$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m^2\Phi \qquad \left(\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \right)$$

$$\Phi(\phi) = e^{im\phi}$$

m muligens negativ (tar seg av løsning nummer to)

Krever av løsningen (grensebetingelse):

$$\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi) \Rightarrow \underbrace{e^{im\phi} = e^{im(\phi+2\pi)}}_{\cancel{e^{im\phi}} = \cancel{e^{im\phi}} \cdot e^{im2\pi}} \Rightarrow 1 = e^{im \cdot 2\pi}$$

$\Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ (magnetisk kvantetall)

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

Løsningen er $\Theta(\theta) = P_l^m(\cos\theta)$

hvor $P_l^m(x) \equiv (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \left(\frac{d}{dx}\right)^{|m|} P_l(x)$ (<u>assosierte Legendre funksjoner</u>)

$P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx}\right)^l (x^2-1)^l$ (Legendre polynom)

l må være et positivt heltall ($l \geq 0$). P_l^m av „grad" l.

ℓ må være et positivt heltall ($\ell > 0$)

Hvis $|m| > \ell$ så er $P_\ell^m = 0$, slik at

gitt $\ell = 0, 1, 2, 3$ er $m = -\ell, -\ell+1, \dots, 0, \dots, \ell-1, \ell$

(asimutalt kvantetall)

Hele løsningen av angulærligningen

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) = A\, P_\ell^m(\cos\theta)\, e^{im\phi} \quad \text{(sfæriske harmoniske)}$$

Annen løsning Oppgave 4.4 : Griffiths ($\Theta(\theta) = \ln(\tan \theta/2)$)

Konstanten A kan bestemmes fra normering

$$\int |\psi|^2 d^3\vec{r} = 1 \;\Rightarrow\; \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} |R|^2 |Y|^2 r^2 \sin\theta \, dr\, d\theta\, d\phi = 1$$

$$\Rightarrow \int_0^\infty |R|^2 r^2 dr \times \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |Y|^2 \sin\theta \, d\theta\, d\phi = 1$$

Krever separat normering:

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = 1 \quad \text{og} \quad \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |Y|^2 \sin\theta\, d\theta\, d\phi = 1$$

Dette gir

$$\boxed{Y_\ell^m(\theta,\phi) = \varepsilon \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}}\; e^{im\phi} P_\ell^m(\cos\theta)}$$

hvor $\varepsilon = (-1)^m$ for $m \geq 0$ og $\varepsilon = 1$ $m < 0$.

De sfæriske harmoniske (SH) er et ortonormalt sett

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y_\ell^{m}\, Y_{\ell'}^{m'} \sin\theta \, d\theta \, d\varphi = \delta_{\ell\ell'}\,\delta_{mm'}$$

SH er et komplett sett med funksjoner.

$$f(\theta,\varphi) = \sum_{\ell,m} a_{\ell m}\, Y_\ell^{m}(\theta,\varphi)$$

Radialligningen

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

Kan forenkles med variabelbytte $u(r) \equiv r R(r)$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) = \frac{d}{dr}\left(\cancel{r^2}\, \frac{\frac{du}{dr}r - u}{\cancel{r^2}}\right) = \frac{d^2u}{dr^2}r + \cancel{\frac{du}{dr}} - \cancel{\frac{du}{dr}} = \frac{d^2u}{dr^2}r$$

Radialligningen blir da

$$r\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{2mr}{\hbar^2}(V-E)u = \ell(\ell+1)\frac{u}{r} \qquad \Big|\times -\frac{\hbar^2}{2mr}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} + Vu + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}u = Eu$$

frastøtende sentrifugalledd

TUSL med et effektivt potensial V_{eff}

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} + V_{eff}\,u = Eu \quad , \quad V_{eff} = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$$

Hydrogenatomet

Coulombs lov : $V(r) = -\frac{k}{r}$, $k = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} = 1.44$ nm eV

Det gir radiallignignen (RL)

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2u}{dr^2} + \left[-\frac{k}{r} + \frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u = Eu$$

(ignorerer protonets masse, kan bruke $m_e \to \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$)

Vil gjerne jobbe med dimensjonsløse størrelser. Har tidligere sett at

$\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$ har enhet $[\kappa] = m^{-1}$

slik at $\rho \equiv \kappa r$ er dimensjonsløs.

Setter κ inn i RL

$$\frac{1}{\kappa^2}\frac{d^2u}{dr^2} + \left[\frac{2m_e}{\hbar^2\kappa^2}\frac{k}{r} - \frac{1}{\kappa^2}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u = u$$

Bruker at $\frac{d^2u}{dr^2} = \kappa^2\frac{d^2u}{d\rho^2}$

Da er RL

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left[\frac{2m_e k}{\hbar^2\kappa}\frac{1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]u = u$$

Bohrradiusen 0,0529 nm

bruker $a_0 = \frac{\hbar^2}{mk}$ og $\rho_0 = \frac{2}{a_0\kappa}$

$$\frac{2m_e k}{\hbar^2\kappa} = \frac{2}{a_0\kappa} = \rho_0$$

slik at RL blir

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]u$$

RL løses med samme rekursjonsteknikk som HO.

Når $\rho \to \infty$ er RL $\frac{d^2u}{d\rho^2} \simeq u$

som har løsninger $u(\rho) \simeq A e^{-\rho} + B e^{\rho}$

må sette $B = 0$ for å unngå at $u(\rho) \to \infty$ når $\rho \to \infty$

Når $\rho \to 0$ er RL $\frac{d^2u}{d\rho^2} \simeq \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} u$

som har løsninger $u(\rho) \simeq C \rho^{\ell+1} + D \rho^{-\ell}$

må sette $D = 0$ for å unngå at $u(\rho) \to \infty$ når $\rho \to 0$

Alt dette er forpostfektninger for å introdusere

$$u(\rho) \equiv \rho^{\ell+1} e^{-\rho} v(\rho)$$