

## 4 - 13 - HYDROGENATOMET - LF

1 Laplaceoperatoren i kulekoordinater er

$$\Delta f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \varphi} \left( \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \sin \varphi \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right)$$

så den tidsuavhengige schrödingerlikningen blir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \varphi} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \sin \varphi \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \right) - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi = E\psi.$$

Hvis vi nå ganger med  $r^2$ , får vi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin^2 \varphi} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{\sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \sin \varphi \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \right) - \frac{q^2 r}{4\pi\epsilon_0} \psi = Er^2 \psi.$$

og setter alle  $r$ -tingene på den ene siden, får vi

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{q^2 r}{4\pi\epsilon_0} \psi + Er^2 \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{\sin^2 \varphi} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{\sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \sin \varphi \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \right)$$

Hvis vi nå setter inn  $\psi(x) = R(r)Y(\theta, \varphi)$ , får vi

$$\begin{aligned} Y(\theta, \varphi) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr} \left( r^2 R'(r) \right) + \frac{q^2 r}{4\pi\epsilon_0} R(r)Y(\theta, \varphi) + Er^2 R(r)Y(\theta, \varphi) \\ = -R(r) \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{\sin^2 \varphi} \left( \frac{\partial^2 Y(\theta, \varphi)}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{\sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \sin \varphi \frac{\partial Y(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} \right) \right) \end{aligned}$$

og deler vi likningen på  $R(r)Y(\theta, \varphi)$  får vi

$$\begin{aligned} \frac{1}{R(r)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr} \left( r^2 R'(r) \right) + \frac{q^2 r}{4\pi\epsilon_0} + Er^2 \\ = -\frac{1}{Y(\theta, \varphi)} \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{\sin^2 \varphi} \left( \frac{\partial^2 Y(\theta, \varphi)}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{\sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \sin \varphi \frac{\partial Y(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} \right) \right). \end{aligned}$$

Siden den ene siden nå kun avhenger av radien og den andre kun av vinklene, må begge sider være konstante, og vi får de to likningene

$$\gamma = \frac{1}{R(r)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr} \left( r^2 R'(r) \right) + \frac{q^2 r}{4\pi\epsilon_0} + Er^2$$

og

$$\gamma = -\frac{1}{Y(\theta, \varphi)} \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{\sin^2 \varphi} \left( \frac{\partial^2 Y(\theta, \varphi)}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{\sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \sin \varphi \frac{\partial Y(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} \right) \right).$$

2 Her gjelder det å huske tilbake til oppgave 1 i økt 4-2. Likningen som relaterer stigningene med hensyn på den kartesiske basisen og og kulekoordinatbasisen, er

$$\left( \frac{\partial}{\partial r} \quad \frac{\partial}{\partial \theta} \quad \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \begin{pmatrix} e_r^T \\ \frac{1}{r^2 \sin^2 \varphi} e_\theta^T \\ \frac{1}{r^2} e_\varphi^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} & \frac{\partial}{\partial x_2} & \frac{\partial}{\partial x_3} \end{pmatrix}$$

La oss skrive dette ut i detalj slik:

$$\left( \frac{\partial}{\partial r} \quad \frac{\partial}{\partial \theta} \quad \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \begin{pmatrix} \cos \theta \sin \varphi & \sin \theta \sin \varphi & \cos \varphi \\ -\frac{1}{r \sin \varphi} \sin \theta & \frac{1}{r \sin \varphi} \cos \theta & 0 \\ \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi & \frac{1}{r} \sin \theta \cos \varphi & -\frac{1}{r} \sin \varphi \end{pmatrix} = \left( \frac{\partial}{\partial x_1} \quad \frac{\partial}{\partial x_2} \quad \frac{\partial}{\partial x_3} \right)$$

Dette ser nok litt forvirrende ut siden derivasjonsoperatoren står til venstre for kulekoordinatjacobien, så la oss skrive det ut på likningsform slik:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_1} &= \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r \sin \varphi} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} &= \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial x_3} &= \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

