ΜΑΘΗΜΑ 6ο

Η εξίσωση Schrödinger σε κεντρικό δυναμικό V(r)

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

$$\Rightarrow \boxed{\nabla^2\psi + k^2\psi = 0 \ , \ k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r))}$$

Στις σφαιρικές συντεταγμένες $x, y, z \to r, \theta, \varphi$

Λαπλασιανή: $\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\theta,\varphi}^2$

ακτινικό: $\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$

γωνιακό: $\nabla_{\theta,\varphi}^2 = \nabla_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2\theta}\nabla_\varphi^2 = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$

ενώ ισχύει

$$\boxed{\nabla_{\theta,\varphi}^2 = -\frac{\vec{\ell}^2}{\hbar^2}}.$$

A) Με την μέθοδο χωρισμού των μεταβλητών

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

ώστε με αντικατάσταση στην εξίσωση Schrödinger

$$\left(\nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\theta,\varphi}^2\right)RY + k^2RY = 0$$

$$\Rightarrow \frac{r^2}{R\cancel{Y}}\nabla_r^2 R\cancel{Y} + \frac{1}{r^2}\frac{r^2}{\cancel{R}Y}\nabla_{\theta,\varphi}^2 Y\cdot\cancel{R} + k^2\frac{r^2}{\cancel{RY}}\cancel{RY} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{r^2}{R}\nabla_r^2 R + \frac{1}{Y}\nabla_{\theta,\varphi}^2 Y + k^2 r^2 = 0$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{r^2}{R}\nabla_r^2 R + k^2 r^2}_{\text{εξαρτάται από } r} = \underbrace{-\frac{1}{Y}\nabla_{\theta,\varphi}^2 Y}_{\text{εξαρτάται απο } \theta,\varphi} = \lambda, \text{ σταθερά διαχωρισμού}$$

Εξισώσεις:

ακτινική: $\nabla_r^2 R(r) + \left(k^2(r) - \frac{\lambda}{r^2}\right) R(r) = 0$ (1)

γωνιακή: $\nabla_{\theta,\varphi}^2 Y(\theta,\varphi) + \lambda Y(\theta,\varphi) = 0$ (2)

(B) Η γωνιακή εξίσωση με την μέθοδο χωρισμού μεταβλητών

$$\boxed{Y(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)\,\Phi(\varphi)}$$

$$\left(\nabla_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2\theta}\nabla_\varphi^2\right)\Theta(\theta)\,\Phi(\varphi) + \lambda\,\Theta(\theta)\,\Phi(\varphi) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\nabla_\theta^2 \Theta(\theta)\,\Phi(\varphi)}{\Theta(\theta)\,\Phi(\varphi)} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\Theta(\theta)\,\nabla_\varphi^2\Phi(\varphi)}{\Theta(\theta)\,\Phi(\varphi)} + \lambda\frac{\Theta(\theta)\,\Phi(\varphi)}{\Theta(\theta)\,\Phi(\varphi)} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\nabla_\theta^2\Theta(\theta)}{\Theta(\theta)} + \frac{\nabla_\varphi^2\Phi(\varphi)}{\sin^2\theta\,\Phi(\varphi)} + \lambda = 0$$

$$\Rightarrow \sin^2\theta\,\frac{\nabla_\theta^2\Theta(\theta)}{\Theta(\theta)} + \lambda\sin^2\theta = -\frac{\nabla_\varphi^2\Phi(\varphi)}{\Phi(\varphi)} = +m^2, \text{ σταθερά διαχωρισμού}$$

Εξισώσεις:

(2) →

$$\boxed{\nabla_\theta^2\Theta(\theta) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta(\theta) = 0} \quad (2a)$$

$$\boxed{\nabla_\varphi^2\Phi(\varphi) + m^2\Phi(\varphi) = 0} \quad (2b)$$

<u>Πορεία λύσης:</u>

$$\nabla^2\psi(r,\theta,\varphi)+k^2\psi(r,\theta,\varphi)=0 \quad , \quad k^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(r))$$

$$\boxed{\nabla_r^2 R(r)+\left(k^2-\frac{\lambda}{r^2}\right)R(r)=0}$$

(1)

$$\nabla_{\theta,\varphi}^2 Y(\theta,\varphi)+\lambda Y(\theta,\varphi)=0$$

$$\boxed{\nabla_\theta^2\Theta(\theta)+\left(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta(\theta)=0}$$

(2a)

$$\boxed{\nabla_\varphi^2\Phi(\varphi)+m^2\Phi(\varphi)=0}$$

(2b)

Η εξίσωση (2b) για την $\Phi(\varphi)$

$$\boxed{\nabla_\varphi^2\Phi(\varphi)+m^2\Phi(\varphi)=0} \quad , \quad 0\leqslant\varphi\leqslant 2\pi$$

$$\Phi(\varphi)=A\,e^{im\varphi}+B\,e^{-im\varphi} \quad , \quad \Phi(\varphi+2\pi)=\Phi(\varphi)$$

$$\Rightarrow e^{\pm im2\pi}=1$$

$$\Rightarrow \cos 2\pi m \pm i\sin 2\pi m=1$$

$$\Rightarrow m=0,\pm1,\pm2,\pm3,\ldots$$

$$\Phi_m(\varphi)=A\,e^{im\varphi} \quad , \quad m=0,\pm1,\pm2,\pm3,\ldots \text{ (+κές \& -κές τιμές)}$$

$$\int_0^{2\pi}d\varphi\,\Phi_m^*(\varphi)\,\Phi_{m'}(\varphi)=A^2\int_0^{2\pi}d\varphi\,(e^{im\varphi})^*e^{im'\varphi}=A^2\int_0^{2\pi}d\varphi\,e^{-i(m-m')\varphi}=2\pi\,\delta_{m,m'}$$

$$\Rightarrow \boxed{\Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \quad , \quad m=0,\pm1,\pm2,\pm3,\ldots}$$

$\ell_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ z-συνιστώσα της στροφορμής $\vec{\ell}$

$$\Rightarrow \ell_z \Phi_m(\varphi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi_m(\varphi)$$

$$= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

$$= m\hbar \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

$$= m\hbar \, \Phi_m(\varphi)$$

$$\Rightarrow \boxed{\ell_z \Phi_m(\varphi) = m\hbar \, \Phi_m(\varphi)} \quad , m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

ιδιοτιμές ιδιοσυναρτήσεις του ℓ_z

Η ℓ_z συνιστώσα λαμβάνει τις κβαντισμένες τιμές μόνο $0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \ldots$

Σ1: Η σταθερά διαχωρισμού m^2 καθορίσθηκε από τις τιμές $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$