Βασικές σχέσεις, σταθερές

Ενέργεια σωματιδίου σε μονο-διάστατο φρέαρ δυναμικού μήκους L : $E_n = n^2h^2/8mL^2$ Κυματοσυνάρτηση : $\Psi_n(x) = \sqrt{2/L}\sin(n\pi x/L)$

Ενέργεια σωματιδίου σε περιφέρεια κύκλου ακτίνας r : $E_{m_\ell} = \frac{\hbar^2}{2I}m_\ell^2$, I = mr^2 : ροπή αδράνειας,

Στροφορμή : $L_z = \hbar m_\ell$, m_ℓ : 0, ±1, ±2, ±3, … Κυματοσυνάρτηση : $\Phi_{m_\ell}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}exp(im_\ell\varphi)$

Ενέργεια σωματιδίου σε επιφάνεια σφαίρας ακτίνας r : $E_\ell = \frac{\hbar^2}{2I}\ell(\ell+1)$, ℓ : 0, 1, 2, 3

Στροφορμή : $L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$, Προβολή στροφορμής : : $L_z = \hbar m_\ell$, m_ℓ : 0, ±1, ±2,…, ±ℓ

Κυματοσυνάρτηση : $Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi)$: σφαιρικές αρμονικές συναρτήσεις

Σφαιρικές αρμονικές

$l = 0$

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$l = 1$

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}$$

$$Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x\pm iy}{r}$$

$l = 2$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\frac{2z^2-x^2-y^2}{r^2}$$

$$Y_{2,\pm1} = \mp\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi} = \mp\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\frac{(x\pm iy)z}{r^2}$$

$$Y_{2,\pm2} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\left(\frac{x\pm iy}{r}\right)^2.$$

Πίνακας 9.1 Υδρογονοειδείς ακτινικές κυματοσυναρτήσεις

Τροχιακό	n	l	$R_{n,l}$
1s	1	0	$2\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}e^{-\rho/2}$
2s	2	0	$\frac{1}{8^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}(2-\rho)e^{-\rho/2}$
2p	2	1	$\frac{1}{24^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\rho e^{-\rho/2}$
3s	3	0	$\frac{1}{243^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}(6-6\rho+\rho^2)e^{-\rho/2}$
3p	3	1	$\frac{1}{486^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}(4-\rho)\rho e^{-\rho/2}$
3d	3	2	$\frac{1}{2.430^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\rho^2 e^{-\rho/2}$

$\rho = (2Z/na)r$ με $a = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/\mu e^2$. Για έναν απείρως βαρύ πυρήνα (ή για έναν που μπορεί να υποτεθεί ως τέτοιος), $\mu = m_e$ και $a = a_0$, η ακτίνα του Bohr. Η πλήρης κυματοσυνάρτηση λαμβάνεται με πολλαπλασιασμό του R με την κατάλληλη Y από τον Πίνακα 8.2.

Άτομο υδρογόνου H (Z=1) ή υδρογονοειδές ιόν: $E_n = -\left[\frac{\mu Z^2e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\right]\frac{1}{n^2} = -\frac{Z^2R_H}{n^2}$, Ακτίνα Bohr : $a_o = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} = 52{,}9\ pm$, $\rho = \frac{2Z}{na_o}r$

Ακτινική κυματοσυνάρτηση H (Z=1) ή υδρογονοειδούς ιόντος : $R_{nl}(r) = \left(\frac{2Z}{na_o}\right)^{3/2}\left\{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)e^{-(\rho/2)}$

Ενέργεια αλληλεπίδρασης τροχιακής στροφορμής-spin: $E_{\ell,s,j}() = (1/2)A[j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)]$

Δονητική και περιστροφική ενέργεια διατομικού : $\frac{E_{\upsilon,J}}{hc} = \tilde{\nu}_e\left[\upsilon+\frac{1}{2}\right] - \tilde{\nu}_e x_e\left[\upsilon+\frac{1}{2}\right]^2 + B_eJ(J+1) - D_JJ^2(J+1)^2 - \alpha_e\left[\upsilon+\frac{1}{2}\right]J(J+1)$

Περιστροφική σταθερά : $B = (\hbar^2/2I)$, $I = \mu r^2$

(I: ροπή αδράνειας, $\mu = m_1m_2/(m_1+m_2)$, ανηγμένη μάζα). Ισχύει επίσης : $B(cm^{-1}) = \frac{16{,}8576\,cm^{-1}}{I(amu\cdot A^{\circ 2})}$ $B(MHz) = \frac{505379{,}07\,MHz}{I(amu\cdot A^{\circ 2})}$

