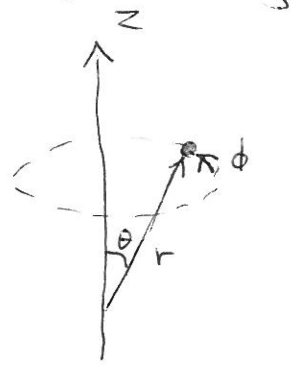
6.3 Schrödingerlikninga i sfæriske koordinater

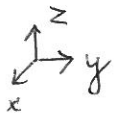
Vi skal ende opp med å betrakte sentralpotensial:
Eksempelvis

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$$

Men formuleringa vil i utgangspunktet være mer generell.



θ asimutvinkel
ϕ polarvinkel



$$x = r\sin\theta\cos\phi \qquad (6.26)$$

$$y = r\sin\theta\sin\phi \qquad (6.27)$$

$$z = r\cos\theta \qquad (6.28)$$

Eksempel 6.2

Hvordan finne $\frac{\partial}{\partial\phi}$ i kartesiske koordinater?

$$\frac{\partial}{\partial\phi} = \frac{\partial x}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial z}$$

Innsatt:

$$\frac{\partial}{\partial\phi} = -r\sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial x} + r\sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial y} + 0$$

$$= -y\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial y}$$

Med høyresida på operatorform:

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} = -YP_x + XP_y$$

Dermed funnet

$$\boxed{L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}} \qquad (6.29)$$

Tilsvarende, med litt mer regning:

$$\boxed{L^2 = -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}} \qquad (6.30)$$

Disse kan brukes til å finne egenverdier ved egenfunksjoner uttrykt i sfæriske koordinater.

For L_z:
Forrige avsnitt $\Rightarrow$ egenverdier på form $m\hbar$, der m er hel- eller halvtallig.

Men, vi skal finne at for banedreieimpuls kan m utelukkende være heltallig!

Anta egenfunksjon $\psi(r,\theta,\phi)$; innfør separasjon av variable; sett inn; divider; finn generell løsning:

$$L_z \psi = m_\ell \hbar \psi$$ (indeks ℓ angir banedreieimpuls)

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)F(\theta)G(\phi)$$

$$-i\hbar RF\frac{dG}{d\phi} = m_\ell \hbar RFG$$

$$\frac{dG}{d\phi} = i m_\ell \phi$$

$$G(\phi) = e^{i m_\ell \phi}$$

og altså, utseendet til en hvilkensomhelst bølgefunksjon som er egenfunksjon til L_z:

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)F(\theta)e^{i m_\ell \phi} \qquad (6.31)$$

Men ekstra betingelse på ψ:

$$\psi(r,\theta,\phi+2\pi) = \psi(r,\theta,\phi)$$

$$e^{i m_\ell(\phi+2\pi)} = e^{i m_\ell \phi}$$

$$e^{i 2\pi m_\ell} = 1$$

m_ℓ må være et positivt eller negativt heltall! Siden m_ℓ må gå fra $(-\ell)$ til $(+\ell)$ i heltallige skritt, kan ℓ ~~også~~ bare være heltallig!

$$\boxed{\begin{array}{c} \ell = 0, 1, 2, \ldots \\ m_\ell \in \{-\ell, -\ell+1, \ldots, 0, \ldots, \ell-1, \ell\} \end{array}}$$

(Vi skal se seinere at for indre dreieimpuls, spinn, kan ℓ også være halvtallig!)

Innsatt i Hamiltonoperatoren:

Etter en smule regning finner man

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\boxed{\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \boxed{\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}}\right\} + V(r,\theta,\phi)$$

Men uttrykkene "i boks" kjenner vi igjen fra uttrykket for L^2-operatoren (likning (6.30)). Det gir:

$$\boxed{H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r,\theta,\phi)} \qquad (6.32)$$

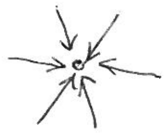
Det midterste leddet kjenner vi igjen fra klassisk sentralkraftproblem, der $\ell^2/2mr^2$ representerer "sentrifugalkraft".

Vi krever nå

$$[H, L^2] = 0$$
$$[H, L_z] = 0$$

for å kunne finne egenfunksjonsløsninger. Det koker ned til at L^2 og L_z må kommutere med $V(r,\theta,\phi)$. Potensialet må altså representere et <u>sentralkraftfelt</u>:

$$V = V(r)$$



Schrödingerlikning, med egenverdi innsatt for L^2:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2}\psi + V(r)\psi = E\psi} \qquad (6.33)$$

(Har tidl. brukt
$\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) = \frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial\psi}{\partial r}$;
bare prøv at det stemmer!)

Faktoriser (separer), sett inn, divider bort; få så:

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)\,Y(\theta,\phi)$$

RADIELL SCHRÖDINGER-LIKNING

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\big(rR(r)\big) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2}R(r) + V(r)R(r) = E\,R(r)} \qquad (6.34)$$

$R(r)$ og E vil generelt være ℓ-avhengige.

Men derimot m_ℓ-uavhengige:
L_z-egenverdien kan forandres ved å rotere koordinatsystemet omkring z-aksen, og systemenergien bør ikke avhenge av koordinatsystemet!

