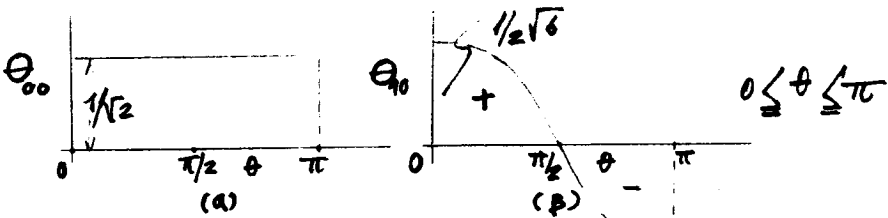


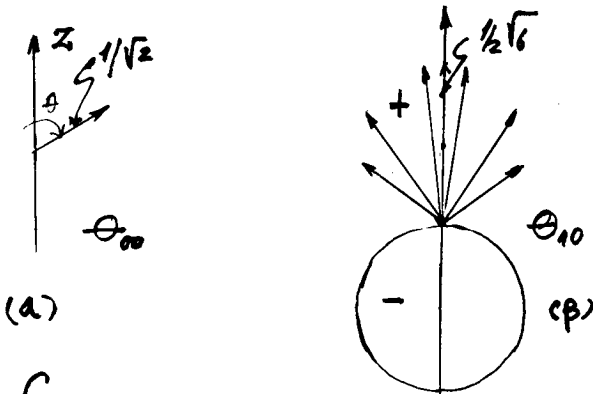
## Απεικονίσεις των ελλειψοειδών συναρτήσεων

Προφανώς οι ελλειψοειδείς συναρτήσεις διακρίνονται πλέον σε ελλειψοειδή 2<sup>ου</sup> είδους, σε περιμετρικώς ομοειδή ή κλειστάς διαφοροποιείται. Υπάρχουν δύο διαφορετικοί τρόποι απεικονίσεων των συναρτήσεων: Ο πρώτος είναι γραφικές παραστάσεις των συναρτήσεων, ο δεύτερος ισομετρικώς επιβεβαιώνει ότι ορισμένου επιπέδου οι δύο τρίτοι αντιστοιχούν. Η πρώτη μέθοδος της γραφικής παραστάσεως της πρώτης συναρτήσεως  $\Phi_{10}(r, \theta, \varphi)$  ή της  $1 \Phi_{10}(r, \theta, \varphi)$  <sup>12</sup> ή είναι και η κλειστή, η οποία έχει προς αντιστοιχίες μεταβλητές και ομοειδότητες για επιπέδου διάστασης  $\Phi$  των γραφικών παραστάσεων (πρώτη  $\Phi$  τα "εξιδείχθη" των επιπέδων  $\Phi(\Phi, r, \theta, \varphi) = 0$  όπου  $\Phi$  είναι η ζωντανή μεταβλητή). Ο δεύτερος προς όπως είναι επιδιόρθωση, όσον η μέθοδος δεν είναι άμεση να εξακριβωθεί ότι είναι πρώτη απεικόνιση, εξακριβώση όπως σε πρώτη των συναρτήσεων  $\Phi$ . Τέτοιες γραφικές παραστάσεις, όπως τα  $\Phi$ , αδη έχουν σχεδόν, π.χ. των ζωντανών συναρτήσεων  $R_{10}(r)$  (Σχ. 2, σ. 82) ή των ανεξάρτητων κατανομήτων  $[R_{10}(r)]^2 r^2$  (Σχ. 3, σ. 84). Από εφόσον είναι όπως γραφικές παραστάσεις σε πρώτο  $\Phi$  απεικονίσεις ως προς το πρώτο μέρος της  $\Phi$ ,  $\Phi$ ,  $\Phi$ , των σφαιρικών αρμονικών  $Y(\theta, \varphi)$ . Ης διακρίνουμε τώρα το μέρος  $\Phi_{10}(r)$  των  $Y(\theta, \varphi)$   $\Phi$  και κανονικοποιημένων (και πρώτων) περιμετρικώς Legendre Ης είναι τις συναρτήσεις  $\Theta_{00}$  και  $\Theta_{10}$ . Υποδεικνύουμε ότι  $\Theta_{00} = 1/\sqrt{2}$  και  $\Theta_{10} = \frac{1}{2}\sqrt{6} \cos \theta$ . Μπορούμε να είνουμε τις γραφικές παραστάσεις των συναρτήσεων αυτών απεικονιστικώς  $\Phi$  είναι "καρτεσιανώς"  $\Phi$  των  $\Theta$  ως κάποιο  $\Phi$   $\Phi$  ("Φαν των  $\gamma$ ") και των γωνιών  $\theta$  στον άξονα  $\Phi$  ("Φαν των  $\alpha$ "). Με τον τρόπο αυτό παίρνουμε τις γραφικές παραστάσεις τα Σχ. 4



