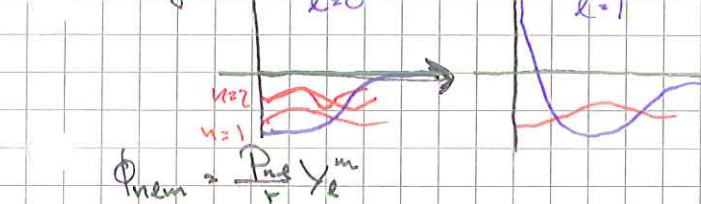


10) Väteatomen
 Rep. med sfärisk symmetri $V = V(r) = \{L^2, L_z, H\}$
 kommuterar. $\Rightarrow$ finns gemensamma egenfunktioner

$\nabla^2 \phi = -k^2 \phi$
 $L^2 \phi = \hbar^2 l(l+1) \phi$
 $L_z \phi = \hbar m \phi$
 då blir S.E.: $H\phi = E\phi$
 $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r Y_l^m) + \frac{1}{2m r^2} L^2 (r Y_l^m) - V(r) r Y_l^m = E r Y_l^m$

multiplitera med R/r $\Rightarrow$ radieell del:
 $-\frac{\hbar^2}{2m} P'' + V_{eff} P = E P$
 $V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} + V(r)$
 centrifugal-potentialen

För varje värde på l finns flera lösningar



$\phi_{nlm} = \frac{R_{nl}}{r} Y_l^m$
 $l = 0, 1, 2, \dots$
 s p d f g h i j

För väteatomen är:
 $V(r) = -e^2 \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r}$
 $|e_0| = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \approx 1,44 \text{ eV} \cdot \text{nm}$
 inför: $\begin{cases} a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} \approx 0,05292 \text{ nm (Bohrradien)} \\ k = \sqrt{-2mE}/\hbar \end{cases}$



① För stora avstånd $r \rightarrow \infty$
 allmänt: $-\frac{\hbar^2}{2m} P'' + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} - \frac{e^2}{r} \right) P = E P$
 Approximativt: $P'' - k^2 P = 0$
 $\Rightarrow P = A e^{-kr} + B e^{kr} = 0$ { $r \rightarrow \infty$ }
 $\Rightarrow P = A \cdot e^{-kr}$

② För små avstånd $r \rightarrow 0$
 $\Rightarrow P'' - \frac{l(l+1)}{r^2} P = 0$
 ansats: $P = C \cdot r^a \Rightarrow P'' = C a(a-1) r^{a-2}$
 Insatt ger:
 $C a(a-1) r^{a-2} - \frac{l(l+1)}{r^2} C r^a = 0$
 $\Rightarrow a(a-1) = l(l+1)$ Andragradslikning för a .
 $\Rightarrow a = \begin{cases} l+1 \\ -l \end{cases} \Rightarrow P = C r^{l+1} + D r^{-l} = 0$ { för $r \rightarrow 0$ }
 $\Rightarrow P = C \cdot r^{l+1}$

r litet	Ansats för alla	r stort
$P \propto r^{l+1}$	$P = \left(\sum_{k=0}^{l+1} C_k r^k \right) e^{-\rho}$ $f(\rho), \rho = kr$	$P \propto e^{-kr}$

Ansats $\rightarrow$ S.E. $\rightarrow$ ekvation för $f(\rho)$
 $\left[f'' - l(l+1) \frac{f}{\rho^2} \right] + \left[-2f' + \frac{2}{a_0 k} \frac{f}{\rho} \right] = 0$

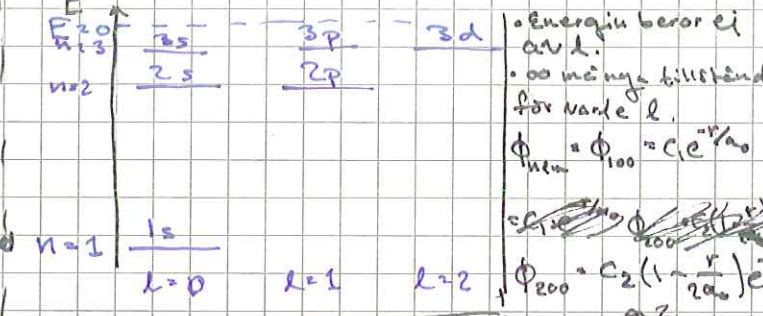
② $= \sum_{k=0} C_k \left\{ -2(k+l+1) + \frac{2}{a_0 k} \right\} \rho^{k+l-1}$
 ① $= \sum_{n=0} C_n \left\{ (n+l+1)(n+l) - l(l+1) \right\} \rho^{n+l-1}$
 $\left[\sum_{k=0}^{n+l+1} C_{k+1} \left\{ (k+l+2)(k+l+1) - l(l+1) \right\} \rho^{k+l} \right] + C_n \left\{ -2(k+l+1) + \frac{2}{a_0 k} \right\} \rho^{k+l} = 0$

Varje term i serien = 0
 $\Rightarrow C_{k+1} = C_k \frac{2(k+l+1) - \frac{2}{a_0 k}}{(k+l+2)(k+l+1) - l(l+1)}$

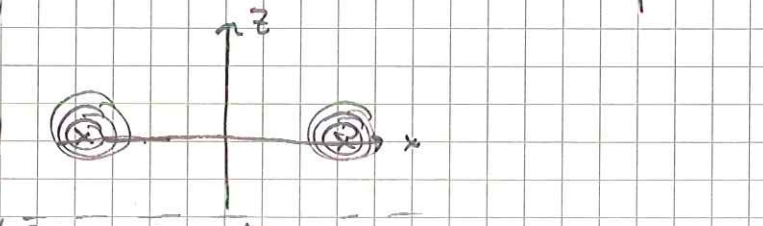
Normerbara egenfunktioner finns endast då
 $\frac{1}{a_0 k} = n$ $n = \text{heltal}$

$1 - 2n = 2l + 1 + N, N = 0, 1, 2, \dots$
 antalet radiella noder
 då stannar serien på $K_{max} = N$.

