

Föreläsning 6

22/9-2015

Repetition av approximationsmetoder

- ① Variationsmetoden  $\langle \Psi | \hat{A} \Psi \rangle \geq E$
- ② Störningsberäkning,  $\phi^0$ ,  $V=V^0+V^\epsilon$ ,  $\Delta E = \langle \phi^0 | V^\epsilon \phi^0 \rangle$
- ③ Ändliga underrum,  $\hat{H}\phi = E\phi \rightarrow$  Matrisekvation

Sfärisk symmetri

$$V(r, \theta, \varphi) = V(r) \quad (\text{beror bara på } r)$$

Rörelsemängdsmomentet:  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

Kinetiska energin

$$E_{\text{kin}} = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{\vec{p}_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2}$$

Vår för kan vi skriva så här?

Bevis

$$(\vec{L})^2 = (\vec{r} \times \vec{p})^2 = (r p \sin(\theta) \cdot \vec{n})^2 = r^2 p^2 \sin^2 \theta$$

$$\vec{p}_r^2 = (p \cdot \vec{e}_r)^2 = (p \cdot 1 \cdot \cos(\theta))^2 = p^2 \cos^2 \theta$$

Insättning ger:

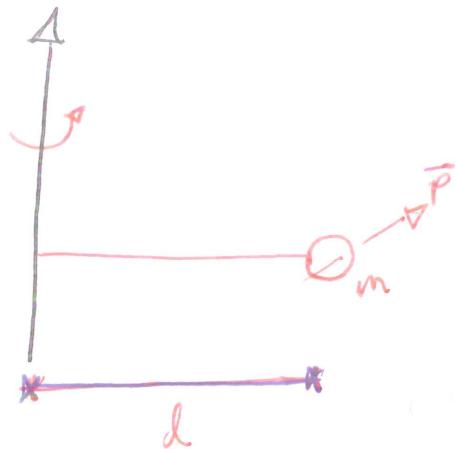
$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2m} [p^2 \cos^2 \theta + p^2 \sin^2 \theta] = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad \square$$

Exempel Rörelseenergi hos en stel kropp.

\* Inelastiskt snöre

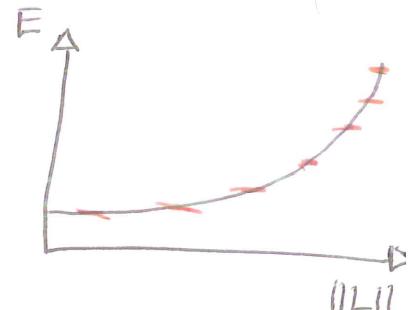
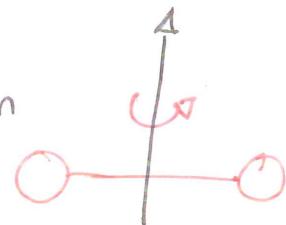
$$\Rightarrow \frac{p_r^2}{2m} = 0$$