Σχ. 4. Γραφική παράσταση των συναρτήσεων  $\theta_{00}$  και  $\theta_{01}$  σε φασε-  
 βολούς  $\theta$  είναι. Προφανώς οι δύο γραφικές παραστάσεις είναι σε  
 διαφορετικά κλίμακα.

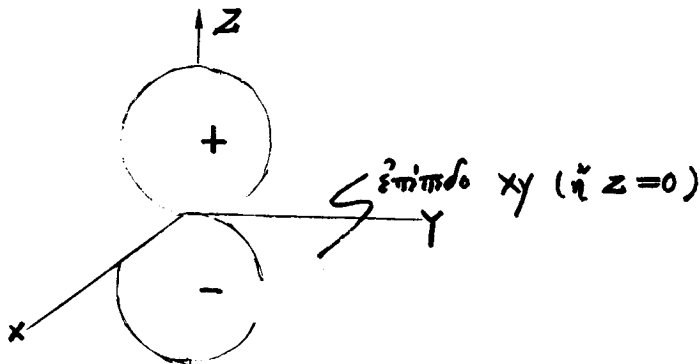
Το ευκολότερο όφελος είναι να χρησιμοποιήσουμε ορισμένες συνεκτιμήσεις  
 ως εξής: Έμφαζουμε την  $\theta$  είναι των  $\Sigma$  και η  $\theta$  είναι η γωνία με  
 το θετικό μέρος του  $\Sigma$  και  $\theta(0)$  η "πρόσδεσας" από το σημείο  
 διαχωρισμού. Στην περίπτωση απ  $\theta_{00}(\theta)$  παίρνουμε κλίμακα, δίνει η  
 συνάρτηση είναι βολής και ίση με  $1/\sqrt{2}$ , δηλ. ανεξάρτητα από  $\theta$ ,  
 Σχ. 5α.



Σχ. 5. Γραφική παράσταση σε κλίμακα συνεκτιμήσεις των  
 συναρτήσεων  $\theta_{00}$  (α) και  $\theta_{01}$  (β).

Στην περίπτωση απ  $\theta_{01}$  παίρνουμε δύο εξαρτημένες από σημείο  
 διαχωρισμού κλίμακα, Σχ. 5β. Το πρώτο μέρος (+) ορίζεται στην  
 περιοχή  $0 \leq \theta \leq \pi/2$ , το δε μέρος (-) στην  $\pi/2 < \theta \leq \pi$ .  
 Τώρα θα να απεικονίσει την εικόνα των γωνιακών συναρτήσεων χωριστά

Μπαρούνη ν' ερμηνεύουμε των  $|Y_{lm}(\theta, \phi)| = |\Theta(\theta)\Phi(\phi)|$ . Θέ-  
 ημελοποιήσαμε ποζιτές ανεξαρτημένες και η απόσταση από των  
 άξον των άξόνων εφ' αποτελεί των  $|Y_{lm}(\theta, \phi)|$ . Για μι' άσφακ  
 άσφακ 5 κατάσταση ( $l=0, m=0$ ) ή  $Y_{00}(\theta, \phi) = 1/\sqrt{4\pi}$  είναι  
 ανεξάρτητη των  $\theta, \phi$  και παίρνουμε όμοια άσφακ  $1/\sqrt{4\pi}$ . Για  
 κατάσταση  $l \neq 0$ , π.χ.  $P_2$  το γωνιώδες μέρος είναι  $Y_{20}(\theta, \phi) =$   
 $1/2 \sqrt{5} \cos^2 \theta$  και η γραφική παράσταση της  $|\Theta(\theta)\Phi(\theta)|$  απο-  
 ρεφύεται από δύο σφαίρες με το κέντρο τους επί των άξόνων των  
 $Z$  και ακτίμες στην θέση των άξόνων, Σχ. 6.



