SL i 3-dimensjoner

SL $\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$ $\hat{H}$ - hamiltonoperatoren

I 3-dimensjoner er totalenergien gitt som

$$H = K + V = \frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{p^2}{2m} + V = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V \quad \Big| \; p^2 = |\vec{p}|^2$$

Vi følger samme oppskrift som i 1-dimensjon

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

Eller $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) = -i\hbar \vec{\nabla}$ ← symbolet hvis navn ikke får nevnes
del

$\hat{H}$ i 3-dimensjoner

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}$$

Laplace operator

I 3-dimensjoner er $V(x,y,z)$ og $\Psi(x,y,z,t)$, eller $V(\vec{r})$ og $\Psi(\vec{r},t)$.
Sannsynlighet for å finne partikkelen i et volumelement
$d^3\vec{r} \equiv dx\,dy\,dz$ er $|\Psi(\vec{r},t)|^2 d^3\vec{r} = |\Psi(x,y,z,t)|^2 dx\,dy\,dz$.
Normeringen er $\int |\Psi(\vec{r},t)|^2 d^3\vec{r} = 1$ hvor integralet tas over hele rommet.

Vi har, de „vanlige" stasjonære tilstandene

$$\Psi_n(\vec{r},t) = \psi_n(\vec{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

som separable løsningen av SL.

Her er $\psi_n(\vec{r})$ en løsningen av TUSL i 3-dimensjoner

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_n + V\psi_n = E_n\psi_n$$

Den totale løsningen av SL er da

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\psi_n(\vec{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

Kartesiske koordinater

Hvordan løse TUSL i 3-dim?

Dersom $\underline{V(x,y,z) = V_x(x)+V_y(y)+V_z(z)}$ så kan TUSL løses ved separasjon av variable.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_n + \left(V_x(x)+V_y(y)+V_z(z)\right)\psi_n = E_n\psi_n \qquad \text{TUSL}$$

Anta $\psi_n(\vec{r}) = \psi_x(x)\,\psi_y(y)\,\psi_z(z)$ og setter inn

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_y\psi_z\frac{\partial^2\psi_x}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\psi_z\psi_x\frac{\partial^2\psi_y}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\psi_x\psi_y\frac{\partial^2\psi_z}{\partial z^2} + (V_x+V_y+V_z)\psi_x\psi_y\psi_z = E_n\psi_x\psi_y\psi_z$$

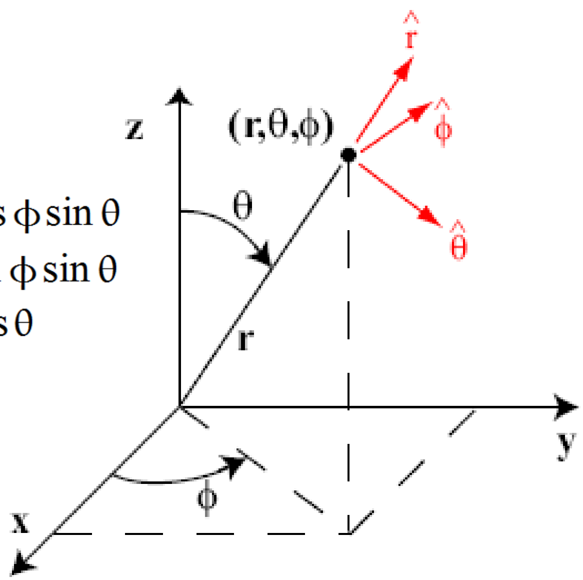
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi_x}\frac{\partial^2\psi_x}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi_y}\frac{\partial^2\psi_y}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi_z}\frac{\partial^2\psi_z}{\partial z^2} + \underline{V_x}+V_y+V_z = E_n$$

Sfæriske koordinater (Rottmann: polare koordinater)

Brukes for sentralsymmetriske potensial, $V(r)$.

Sfæriske koordinater (r, θ, ϕ).

$$x = r\cos\phi\sin\theta$$
$$y = r\sin\phi\sin\theta$$
$$z = r\cos\theta$$



Advarsel:

1) Flere definisjoner finnes!
En nyttig en er $(r, \cos\theta, \phi)$.

2) Merk at en vinkel går til π.

Om vi skal integrere får vi bruk for en Jakobideterminant

$$d^3\vec{r} = dx\,dy\,dz = \left|\frac{\partial(x,y,z)}{\partial(r,\theta,\phi)}\right| dr\,d\theta\,d\phi = r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\phi$$

alternativt $dx\,dy\,dz = r^2\,dr\,d\cos\theta\,d\phi$

Laplace operator: sfæriske koordinater

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

alternativt $(r, \cos\theta, \phi)$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2(1-\cos^2\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\cos\theta^2} + \frac{1}{r^2(1-\cos^2\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

Løsning av TUSL:

Anta at $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)\,Y(\theta,\phi)$ og finn løsninger.

TUSL $$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{Y}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{R}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{R}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right] + VRY = ERY \quad \Big|\times -\frac{2mr^2}{\hbar^2}\frac{1}{RY}$$

$$\underbrace{\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}(V-E)}_{\text{avhengig av kun } r} + \underbrace{\frac{1}{Y}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right)}_{\text{avhengig kun } \theta,\phi} = 0$$

(Yoda) $= \ell(\ell+1)$ $\qquad$ $-\ell(\ell+1)$

radialligningen $\qquad$ angularligningen

Løsning av angularligningen

Kan omskrives ($\times\, Y\sin^2\theta$) som

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

Prøver separasjon av variable tilbake igjen: $Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\,\Phi(\phi)$

som gir
$$\Phi\sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \Theta\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -\ell(\ell+1)\Theta\Phi\sin^2\theta \quad \Big|\times\frac{1}{\Phi\Theta}$$

$$\underbrace{\frac{1}{\Theta}\left[\sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \ell(\ell+1)\sin^2\theta\times\Theta\right]}_{=m^2} + \underbrace{\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}}_{=-m^2} = 0 \quad \Big|\ m^2 \text{ er ikke masse!}$$