$$\Rightarrow E_{kin} = 0 + \frac{\vec{L}^2}{2ml^2} = \frac{\vec{L}^2}{2J}$$



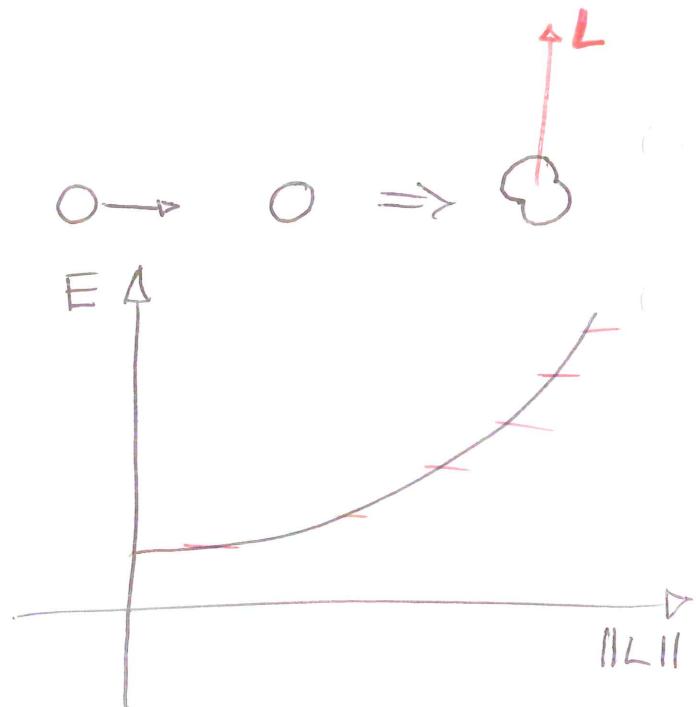
## 2-atomiga molekyler

Klassiskt så är alla h tillåtna men kvantmekaniskt är endast vissa ok som vanligt



## Atomkärnor

Tänk att de träffar varandra lite snett och börjar rotera.



# Hur blir det kvantmekaniskt?

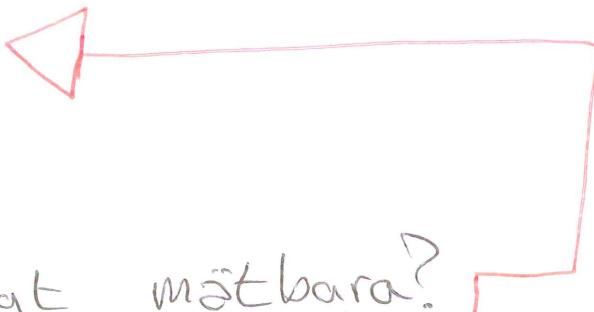
$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = -i\hbar(\vec{r} \times \vec{\nabla})$$

Tänk på att  $\vec{L}, \vec{p}$  är en operator

$$\vec{L} = (L_x, L_y, L_z)$$

$$L_x = \vec{e}_x \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) = e_x \begin{vmatrix} e_x & e_y & e_z \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} = y P_z - z P_y =$$
$$= -i\hbar \left( y \frac{\delta}{\delta z} - z \frac{\delta}{\delta y} \right)$$

$$\begin{cases} L_x = y P_z - z P_y \\ L_y = z P_x - x P_z \\ L_z = x P_y - y P_x \end{cases}$$



Är dessa samtidigt mätbara?

$$\begin{cases} [P_x, P_y] = 0 \\ [P_z, z] = -i\hbar \end{cases} \quad \leftarrow \text{Minns du detta?}$$

Kan en vågfunktion ha givna värden på både  $L_x$  och  $L_y$ ?

$$[L_x, L_y] = [y P_z - z P_y, z P_x - x P_z] = \text{Next page...}$$

$$= \underbrace{[xP_z, zP_x]}_{\textcircled{1}} - \underbrace{[yP_z, xP_z]}_{\textcircled{1}} - \underbrace{[zP_y, zP_x]}_{\textcircled{2}} + \underbrace{[zP_y, xP_z]}_{\textcircled{2}} =$$

(pga derivator)

$$\begin{aligned} \textcircled{1} &= y[P_z, zP_x] + [y, zP_x]P_z = \\ &= yz \underbrace{[P_z, P_x]}_{=0} + y \underbrace{[P_z, z]}_{-i\hbar} P_x = \\ &= y(-i\hbar) P_x \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \textcircled{1} + \textcircled{2} = i\hbar(xP_y - yP_x) = \boxed{i\hbar L_z}$$

Alltså här vi:

$$\left\{ \begin{array}{l} [L_x, L_y] = i\hbar L_z \\ [L_y, L_z] = i\hbar L_x \\ [L_z, L_x] = i\hbar L_y \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{array}{l} L_x, L_y, L_z \text{ har} \\ \text{inte gemensamma} \\ \text{eigenfunktioner} \\ \Rightarrow \text{Ej samtidigt mätbare.} \end{array}$$