Σχ. 6. Γραφική παράσταση της  $|Y_{20}(\theta, \phi)|$

Γραφικές παραστάσεις των άριστων γωνιωδών παραστάσεων των  
 $P_x$  και  $P_y$  συναρτήσεων δίνουν ερμηνεύσιμες σφαίρες κατά μήκος  
 των άξόνων  $x$  και  $y$ . Έτσι ανά της  $|\Theta(\theta)\Phi(\phi)|$  κάνουμε  
 την γραφική παράσταση των  $|\Theta(\theta)\Phi(\phi)|^2$  οι σφαιρικές πηκτές  
 ανεξαρτητές τότε έχουν τις γνωστές άσφακ που ερμηνεύ-  
 νται των γωνιωδών παραστάσεων των  $P_x, P_y$  και  $P_z$  μαζί γαν  
 με "όγκο" (8).

Η δέσφακ μέθοδος όπως ήδη αναφέρθηκε είναι εδαφδομοζική  
 ερμηνεύσιμη. Χαρακτηρίζει λογ. ερμηνεύσιμη των άσφον ή ερμηνεύ-  
 σης  $|\Phi|^2$ , ή πιθανοζική πυκνότητας (και ή  $|\Phi|$ ) είναι σφαίρα.

Για φακική S η κυματοσυνάρτηση εξαρτάται μόνον από την r.  
π.χ.  $\psi_{15} = 1/\sqrt{\pi} (\frac{z}{a})^{3/2} e^{-z^2/a}$  άρα οι επιφάνειες είναι

επίπεδες επίπεδα r με κέντρο των άξονα των z άξονα, Σχ. 8.

Για να καθορίσουμε το μέγεθος των επιφανειών (το μέγεθος του φακικού) παίρνουμε διδακτική επιφάνεια ενός επιπέδου με πιθανότητα να έλθει το μήκτρονιο είναι π.χ. 0.90 ή 90%: Στην περίπτωση 15 έχουμε

$$\int |\psi_{100}|^2 dv = 0.90$$

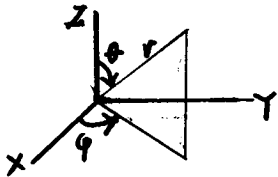
(είν βίβια ερκεμπόσους δίως περιόσους  $\int dv |\psi|^2 = 1$ )

Πίνουμε ως προς r την πραγματική εξίσωση και με τον τρόπο αυτό χρησιμοποιούμε των άξονα των επίπεδα με όποιον ήξελε 90% των πιθανόντων ερκεμπόσους των μήκτρονιων.

ως αναδίσουμε τώρα ότι θέλουμε τις επιφάνειες των ερκεμπόσους αναδίσουμε  $\psi_{2\ell}$ . Υπενθυμίζουμε ότι η  $\psi_{2\ell}$  δίν έχω ερκεμπόσους των προβότων των ερκεμπόσους

$$\psi_{2\ell} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} (\frac{z}{a})^{5/2} e^{-z^2/2a} y^2 \sin^2 \theta / \sin^2 \phi$$