Nå er det bare å sette inn i uttrykket for  $L$  og huske at

$$x = \begin{pmatrix} r \cos \theta \sin \varphi \\ r \sin \theta \sin \varphi \\ r \cos \varphi \end{pmatrix}$$

Det er litt jobb, men du får

$$\begin{aligned} i\hbar L_1 &= r \sin \theta \sin \varphi \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &\quad - r \cos \varphi \left( \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &= -\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i\hbar L_2 &= r \cos \varphi \left( \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r \sin \varphi} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &\quad - r \cos \theta \sin \varphi \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &= -\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i\hbar L_3 &= -r \sin \theta \sin \varphi \left( \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r \sin \varphi} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &\quad + r \cos \theta \sin \varphi \left( \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned}$$

og

$$\begin{aligned}
 L^2 &= L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 \\
 &= -\hbar^2 \left( x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \right)^2 + -\hbar^2 \left( x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} \right)^2 + -\hbar^2 \left( x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \right)^2 \\
 &= -\hbar^2 \left( \left( -\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2 + \left( -\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2 + \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 \right) \\
 &= -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin^2 \varphi} \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{\sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right)
 \end{aligned}$$

Merk at operatører ganges ut litt annerledes enn skalarer siden rekkefølgen på derivasjonene ikke nødvendigvis kommuterer. Hvis du blir forvirret er det bare å slenge inn et skalarfelt og derivere og dobbeltsjekke. Her er utregningene i detalj. La

$$D_1 = -\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad \text{og} \quad D_2 = -\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Da er

$$\begin{aligned}
 D_1^2 f &= \left( -\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2 f \\
 &= \left( -\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left( -\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) f \\
 &= \left( \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left( \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) f \\
 &= \left( \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left( \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} + \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \\
 &= \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \\
 &\quad + \sin \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \sin \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \\
 &= \frac{\cos^2 \varphi}{\sin^2 \varphi} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \cos \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \\
 &\quad + \sin \theta \cos \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right)
 \end{aligned}$$

og

$$\begin{aligned}
 D_2^2 f &= \left( -\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2 f \\
 &= \left( -\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left( -\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) f \\
 &= \left( -\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left( -\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} + \cos \theta \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \\
 &= \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) - \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \cos \theta \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \\
 &\quad - \cos \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \cos \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \cos \theta \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \\
 &= \frac{\cos^2 \varphi}{\sin^2 \varphi} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) - \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \cos \theta \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \\
 &\quad - \cos \theta \sin \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \cos^2 \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right)
 \end{aligned}$$

så nå er det bare å bruke produktregelen på de leddene som ikke er skrevet ut og sjekke at alt stemmer.

3 Vi beregner

$$\begin{aligned}
 \frac{-1}{\hbar^2} [L_1, L_2] &= \left( x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \left( x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \\
 &\quad - \left( x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \left( x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \\
 &= x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} \left( x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} \right) - x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} \left( x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) - x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \left( x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} \right) + x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \left( x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \\
 &\quad - x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} \left( x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) + x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} \left( x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) + x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} \left( x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) - x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} \left( x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \\
 &= x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} + x_2 x_3 \frac{\partial}{\partial x_3 x_1} - x_2 x_1 \frac{\partial}{\partial x_3^2} - x_3^2 \frac{\partial}{\partial x_2 x_1} - x_3 x_1 \frac{\partial}{\partial x_2 x_3} \\
 &\quad - x_2 x_3 \frac{\partial}{\partial x_1 x_3} + x_1 x_2 \frac{\partial}{\partial x_3^2} + x_3^2 \frac{\partial}{\partial x_1 x_2} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_3 x_1 \frac{\partial}{\partial x_2 x_3} \\
 &= x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{1}{i\hbar} L_3
 \end{aligned}$$

slik at

$$[L_1, L_2] = i\hbar L_3.$$

De to andre beregningene er like.