$$\text{Vad blir } [L_x, L^2] = [L_x, L_x^2 + L_y^2 + L_z^2] =$$

$$= [L_x, L_x^2] + [L_x, L_z^2] =$$

$$= L_y [L_x, L_y] + [L_x, L_z] L_y =$$

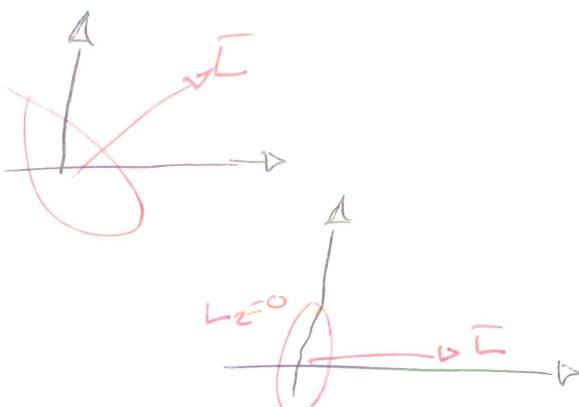
$$= L_z [L_x, L_z] + [L_x, L_z] L_z = 0$$

Ni kan p.s.s. visa att:

$$[L_x, L^2] = 0$$

$$[L_y, L^2] = 0$$

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



Vi kan vilja vilja att jobba med generaliseraade egenfunktioner till  $L^2$  och  $L_z$ .

$\langle L_z \rangle \sim$  Mått på rotation kring  $z$ -axeln  
 $\langle L^2 \rangle \sim$  Mått på rotation kring origo.

Mer om sfärisk symmetri

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases}$$

$$\frac{\delta}{\delta \varphi} = \frac{\delta x}{\delta \varphi} \cdot \frac{\delta}{\delta x} + \frac{\delta y}{\delta \varphi} \cdot \frac{\delta}{\delta y} + \frac{\delta z}{\delta \varphi} \cdot \frac{\delta}{\delta z} =$$

$$= -y \frac{\delta}{\delta x} + x \frac{\delta}{\delta y} = \boxed{\frac{1}{-i\hbar} \hat{L}_z}$$

~~scribble~~

$$\Rightarrow \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\delta}{\delta \varphi}$$

Från kontsys:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left( \underbrace{-\frac{L^2}{\hbar^2}}_{= -\frac{L^2}{\hbar^2}} \right)$$

$$\Rightarrow E_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 =$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2mr} \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial r^2}}_{\text{ber. på } r} r + \frac{1}{2mr^2} \underbrace{\frac{L^2}{\hbar^2}}_{\text{ber. på } \theta, \varphi}$$

Vad har  $L^2$  för egenvärden?

Egenvärden är  $\ell(\ell+1)\hbar^2$ ,  $\ell=0, 1, 2, \dots$

Egenfunktioner är klotfunktionerna:

$$\Psi_\ell^m(\theta, \varphi) \propto P_\ell^m(\cos\theta) e^{im\varphi}, |m| \leq \ell$$

Dessa funktioner är gemensama egenfunktioner till  $(L^2, L_z)$

$$\begin{cases} L^2 \Psi_\ell^m = \hbar^2 \ell(\ell+1) \Psi_\ell^m \\ L_z \Psi_\ell^m = \hbar m \Psi_\ell^m \end{cases} , \text{ för varje } \ell \text{ finns } m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell$$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_l^m(\theta)^* \cdot Y_l^m$$

Ned är det vi vill komma fram till?

✗ svar: Vet inte riktigt.

## HAMILTONOPERATORN

$$H = -\frac{\hbar^2}{2mr} \nabla^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2mr} \cdot \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2mr^2} L^2 + V(r)$$

$$\begin{aligned} & \Rightarrow [L^2, H] = 0 \\ & [L_z, H] = 0 \\ & [L^2, L_z] = 0 \end{aligned}$$

Vi kan alltså finna en uppsättning av tre operatorer som kommuterar med varandra. Det vill säga att de har en bas av gemensamma egenfunktioner.