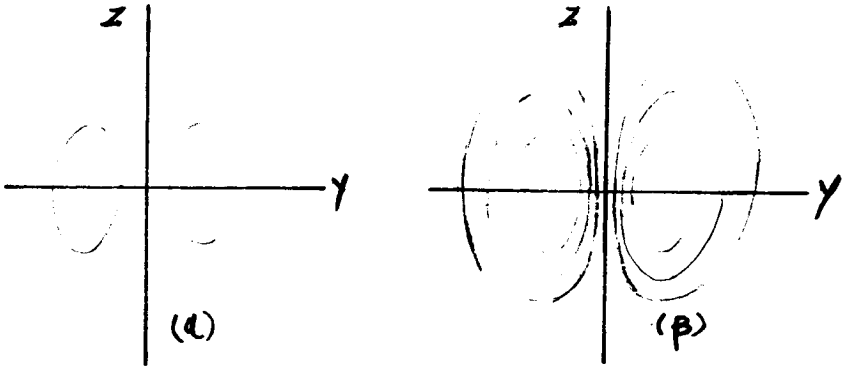
Προβότων με  $\psi_{2\ell}$  είναι και με την ίδια των z άξονα και ερκεμπόσους παρατηρούμε με την ερκεμπόσους (ερκεμπόσους) αναδίσουμε  $e^{-z^2/2a}$ . Υπενθυμίζουμε των "άξονα" με όποιον αυτή αναδίσουμε - με τις αναδίσουμε



Με ενδιαφέρει η "κοπή" με το επίπεδο yz για διδακτικό x. Έτσι το επίπεδο αυτό φ = π/2 και sin φ = 1. Άρα για το επίπεδο yz η  $\psi_{2\ell}$  γίνεται

$$|\psi_{2\ell}| = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} (\frac{z}{a})^{5/2} e^{-z^2/2a} r |\sin \theta| \text{ όπου } f = \frac{z}{2a}$$

Τώρα για δεδομένα αριθμητικά αξία των  $|Q_{21}|$  έχουμε την εικόνα σε προοπτική συσχετισμένη. Η εικόνα που παίρνουμε φαίνεται στο Σχ. 7α



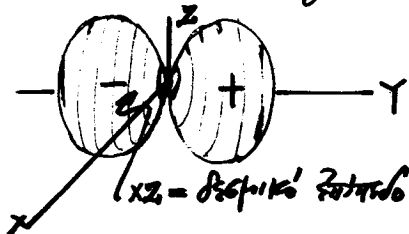
Σχ. 7. Γεωμετρικές εικόνες στο επίπεδο yz και μήκος του γ.

Δίνοντας διαφορετικές αξίες στην  $|Q_{21}|$  παίρνουμε την εικόνα του Σχ. 7β. Η εικόνα είναι όπως σχεδιάσαμε εμένα ως πομπή

$$y e^{kr} = y e^{-k(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}}$$

για δεδομένη αξία του  $x = c$  (σταθερά).

Αν είναι κεντρική κοίτη και κέντρο των "δύο" των γ και παράλληλα στο επίπεδο xz (για δεδομένο x)  $\approx |Q_{21}|$  σημαίνει ότι υπάρχει αξία. Αν η πομπή της αντανάκλασης σε αυτήν διαφορετικές πομπές από την παραγωγή της "αφής" (Σχ. 7α ή 7β) παίρνει "δύο" γ, ή εναλλάσσεται την γινόμενη γέφυρα επηρεάζονται. Δηλαδή είναι το φαινόμενο της πραγματικού  $Q_{21}$  πομπή είναι δύο εναλλάσσονται επηρεάζονται και όχι εναλλάσσονται φαινόμενα. Το "επίπεδο" που επηρεάζονται είναι κάποια ιδία της πραγματικότητας



→ Αντίστοιχα έχουμε τακτοποιημένα για τις συναρτήσεις  $\Phi_{2l_2}$  και  $\Phi_{2l_2}$  γιατί παύει των  $r$  ίδιων  $x$  και  $z$  κεντρικών. Υποδηλώνει όμως ότι το  $\Phi_{2l_2} = \Phi_{210} = |210\rangle$  είναι ιδιοσυνάρτηση του  $\hat{L}_z$  με τιμή  $m$  για τις  $\Phi_{2l_2}$  και  $\Phi_{2l_1}$ .