Siden  $L_1^2$  og  $L_1$  kommuterer, får vi

$$\begin{aligned} [L^2, L_1] &= [L_1^2, L_1] + [L_2^2, L_1] + [L_3^2, L_1] \\ &= L_1^2 L_1 - L_1 L_1^2 + L_2^2 L_1 - L_1 L_2^2 + L_3^2 L_1 - L_1 L_3^2 \\ &= L_2^2 L_1 - L_1 L_2^2 + L_3^2 L_1 - L_1 L_3^2 = [L_2^2, L_1] + [L_3^2, L_1] \end{aligned}$$

og nå kunne vi satt inn uttrykkene for  $L_k$  og regna i vei, men det er enklere å bruke regneregel 4 her: [https://en.wikipedia.org/wiki/Commutator#Lie-algebra\\_identities](https://en.wikipedia.org/wiki/Commutator#Lie-algebra_identities) og skrive

$$\begin{aligned} [L_2^2, L_1] + [L_3^2, L_1] &= L_2 [L_2, L_1] + [L_2, L_1] L_2 + L_3 [L_3, L_1] + [L_3, L_1] L_3 \\ &= -i\hbar L_2 L_3 - i\hbar L_3 L_2 + i\hbar L_3 L_2 + i\hbar L_2 L_3 = 0 \end{aligned}$$

slik at  $[L^2, L_1] = 0$ . De andre beregningene er like.

Så regner vi

$$[L_3, L_+] = [L_3, L_1 + iL_2] = [L_3, L_1] + i[L_3, L_2] = i\hbar L_2 + \hbar L_1 = \hbar L_+$$

og så videre.

4 Lett!

$$\begin{aligned} L_3 L_+ Y &= L_3 L_+ Y + L_+ L_3 Y - L_+ L_3 Y + Y \\ &= L_+ L_3 Y + [L_3, L_+] Y \\ &= L_+ L_3 Y + \hbar L_+ Y \\ &= L_+ (L_3 + \hbar) Y = (\mu + \hbar) L_+ Y \end{aligned}$$

Merk ellers at egenverdien  $\mu$  må ha samme benevning som  $\hbar$ , altså joule sekund.

5 Vi har

$$(L^2 - L_3^2)Y = (\lambda - \mu^2)Y.$$

Siden  $L_1$  er hermittisk, er egenverdiene reelle, og da må  $L_1^2$  være positivt definit. Det samme gjelder for  $L_2^2$  og følgelig for summen av dem. Men da må også  $L^2 - L_3^2$  være positivt definit, og følgelig er

$$\lambda - \mu^2 \geq 0.$$

Merk nå at  $\lambda$  må ha samme benevning som  $\hbar^2$ .

6 Vi kan fortsette som i oppgave 4 og se ved induksjon at

$$L_3 L_+^n Y = (\mu + n\hbar) L_+^n Y$$

men når  $(\mu + n\hbar)^2$  når opp til  $\lambda$  må dette stoppe opp på en eller annen måte siden  $L^2 - L_3^2$  er en hermittisk lineæropoperator og vi ikke kan ha  $(\mu + n\hbar)^2 \geq \lambda$ . Den eneste måten å få

dette til på er at  $L_+^m Y = 0$  for en eller annen  $m$ . Av samme grunn må  $L_-^n Y = 0$  for en eller annen  $n$ . La oss kalle de korresponderende egenvektorene for  $Y_l$  og  $Y_k$  og egenverdiene til  $L_3$  for  $l\hbar$  og  $k\hbar$  der  $l$  og  $k$  er benevningsløse tall. (Husk at  $\mu$  må ha samme benevnelse som  $\hbar$ .) Egenvektorlikningene til disse med hensyn på  $L_2$  blir

$$\begin{aligned} L^2 Y_l &= (L_- L_+ + L_3^2 + \hbar L_3) Y_l \\ &= (0 + l^2 \hbar^2 + \hbar^2 l) Y_l \\ &= \hbar^2 l(l+1) Y_l \end{aligned}$$

og

$$\begin{aligned} L^2 Y_k &= (L_+ L_- + L_3^2 - \hbar L_3) Y_k \\ &= (0 + k^2 \hbar^2 - \hbar^2 k) Y_k \\ &= \hbar^2 k(k-1) Y_k \end{aligned}$$