Συχνότητα αρμονικού ταλαντωτή : $\tilde{\nu}_o = \frac{1}{2\pi c}\sqrt{\frac{k}{\mu}}$ $\tilde{\nu}_o(cm^{-1}) \cong 130\sqrt{\frac{k(N/m)}{\mu(amu)}}$ Σχέση Kratzer : $D_J(cm^{-1}) = 4B_e^3/\tilde{\nu}_e^2$

Κυματοσυναρτήσεις : $\Psi_\upsilon(x) = N_\upsilon H_\upsilon(a^{1/2}x)e^{-ax^2/2}$ $\upsilon = 0,1,2,3\ldots$ $a = \left(\frac{k\mu}{\hbar^2}\right)^{1/2}$ $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ $N_\upsilon = (a\sqrt{\pi}2^\upsilon\upsilon!)^{-1/2}$

Πολυώνυμα Hermite : $H_o = 1$, $H_1 = 2\alpha^{1/2}x$, $H_2 = 4\alpha x^2-2$, $H_3 = 8\alpha^{3/2}x^3-12\alpha^{1/2}x$, $H_4 = 16\alpha^2x^4-48\alpha x^2+12$,

Δ. Άγγλος (anglos@uoc.gr)

Δυναμικό Morse : $V(q) = D_e\left(1 - e^{-\beta q}\right)^2$, Συχνότητα αναρμονικού ταλαντωτή : $\tilde{\nu}_e = \frac{\beta}{2\pi c}\sqrt{\frac{2D_e}{\mu}}$ Ισχύει επίσης : $x_e = \frac{\tilde{\nu}_e}{4D_e(cm^{-1})}$

Πληθυσμιακή κατανομή Boltzmann στα ενεργειακά επίπεδα συστήματος : $N_i = N\frac{g_i e^{-E_i/k_BT}}{\sum_i g_i e^{-E_i/k_BT}}$

N_i : Πληθυσμός στο ενεργειακό επίπεδο i, E_i : Ενέργεια του επιπέδου i, g_i : (Εκφυλισμός (αριθμός μικροκαταστάσεων) του επιπέδου i

Λόγος πληθυσμών μεταξύ 2 ενεργειακών επιπέδων, 1 και 2 : $\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2 e^{-E_2/k_BT}}{g_1 e^{-E_1/k_BT}} = \frac{g_2}{g_1}e^{-(E_2-E_1)/k_BT}$

Πληθυσμιακή κατανομή Boltzmann στα ενεργειακά επίπεδα μη ελαστικού στροφέα : $N_J \propto (2J+1)e^{-BJ(J+1)/k_BT}$

$J_{max} = \sqrt{\frac{k_BT}{2B}} - \frac{1}{2}$, $k_B = 0{,}69500\ cm^{-1}/K$

Φυσική διαπλάτυνση : $\delta\tilde{\nu} \approx \frac{5{,}31 cm^{-1}}{\tau(ps)}$ τ : χρόνος ζωής κατάστασης

Διαπλάτυνση Doppler : $\delta\nu_D = 7{,}16\times10^{-7}\nu_o\sqrt{\frac{T}{M}}$ (Hz ή cm^{-1})

Κανόνες επιλογής ηλεκτρονιακών μεταβάσεων στα διατομικά μόρια : $\Sigma \leftrightarrow \Sigma$, $\Pi \leftrightarrow \Sigma$, $\Delta \leftrightarrow \Pi$, $+ \leftrightarrow +$ $- \leftrightarrow -$ $g \leftrightarrow u$ $\Delta S = 0$

c = 2,9979x10^8 m/s

Ατομική μάζα (amu) : H=1, D=2, ^{7}Li=7.0, ^{9}Be=9.0, ^{10}B=10.0, ^{11}B=11.0, ^{12}C=12.0, ^{13}C=13.0, ^{14}C=13.0, ^{14}N=14.00,^{16}O=15.995, ^{19}F=19.0, ^{23}Na=22.99, ^{27}Al=26.98, ^{28}Si=27.98, ^{31}P=30.97, ^{32}S=32.07, ^{35}Cl=35.0, ^{37}Cl=37.0, ^{40}Ar=39.96, ^{39}K=38.964, ^{41}K=40.96, ^{40}Ca=39.963, ^{79}Br=7.9, ^{81}Br=80.9, ^{84}Kr=83.9, ^{107}Ag=106.95, ^{127}I=126.90

1amu=1.66x10^{-27}kgr m_e = 9.11x10^{-31} kgr

h = 6.626x10^{-34} Js R_H = 109677 cm^{-1} 1eV = 8065.54 cm^{-1} = 1.602x10^{-19} J (96.485 kJ/mol = 23.06 kcal/mol)

k_B = 1.38065x10^{-23} JK^{-1} k_B = 0.6950 $cm^{-1}K^{-1}$ e = 2.71828 e^{-1} = 0.36788

Δ. Άγγλος (anglos@uoc.gr)