→ Ας αναζητήσουμε τις μεγαλύτερες κβαντικές αριθμούς. Οι  $l$  και  $m$  είναι  $l=0 \rightarrow m=0$  και είναι ιδιότητες των  $\Phi_{200}$  είναι  $m-l-1 = 2-0-1=1$  διακριτές συνάρτησεις (γιατί ως  $r \rightarrow \infty$ ), η  $\Phi_{300} = \Phi_{300}$  έχει  $3-0-1=2$  διακριτές συνάρτησεις προσεγγίζουσες μόνο από τις κεντρικές συναρτήσεις  $R_{20}(r)$  και  $R_{30}(r)$ :

$$\Phi_{200} = \frac{1}{4(2\pi)^{1/2}} \left(\frac{z}{a}\right)^{3/2} (2 - z\frac{r}{a}) e^{-z\frac{r}{2a}}$$

$$\Phi_{300} = \frac{1}{81(3\pi)^{1/2}} \left(\frac{z}{a}\right)^{3/2} (27 - 18z\frac{r}{a} + 2z^2\frac{r^2}{a^2}) e^{-zr/3a}$$

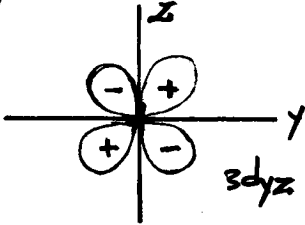
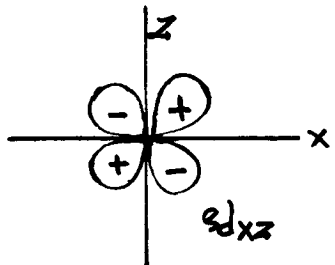
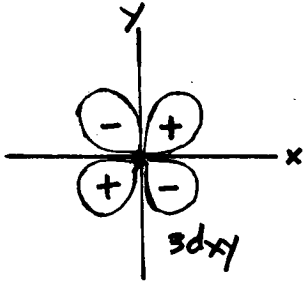
Η  $l=2s$  (το κεντρικό της μέρος αβραοειδές) μειώνεται σε  $r = 2\frac{a}{z}$  και για  $z=1$  (τοπο αβραοειδές) σε  $r=2a$ . Για  $r > 2a$  οι συναρτήσεις  $\Phi_{200}$  και  $\Phi_{300}$  είναι  $\pi \cdot x$  και  $y$  γίνεται  $-$ . Τα κβαντικά αριθμοί της  $3s$  είναι  $l=2$  και  $m=0$  και είναι  $27 - 18z\frac{r}{a} + 2z^2\frac{r^2}{a^2} = 0$  με  $z=1$  και  $r/a$ . Προσδιορίζεται η συνάρτηση των δύο διακριτών συνάρτησεων:  $r/a = (9 \pm 3\sqrt{3})/2$ . Οι συνάρτησεις  $2s$  και  $3s$  (σφαιρικές) είναι οι μεγαλύτερες  $l$  και  $m$  κβαντικές αριθμοί κβαντικών σε  $z=1$ .