så det er klart at de er egenvektorer til  $L^2$ . Men siden  $L^2$  kommuterer med  $L_+$  og  $L_-$ , kan vi beregne at

$$L^2 L_+ Y = L_+ L^2 Y = L_+ \lambda Y = \lambda L_+ Y$$

og

$$L^2 L_- Y = L_- L^2 Y = L_- \lambda Y = \lambda L_- Y$$

så vi må ha

$$\hbar^2 l(l+1) = \lambda = \hbar^2 k(k-1).$$

Likningen  $l(l+1) = k(k-1)$  er en annengradslikning i  $l$  for hver verdi av  $k$ , og *abc*-formelen gir

$$\begin{aligned} l &= \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 4k(k-1)}}{2} \\ &= \frac{-1 \pm 2\left(k - \frac{1}{2}\right)}{2} = -\frac{1}{2} \pm \left(k - \frac{1}{2}\right) \end{aligned}$$

slik at enten  $l = -k$  eller  $l = k - 1$ . Den siste likningen er ikke mulig siden  $l \geq k$ , så vi må ha  $l = -k$ . Siden det for hvert valg av  $l$  finnes både  $\mu_l = l\hbar$  og  $\mu_{-l} = -l\hbar$  og du skal kunne gå i hele steg mellom disse ved å bruke  $L_+$  og  $L_-$ , må det nesten være slik at  $l$  er enten et helt eller et halvt tall.

7] Så med all vår nye kunnskap kan vi skrive likningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{1}{\sin^2 \varphi} \left( \frac{\partial^2 Y(\theta, \varphi)}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{\sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \sin \varphi \frac{\partial Y(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} \right) \right) = \gamma Y(\theta, \varphi)$$

om til

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{1}{\sin^2 \varphi} \left( \frac{\partial^2 Y_l(\theta, \varphi)}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{\sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \sin \varphi \frac{\partial Y_l(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} \right) \right) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e} Y_l(\theta, \varphi)$$

eller

$$\frac{1}{\sin^2 \varphi} \left( \frac{\partial^2 Y_l(\theta, \varphi)}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{\sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \sin \varphi \frac{\partial Y_l(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} \right) = -l(l+1)Y_l(\theta, \varphi)$$

Vi setter  $Y_l(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$  inn i denne likningen og får og får

$$\frac{\Phi(\varphi)}{\sin^2 \varphi} \Theta''(\theta) + \frac{\Theta(\theta)}{\sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \Phi'(\varphi) \sin \varphi \right) = -l(l+1)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

og så deler vi på  $\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$  og får

$$\frac{1}{\Theta(\theta) \sin^2 \varphi} \Theta''(\theta) + \frac{1}{\Phi(\varphi) \sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \Phi'(\varphi) \sin \varphi \right) = -l(l+1)$$

som kan skrives om til

$$\frac{1}{\Theta(\theta)} \Theta''(\theta) = -\frac{\sin \varphi}{\Phi(\varphi)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \Phi'(\varphi) \sin \varphi \right) + l(l+1) \sin^2 \varphi.$$

Følgelig er

$$\frac{1}{\Theta(\theta)} \Theta''(\theta)$$

og

$$-\frac{\sin \varphi}{\Phi(\varphi)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \Phi'(\varphi) \sin \varphi \right) + l(l+1) \sin^2 \varphi$$

begge konstante, slik at

$$\Theta''(\theta) = \alpha \Theta(\theta)$$

og

$$-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \Phi'(\varphi) \sin \varphi \right) + l(l+1) \Phi(\varphi) \sin^2 \varphi = \alpha \Phi(\varphi).$$

Siden  $\Theta$  må være periodisk er det klart at  $\alpha < 0$ , og det peneste er nå (akkurat som i TMA4106) å sette  $\gamma = -m^2$  og

$$\Theta_m(\theta) = A_m \cos m\theta + B_m \sin m\theta,$$

men for vårt formål er det nå mer praktisk å skrive dette som

$$\Theta_m(\theta) = A_m e^{im\theta} + B_m e^{-im\theta}.$$

og så husker vi på at  $m^2 \leq l(l+1)$ , siden  $hm$  er egenverdien til  $L_3$ .