Vi kollar dessa för  $\Phi(\theta, \phi, r)$ .

$$\begin{cases} H\Phi = E_n \Phi \\ L^2 \Phi = \hbar^2 l(l+1) \Phi \\ L_z \Phi = \hbar m \Phi \end{cases} \Rightarrow \Phi = R(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi)$$

Vi kan döpa dessa blabla.. missade det

# Hur blir Schrödinger ekvationen?

$$H\phi = E\phi$$

Vi vet en ansats:  $\phi = R(r) Y_l^m$

Efter insättning och omordning får vi:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr} \cdot \frac{d^2}{dr^2} (r R Y_l^m) + \frac{1}{2mr^2} L^2 R Y_l^m + V(r) R Y_l^m = E \cdot Y_l^m$$

$$\Leftrightarrow \cancel{Y_l^m} \left( -\frac{\hbar^2}{2mr} (r R)^{ll} \right) + \cancel{Y_l^m} \left( \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^3} (r R) \right) + \cancel{Y_l^m} \cdot \frac{V(r)}{r} (r R) = E \cdot \cancel{Y_l^m}$$

Variabelbyte:  $rR = u$ .

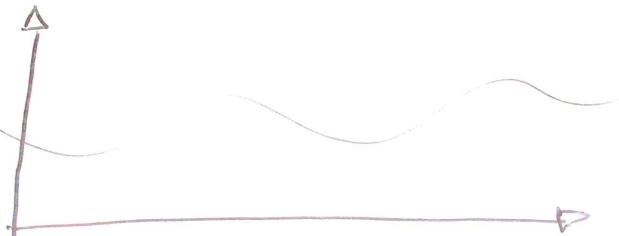
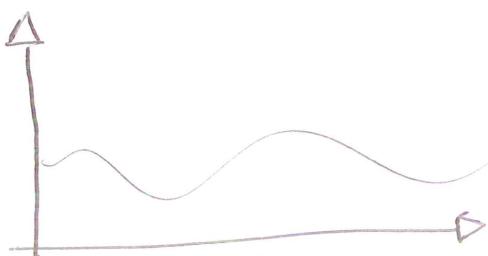
Mult med  $r$  ger:

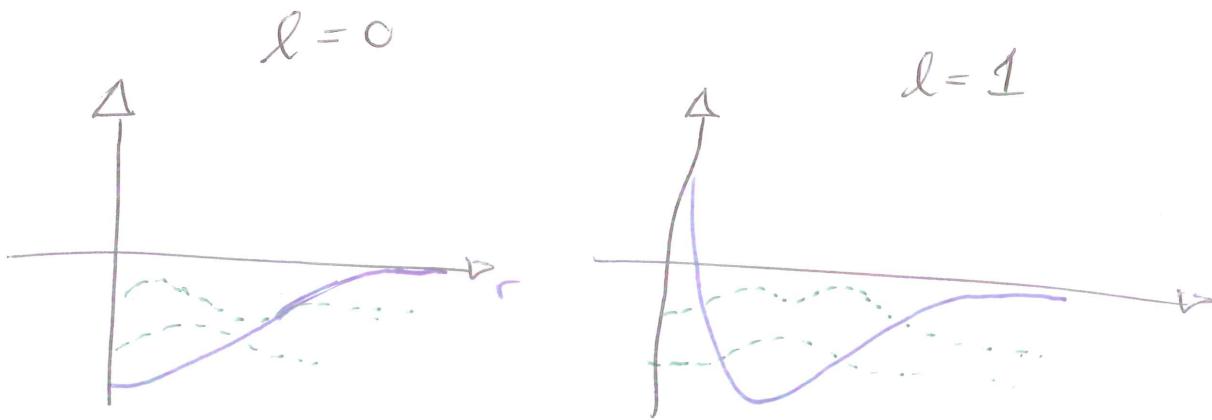
$$-\frac{\hbar^2}{2m} u^{ll} + \left( \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right) u = Eu$$

$\underbrace{\qquad\qquad}_{V_{eff}}$

$$\Leftrightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} u^{ll} + V_{eff} \cdot u = Eu}$$

För varje värde på  $l$  får vi en effektiv potential  $V_{eff}$ .





För varje  $l$  döper vi dem i energiordning:

$$u = u_{nl}(r), E = E_{nl}$$

$$\phi = \phi_{nlm} = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$l=0, 1, 2, 3, \dots$   
 s p d f

Något om degeneration osv.