Funksjonene $Y(\theta,\phi)$ kan bestemmes ved innsetting i egenverdilikningene

$$L^2\psi = \hbar^2\ell(\ell+1)\psi$$
$$L_z\psi = \hbar m_\ell \psi$$

Gjør så, og divider bort $R(r)$ og $\hbar^2$ etterpå:

./.

$$-\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}Y(\theta,\phi) = l(l+1)\,Y(\theta,\phi) \qquad (6.35)$$

$$-i\frac{\partial}{\partial\phi}Y(\theta,\phi) = m_l\,Y(\theta,\phi) \qquad (6.36)$$

"BLANDET" OPERATOR*

Noter deg:
$Y(\theta,\phi)$ er bestemt bare av egenverdiene l og m_l, og er helt uavhengige av $V(r)$!

— * —

Notasjon, i det følgende:

$$Y(\theta,\phi) \rightarrow Y_l^m(\theta,\phi) \qquad (m_l \rightarrow m;\ \text{banedreieimpuls underforstått})$$

Anta fortsatt separabilitet; sett inn i (6.35) & (6.36);
ϕ-funksjonen allerede funnet:

$$Y_l^m(\theta,\phi) = F(\theta)G(\phi)$$

$$G(\phi) = e^{i m_l \phi}$$

Å finne $F(\theta)$:

Vi skal bruke stigeoperatorene fra forrige avsnitt:
Oversatt til sfæriske koordinater, er de

$$\boxed{\begin{aligned} L_+ &= \hbar e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \qquad (6.37)\\ L_- &= \hbar e^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \qquad (6.38)\end{aligned}}$$

Strategi:
Siden $m_l \leq l$, har vi

$$L_+ Y_l^l(\theta,\phi) = 0$$

Hvis $Y_l^l(\theta,\phi)$ er kjent, så anvend L_- tilstrekkelig mange ganger, og finn slik alle Y_l^m!

Supersmart!

*) Slik vil også θ-delen av Y_l^m avhenge av m!

Finn Y_ℓ^ℓ:

$$\hbar e^{i\phi}\left(\frac{\partial Y_\ell^\ell}{\partial\theta} + i\cot\theta \frac{\partial Y_\ell^\ell}{\partial\phi}\right) = 0$$

$\frac{\partial Y_\ell^\ell}{\partial\phi} \to i\ell\, Y_\ell^\ell$

Med $Y_\ell^\ell = F_\ell^\ell G$:

$$\frac{dF_\ell^\ell}{d\theta} = \ell\cot\theta\, F_\ell^\ell = \ell\frac{\cos\theta}{\sin\theta}F_\ell^\ell$$

Lett nok å se at her passer lærebokas løsning:

$$Y_\ell^\ell(\theta,\phi) = (\sin\theta)^\ell e^{i\ell\phi}$$

De laveste løsningene i tabell 6.1 side 132 i læreboka er (sjekk boka for flere):

ℓ	m_ℓ	$Y_\ell^m(\theta,\phi)$
0	0	$Y_0^0 = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$
1	-1	$Y_1^1 = \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2}\sin\theta\, e^{-i\phi}$
1	0	$Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2}\cos\theta$
1	$+1$	$Y_1^{-1} = -\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2}\sin\theta\, e^{i\phi}$

Fasefaktorkonvensjon: $\quad Y_\ell^{-m}(\theta,0) = (-1)^m Y_\ell^m(\theta,0)$

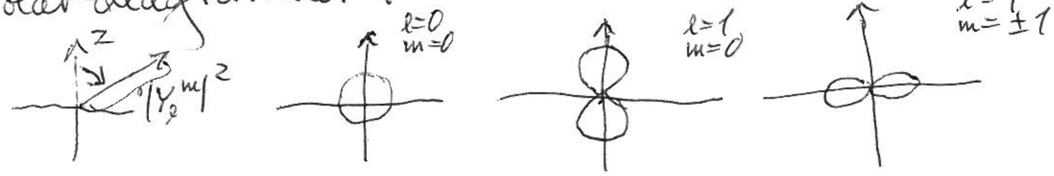
Normaliseringskrav:

$$\int_{\theta=0}^{\pi} d\theta \int_{\phi=0}^{2\pi} |Y_\ell^m(\theta,\phi)|^2 \sin\theta\, d\theta\, d\phi = 1$$

Y_ℓ^m kalles <u>sfæriske harmoniske</u>. (Stor forekomst i fysikk)

$Y_\ell^0 = P_\ell(\cos\theta)$ kalles <u>Legendre-polynomer</u>.
Legendre-polynomer dukker opp i løsninger av Laplace-likninga for elektrisk potensial i vakuum.

Polardiagrammer:



<u>Oppsummering:</u>

For alle $V(r)$ vil en egentilstand for L^2 og L_z, med kvantetall ℓ og m_ℓ, ha angulærdel gitt ved $Y_\ell^m(\theta,\phi)$.
Helt uavhengig av både $V(r)$ og E!
Radialdelen, derimot, vil bestemmes av $V(r)$ og E (samt av ℓ).