8] Dersom  $p(s) = \Phi(\arccos(s))$  er  $p'(s) = -\Phi'(\arccos(s))/\sqrt{1-s^2}$  eller

$$\frac{d}{ds} = -\sqrt{1-s^2} \frac{d}{d\varphi}$$

om du foretrekker det. For øvrig er  $\sin \varphi = \sin(\arccos(s)) = \sqrt{1-s^2}$ , så likningen

$$\sin \varphi \frac{d}{d\varphi} \left( \Phi'(\varphi) \sin \varphi \right) = (m^2 - l(l+1) \sin^2 \varphi) \Phi(\varphi)$$

blir

$$(1-s^2) \frac{d}{ds} \left( (1-s^2)p'(s) \right) = (m^2 - l(l+1)(1-s^2)) p(s)$$

eller

$$\frac{d}{ds} \left( (1-s^2)p'(s) \right) + \left( l(l+1) - \frac{m^2}{(1-s^2)} \right) p(s) = 0$$

La oss begynne med spesialtilfellet  $m = 0$ , slik at

$$\frac{d}{ds} \left( (1-s^2)p'(s) \right) + l(l+1)p(s) = 0$$

eller

$$(1-s^2)p''(s) - 2sp'(s) + l(l+1)p(s) = 0$$

Det vanlige er å gjette på en løsning på potensrekkeform:

$$p(s) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n s^n$$

Dersom vi er i det absolutte konvergensområdet til denne, kan vi derivere og få

$$p'(s) = \sum_{n=1}^{\infty} n a_n s^{n-1} \quad \text{og} \quad p''(s) = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) a_n s^{n-2}$$

som innsatt i likningen gir

$$(1-s^2) \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) a_n s^{n-2} - 2s \sum_{n=1}^{\infty} n a_n s^{n-1} + l(l+1) \sum_{n=0}^{\infty} a_n s^n = 0$$

eller

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} s^n - \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} s^{n+2} - 2 \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) a_{n+1} s^{n+1} + l(l+1) \sum_{n=0}^{\infty} a_n s^n = 0.$$

Sammenlikner vi koeffisientene på hver potens av  $s$ , får vi

$$(n+2)(n+1) a_{n+2} - n(n-1) a_n - 2n a_n + l(l+1) a_n = 0$$

slik at

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} = \frac{n(n+1) - l(l+1)}{(n+2)(n+1)}.$$

Her ser vi at for  $s = \pm 1$  vil rekken divergere med mindre vi kombinerer heltallsløsningen  $\lambda = l(l+1)$  med kravet at  $a_0 = 0$  eller  $a_1 = 0$  alt etter om  $l$  er odde eller jevn. Da vil rekken terminere og så får vi polynomløsninger. Disse polynomene kalles **legendrepolynomene**<sup>1</sup>  $P_l$  og det er de du får ut om du Gram-Schmidtter  $1, s, s^2, \dots$ . De dukker visst opp i neuralnett, og det er de du skal bruke om du ønsker å beregne et integral numerisk til en helt insane presisjon.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>[https://en.wikipedia.org/wiki/Legendre\\_polynomials](https://en.wikipedia.org/wiki/Legendre_polynomials)

<sup>2</sup>[https://en.wikipedia.org/wiki/Gauss-Legendre\\_quadrature](https://en.wikipedia.org/wiki/Gauss-Legendre_quadrature)



Dersom  $m \neq 0$ , blir likningen noe mer komplisert, men løsningene er **de assosierte Legendre-funksjonene**<sup>3</sup>

$$P_l^m(s) = (-1)^m (1-s^2)^{m/2} \frac{d^m}{ds^m} P_l(s).$$

Det litt for kjedelig å regne seg frem til denne formen, så vi kan ta det for god fisk. Det generelle studiet av likninger i denne kategorien kalles **sturmliouvilleteori**<sup>4</sup> og er litt hardt for oss, men noen av dere vil nok støte på det senere.