$K = \frac{1}{a_0 n} = \sqrt{-2mE}/\hbar \Rightarrow E_n = -\frac{\hbar^2}{2m a_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}$
 $n = \text{huvudkvanttal}$
 Väteatomen. $\approx 13,6 \cdot \frac{1}{n^2} \text{ eV}$



$\phi = C_3 r e^{-r/a_0} \sin(\theta) e^{i\phi}$
 $|\phi_{211}| = |C_3|^2 r^2 e^{-r^2/a_0} \sin^2(\theta)$



- Saker vi har försummat
- 1) Protonens rörelse
 - 2) Spin
 - 3) e^- - finstruktur
 - 4) p^+ - hyperfinstruktur
 - 5) Relativistiska effekter
- SEK $\rightarrow$ Diracekvationen (i rel. räkning).

Vätelika joner
 Ett dubbelioniserat Li:
 $V = -Z e^2 \frac{1}{r} = -\frac{9}{r} \Rightarrow E_n = -Z^2 \cdot 13,6 \cdot \frac{1}{n^2} \text{ eV}$
 (Stjärnor innehåller joniserade atomer.)
 $\Rightarrow$ ljuset från dessa kan avslöja vilken ämnen stjämman består av.

Extramaterial

Spinn: vissa partiklar har ett ~~inre~~ rörelsemängdsmoment (spinn) även i vila. För e^- , p^+ , n^0 är spinnet halvtaligt.

$$\begin{aligned} L^2 Y_l^m &= \hbar^2 l(l+1) \\ L_z Y_l^m &= \hbar m \end{aligned} \quad \left| \begin{aligned} S^2 \alpha &= \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \alpha \\ S^2 \beta &= \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \beta \\ S_z \alpha &= \frac{\hbar}{2} \alpha \\ S_z \beta &= -\frac{\hbar}{2} \beta \end{aligned} \right| \quad \left| \begin{aligned} \alpha &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \beta = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ S_z &= \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \right|$$

2-partikelsystem

beskrivs av $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$

sannolikhets täthet: $\rho_{r_1, r_2} = |\Psi|^2$

Sannolikhets att finna part. 1 i V_1 och 2 i V_2 :

$$P(r_1 \in V_1, r_2 \in V_2) = \int_{V_1} \int_{V_2} \rho d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

Skalarprodukt

$$\langle U | V \rangle = \int \int d^3 r_1 d^3 r_2 U^*(r_1, r_2) V(r_1, r_2)$$

Heliumatomen

$$H = \underbrace{\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m}}_{\text{kinetisk energi}} - \underbrace{\frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2}}_{\text{Potentialer mellan elektron och atomkärna}} + \underbrace{\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}_{\text{Potential elektron-elektron.}}$$


① Lösning med hjälp av störningsräkning
Antag $V_{12} = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$ är liten $\Rightarrow$ den kan behandlas i störningsräkning.

$$\Rightarrow H_0 = \left(\frac{p_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} \right) + \left(\frac{p_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_2} \right) = H_{01} + H_{02}$$

$$\left. \begin{aligned} H_{01} \phi_n &= E_n \phi_n \\ H_{02} \phi_n &= E_n \phi_n \end{aligned} \right\} \text{Samma lösningar som väteatomen.}$$

$$\underbrace{(H_{01} + H_{02})}_{H_0} \underbrace{\phi_{n_1}(r_1) \phi_{n_2}(r_2)}_{\Psi_{n_1, n_2}(r_1, r_2)} = \underbrace{(E_{n_1} + E_{n_2})}_{E_{n_1, n_2}} \underbrace{\phi_{n_1}(r_1) \phi_{n_2}(r_2)}_{\Psi_{n_1, n_2}(r_1, r_2)}$$

blir $\Psi_{n_1, n_2}(r_1, r_2)$ antisymmetrisk?
Vi måste ta hänsyn till spinn.

$$\Psi(r_1, r_2) = \underbrace{\phi_{100}(r_1)}_{\text{symmetrisk}} \underbrace{\alpha(1) \phi_{100}(r_2) \beta(2)}_{\text{antisymmetrisk}} \quad (\Psi(1, 2) = -\Psi(2, 1)) \text{ som:}$$

$$\begin{aligned} \Psi(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\phi_{100}(r_1) \alpha(1) \phi_{100}(r_2) \beta(2) - \phi_{100}(r_2) \alpha(2) \phi_{100}(r_1) \beta(1) \right] \\ &= \underbrace{\phi_{100}(r_1) \phi_{100}(r_2)}_{\text{symmetrisk (rumsdel)}} \underbrace{\left[\alpha(1) \beta(2) - \alpha(2) \beta(1) \right]}_{\text{antisymmetrisk (spindel)}} \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$