UiO : **Fysisk institutt**

Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet

Forelesning 19

Are Raklev

Før påske

- SL lar seg generalisere til tre dimensjoner:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r},t)+V(\vec{r})\Psi(\vec{r},t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

- TUSL er da

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r})+V(\vec{r})\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})$$

- For et **sentralsymmetrisk potensiale**, V(r), er det naturlig å bruke **sfæriske koordinater** (r,θ,φ) i stedet for **kartesiske**.

Før påske

- Vi løser da TUSL ved å se etter **separable løsninger** på formen ψ(**r**) = R(r)Y(θ,φ).
- Vi får da to ligninger (l er en vilkårlig konstant):
  - **Angulærligningen**

$$\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} = -l(l+1)\sin^2\theta\, Y$$

  - **Radialligningen**

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

Før påske

- Angulærligningen kan løses ved nok en gang å anta separasjon: $Y(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$.
- Vi får da ligningene

$$\sin\theta \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}\right) + l(l+1)\sin^2\theta = m^2\Theta$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m^2\Phi$$

hvor m er en konstant (i prinsippet kompleks).

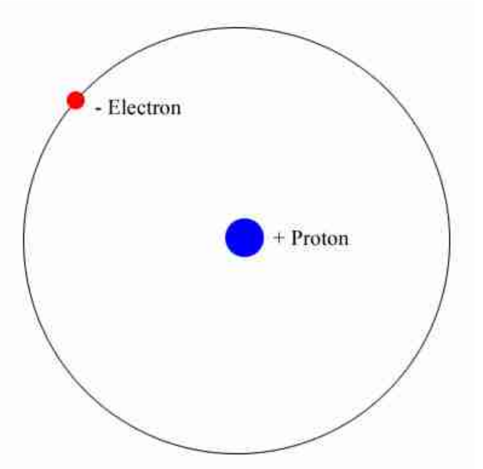
- NB! Angulærligningen må bare løses **en** gang!

I dag

- Vi gjør ferdig løsningen av angulærligningen og de **sfæriske harmoniske** dukker opp!
- Vi vil bruke dette matematiske maskineriet på **hydrogenatomet**.
    - Må løse radialligningen for Coulombpotensialet.

$$V(r) = -\frac{k}{r}, \qquad k = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1.44\ \text{eV nm}$$

    - Ser etter bundne tilstander, E < 0.



Oppsummering

- De **sfæriske harmoniske** kan skrives ved hjelp av Legendrepolynomer:

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = \epsilon\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\,e^{im\varphi}P_l^m(\cos\theta)$$

hvor

$$\epsilon = (-1)^m \text{ for } m > 0 \text{ og } \epsilon = 1 \text{ for } m < 0$$

- Sfæriske harmoniske normeres separat

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |Y_l^m(\theta,\varphi)|^2 \sin\theta \, d\theta \, d\varphi = 1$$

Oppsummering

- Vi finner bølgefunksjonen for hydrogenatomet fra løsningene $R_{nl}(r)$ av radialligningen til Coulombpotensialet.
- Løses ved en rekursjonformel som uttrykker radialdelen ved Laguerre polynomer L_q

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

- Gir samme energikvantisering som Bohrs formel.