	1	-0,5		2	0
2	u	u			1	0,5	0	0,5		1	1
3	u	d			1	0,5	0	-0,5		1	0
4	u		u		1	0,5	-1	0,5		0	1
5	u		d		1	0,5	-1	-0,5		0	0
6	d	u			1	-0,5	0	0,5		1	0
7	d	d			1	-0,5	0	-0,5		1	-1
8	d		u		1	-0,5	-1	0,5		0	0
9	d		d		1	-0,5	-1	-0,5		0	-1
10		ud			0	0,5	0	-0,5		0	0
11		u	u		0	0,5	-1	0,5		-1	1
12		u	d		0	0,5	-1	-0,5		-1	0
13		d	d		0	-0,5	-1	-0,5		-1	-1
14		d	u		0	-0,5	-1	0,5		-1	0
15			ud		-1	0,5	-1	-0,5		-2	0

mL\mS	1	0	-1
2	0	1	0
1	1	2	1
0	1	3	1
-1	1	2	1
-2	0	1	0

Αφαιρούμε τις ^1D καταστάσεις (1)

mL\mS	1	0	-1
2	0	0	0
1	1	1	1
0	1	2	1
-1	1	1	1
-2	0	0	0

Αφαιρούμε τις ^3P καταστάσεις (3)

mL\mS	1	0	-1
2	0	0	0
1	0	0	0
0	0	1	0
-1	0	0	0
-2	0	0	0

Αφαιρούμε τις ^1S καταστάσεις (1)

mL\mS	1	0	-1
2	0	0	0
1	0	0	0
0	0	0	0
-1	0	0	0
-2	0	0	0

Για G *καταστάσεις* και N ηλεκτρόνια ο αριθμός των συνδυασμών είναι

$$\# = \frac{G!}{N!(G-N)!}$$

G!=1x2x3x…xG
0!=1!=1

Π.χ. Για το p^2 G=6 και N=2 δηλ #=15

Οι φασματοσκοπικοί όροι είναι
$^1S_0$ $^1D_2$, $^3P_{2,1,0}$

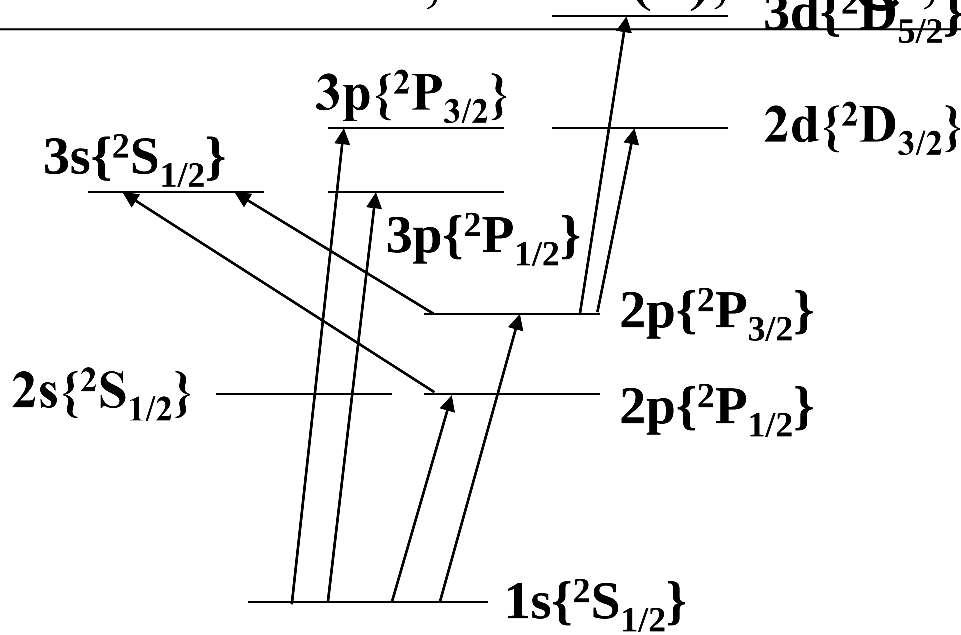
Ενώ με την σύντομη μέθοδο θα είχαμε
L=2, 1, 0 και S=1, 0 δηλ.
$^1S_0$ $^1D_2$,$^3P_{2,1,0}$, $^0P_{2,1,0}$,$^3S_0$, $^3D_2$

Κανόνες Επιλογής

- **Το φωτόνια είναι Bosons και έχουν Spin s_p=1 , m_s= ±1**
- **Κάθε φωτόνιο είναι «κυκλικά πολωμένο» !! m_s= ±1**
- **Γραμμικά πολωμένο είναι γραμμικός συνδυασμός $m_s = +1$ $m_s = -1$ δη. ουσιαστικά $m_s = 0$.**

Επομένως η *αρχή διατήρησης της στροφορμής* επιβάλει ότι για τις μεταπτώσεις που επιτρέπονται κατά την απορρόφηση ή εκπομπή *ενός φωτονίου* ισχύει

$$\Delta l = \pm 1,\ \Delta m = 0\ (\uparrow),\ \pm 1,\ \Delta J = 0,\ \pm 1\ (0 \text{–x}\rightarrow 0)$$



Μονάδες

$$E = h\nu = h\frac{c}{\lambda} = hc\tilde{\nu}$$

$E \equiv$ Ενέργεια (eV, J...)

$\tilde{\nu} \equiv$ κυματάρυθμοι, cm^{-1}

$$1eV \approx 8065{,}5\, cm^{-1}$$

$$1eV \approx \frac{1240}{\lambda(nm)}$$

39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

Οι μόνες «επιτρεπτές» μεταπτώσεις μεταξύ ενεργειακών επιπέδων, μετά την απορρόφηση ή εκπομπή ενός φωτονίου, είναι αυτές για τις οποίες ισχύει (Δες ΚΑΝΟΝΕΣ ΕΠΙΛΟΓΗΣ):

https://en.wikipedia.org/wiki/Selection_rule

$$\Delta \ell = \pm 1$$

Η πιθανότητα μιας «απαγορευμένης» μετάπτωσης είναι πολύ μικρή, και απαιτεί «διατάραξη» του συστήματος.