9] Dersom  $r$  er stor blir alt som er delt på  $r$  veldig lite, så vi står igjen med

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} R''(r) + ER(r) = 0$$

og siden  $E < 0$  for bundne tilstander blir løsningen

$$R(r) \approx e^{-r\sqrt{-2Em_e}/\hbar}$$

Dette motiverer

$$\alpha^2 = -\frac{2Em_e}{\hbar^2} \quad \text{og} \quad \rho = 2\alpha r.$$

Det finnes også en løsning med positiv eksponent, men den skroter vi siden  $|\Psi|^2$  skal være en sannsynlighetstetthet. Det finnes også en integrasjonskonstant jeg ikke skrev opp. Kjernerregelen gir

$$S'(\rho) = \frac{1}{2\alpha} R'(\rho/2\alpha) \quad \text{og} \quad S''(\rho) = \frac{1}{4\alpha^2} R''(\rho/2\alpha)$$

så likningen for  $S$  blir

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( 4\alpha^2 S''(\rho) + \frac{8\alpha^2}{\rho} S'(\rho) \right) + \left( \frac{2\alpha q^2}{4\pi\rho\epsilon_0} + E \right) S(\rho) = \frac{4\alpha^2 \hbar^2 l(l+1)}{2m_e \rho^2} R(r).$$

eller (vi deler ut  $E = -\alpha^2 \hbar^2 / 2m_e$ )

$$4S''(\rho) + \frac{8}{\rho} S'(\rho) - \left( 1 - \frac{4\rho_0}{\rho} + \frac{4l(l+1)}{\rho^2} \right) S(\rho) = 0.$$

10] Vi beregner

$$S'(\rho) = e^{-\rho/2} \left( F'(\rho) - \frac{1}{2} F(\rho) \right)$$

og

$$\begin{aligned} S''(\rho) &= -\frac{1}{2} e^{-\rho/2} \left( F'(\rho) - \frac{1}{2} F(\rho) \right) + e^{-\rho/2} \left( F''(\rho) - \frac{1}{2} F'(\rho) \right) \\ &= e^{-\rho} \left( F''(\rho) - F'(\rho) + \frac{1}{4} F(\rho) \right). \end{aligned}$$

<sup>3</sup>[https://en.wikipedia.org/wiki/Associated\\_Legendre\\_polynomials](https://en.wikipedia.org/wiki/Associated_Legendre_polynomials)

<sup>4</sup>[https://en.wikipedia.org/wiki/Sturm-Liouville\\_theory](https://en.wikipedia.org/wiki/Sturm-Liouville_theory)

Vi setter denne inn i likningen og deler ut  $e^{-\rho/2}$  og får

$$F''(\rho) - F'(\rho) + \frac{1}{4}F(\rho) + \frac{2}{\rho}\left(F'(\rho) - \frac{1}{2}F(\rho)\right) - \left(\frac{1}{4} - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)F(\rho) = 0$$

eller

$$F''(\rho) + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right)F'(\rho) - \left(\frac{1-\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)F(\rho) = 0.$$

Antar vi en løsning på potensrekkeform:

$$F(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n \quad F'(\rho) = \sum_{n=1}^{\infty} n a_n \rho^{n-1} \quad F''(\rho) = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) a_n \rho^{n-2}$$

og setter inn, får vi

$$\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) a_n \rho^{n-2} + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right) \sum_{n=1}^{\infty} n a_n \rho^{n-1} - \left(\frac{1-\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n = 0.$$

La oss rydde litt:

$$\begin{aligned} \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) a_n \rho^{n-2} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} n a_n \rho^{n-2} - \sum_{n=1}^{\infty} n a_n \rho^{n-1} \\ - (1-\rho_0) \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^{n-1} - l(l+1) \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^{n-2} = 0 \end{aligned}$$

og skrive om indeksene:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} \rho^n + 2 \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) a_{n+1} \rho^{n-1} - \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) a_{n+1} \rho^n \\ - (1-\rho_0) \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^{n-1} - l(l+1) \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^{n-2} = 0 \end{aligned}$$

og så er det bare å brette opp ermene og studere koeffisientene til forskjellige potenser av  $\rho$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho^2} : & \quad -l(l+1)a_0 \\ \frac{1}{\rho} : & \quad 2a_1 - (1-\rho_0)a_0 - l(l+1)a_1 \\ 1 : & \quad 6a_2 - a_1 - (1-\rho_0)a_1 - l(l+1)a_2 \\ & \quad \vdots \\ \rho^k : & \quad (k+2)(k+3)a_{k+2} - (k+1)a_{k+1} - (1-\rho_0)a_{k+1} - l(l+1)a_{k+2} \end{aligned}$$