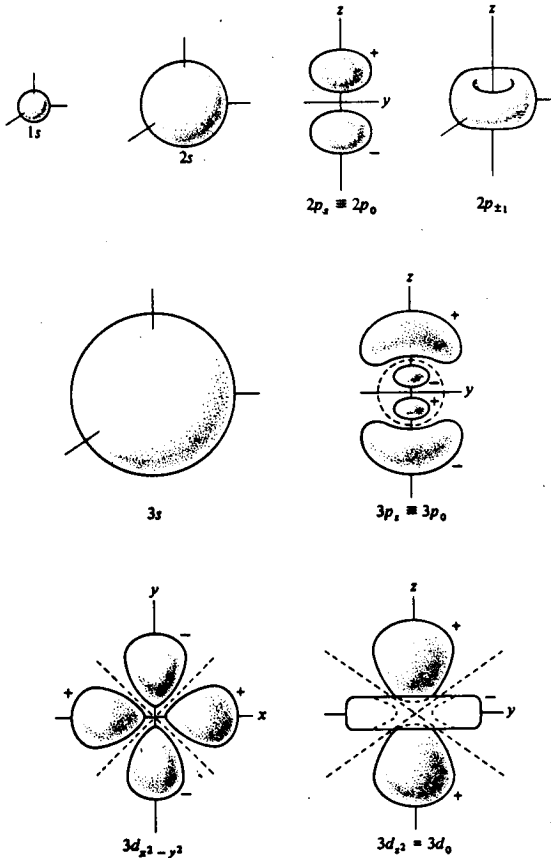
Οι συναρτήσεις κβαντικού  $l$  ( $l=1$ )  $\Phi_{210}$  και  $\Phi_{310}$  είναι  $l=1$  και  $m=0$  και είναι  $27 - 18z\frac{r}{a} + 2z^2\frac{r^2}{a^2} = 0$  με  $z=1$  και  $r/a$ . Προσδιορίζεται η συνάρτηση των δύο διακριτών συνάρτησεων:  $r/a = (9 \pm 3\sqrt{3})/2$ . Οι συνάρτησεις  $2s$  και  $3s$  (σφαιρικές) είναι οι μεγαλύτερες  $l$  και  $m$  κβαντικές αριθμοί κβαντικών σε  $z=1$ . Οι συναρτήσεις κβαντικού  $l$  ( $l=1$ )  $\Phi_{210}$  και  $\Phi_{310}$  είναι  $l=1$  και  $m=0$  και είναι  $27 - 18z\frac{r}{a} + 2z^2\frac{r^2}{a^2} = 0$  με  $z=1$  και  $r/a$ . Προσδιορίζεται η συνάρτηση των δύο διακριτών συνάρτησεων:  $r/a = (9 \pm 3\sqrt{3})/2$ . Οι συνάρτησεις  $2s$  και  $3s$  (σφαιρικές) είναι οι μεγαλύτερες  $l$  και  $m$  κβαντικές αριθμοί κβαντικών σε  $z=1$ .

νιστός ως αναγωγής από χρόνο.

$$Q_{310} = \frac{z^2}{81 r^{3/2}} \left(\frac{z}{a}\right)^{3/2} \left(6 - z \frac{r}{a}\right) e^{-z/3a} \int_0^{\nu \cos \theta} r \cos \theta$$

Προφανώς είναι σφαιρική λύση με συντελεστή  $r = \frac{6a}{z}$ . Το αντί-  
 κείμενο είναι το  $3P_2 = Q_{310}$  με βάση το  $\Sigma_x$ . 8 και  
 γερμίνονται με τον ίδιο τρόπο όπως και  $2P_2$  (ή  $2P_y, 2P_z$ )  
 ως δείτε τώρα τις (παραστάσεις) αναγωγής εδ. Είναι  
 εύκολο να τον γινεται ως  $\sigma = 90^\circ$ :  $Q_{3dxy}, Q_{3dxz}, Q_{3dyz},$   
 $Q_{3dx^2-y^2}$  και  $Q_{3dz^2}$ . Οι πέντε αναγωγές εδω  $\Sigma_{SS}$   
 είναι  $m=3, l=2$  και είναι  $Q_{3dz^2}$  είναι ιδιοσυναρτήσεις  
 του  $L^2$  με ιδιοτιμή  $m=0$ ,  $2P_2$  ή  $m=0$  είναι επίσης τις  
 δεξιές μηδενικές. Συνεπώς δεξιές μηδενικές εδω εδ  
 αναγωγής  $m-1 = 3-1 = 2, m-1 = 3-2-1=0$  άρα οι  
 δεξιές δεξιές μηδενικές και το σφαιρικό  $3P_2$ . Οι δύο δεξιές  
 μηδενικές υπάρχουν και οι δεξιές δεξιές και ιδιοτι-  
 μέρα και τις αναγωγές Legendre ή αυτές είναι πολύ εύλ.  
 "Σίκοι" των αναγωγών  $3dxy, 3dxz$  και  $3dyz$  υπάρχουν  
 και το  $\Sigma_x$  8 είναι οι  $3dxy$  και  $3dz^2 = 3d_{z^2}$ .





Σχ. 8. "Είκοσι" διαφορετικά ατομικά τροχιακά. Το χαμηλότερο  $2s$  έχει μία διαφορετική απόφύση και είναι ίδιου μεγέθους με το  $2p$  έχει δύο εστιακές επιφάνειες. Το  $3p_z$  έχει μία εστιακή επιφάνεια απόφύση (αυξοκοπήσεις γραμμής) και το διαφορετικό επίπεδο  $xy$ .