Av dette ser vi at alle koeffisienter helt opp til  $(k+2)(k+3) = l(l+1)$  må være null. Denne kan være sann på to måter; og den positive (og eneste korrekte) løsningen er  $k = l - 2$ , og dette betyr at  $a_l$  er den første koeffisienten som kan være ulik null.

11 Vi beregner

$$F(\rho) = \rho^l L(\rho)$$

$$F'(\rho) = l\rho^{l-1}L(\rho) + \rho^l L'(\rho)$$

$$F''(\rho) = l(l-1)\rho^{l-2}L(\rho) + 2l\rho^{l-1}L'(\rho) + \rho^l L''(\rho)$$

og setter inn i likningen for  $F$  og får

$$\begin{aligned} & l(l-1)\rho^{l-2}L(\rho) + 2l\rho^{l-1}L'(\rho) + \rho^l L''(\rho) \\ & + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right)(l\rho^{l-1}L(\rho) + \rho^l L'(\rho)) - \left(\frac{1-\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\rho^l L(\rho) = 0 \end{aligned}$$

og deler vi ut  $\rho^{l-1}$  og rydder litt, får vi

$$\rho L''(\rho) + (2(l+1) - \rho)L'(\rho) + (\rho_0 - l + 1)L(\rho) = 0.$$

Vaniljelaguerre er

$$\rho L_n''(\rho) + (1 - \rho)L_n'(\rho) + nL_n(\rho) = 0$$

og laplaser vi denne og rydder, får vi ( $L_n(0)$  kansellerer)

$$(s - s^2)\frac{d}{ds}\mathcal{L}(L_n) + (n + 1 - s)\mathcal{L}(L_n) = 0$$

som har løsning

$$\mathcal{L}(L_n) = \frac{(s-1)^n}{s^{n+1}}.$$

Nå er det bare å se at

$$\mathcal{L}\left(\frac{d^n}{d\rho^n}(\rho^n e^{-\rho})\right) = \frac{n!s^n}{(s+1)^{n+1}}$$

slik at

$$\mathcal{L}\left(\frac{e^{-\rho}}{n!}\frac{d^n}{d\rho^n}(\rho^n e^{-\rho})\right) = \frac{(s-1)^n}{s^{n+1}}.$$

Dette betyr at laguerrepolyomene tilfredsstillter rekursjonen

$$L_n(\rho) = \frac{e^{-\rho}}{n!}\frac{d^n}{d\rho^n}(\rho^n e^{-\rho}).$$

Dette gir laguerrepolyomene på en konstant nær. Det finnes mange andre måter å definere dem på, for eksempel

$$L_n(\rho) = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \frac{(-1)^k}{k!} \rho^k$$

eller ved rekursjonen

$$\rho L_n'(\rho) = n(L_n(\rho) - L_n'(\rho))$$

eller

$$L_n(\rho) = \frac{1}{n!} \left( \frac{d}{d\rho} - 1 \right)^n \rho^n.$$

Løsningene  $L_n^k$  til den assosierte laguerrelikningen

$$\rho L''(\rho) + (2(l+1) - \rho)L'(\rho) + (\rho_0 - l - 1)L(\rho) = 0$$

kan nå skrives

$$L_n^k(\rho) = (-1)^k \frac{d^k}{d\rho^k} L_{n+k}(\rho)$$

der  $k = 2(l+1)$  og  $n = \rho_0 - l - 1$ .<sup>5</sup>

---

<sup>5</sup>[https://en.wikipedia.org/wiki/Principal\\_quantum\\_number](https://en.wikipedia.org/wiki/Principal_quantum_number)