Radiallignning

Med vilkårlig isotropt potensial $V(r)$:

$$\Big[\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Big(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\Big)}_{\hat{K}_r}+\underbrace{\frac{1}{2\mu r^2}\vec{L}^2}_{\hat{K}_L}+V(r)\Big]RY_{\ell m}=ERY_{\ell m}$$

- $\vec{L}^2 Y_{\ell m} = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}$
- Lurt å innføre $u(r) = r \cdot R(r)$; lign. for u blir:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u(r)}{dr^2}+V_{\text{eff}}^{\ell}(r)\,u(r)=E\,u(r)$$

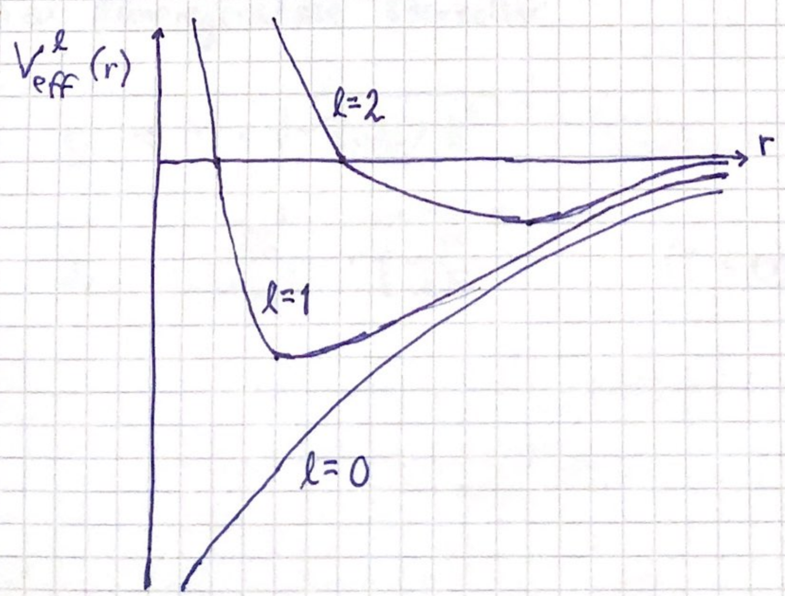
dvs TUSL i 1D med et "effektivt" potensial

$$V_{\text{eff}}^{\ell}(r) = V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

det egentlige potensialet

frastøtende sentrifugalbidrag; gjør området nær $r=0$ klassisk forbudt når $\ell > 0$

Med Coulombpotensialet $V(r) = -Ze^2/4\pi\varepsilon_0 r$:



Siden $\min\{V_{eff}^{\ell}\} < 0$ for alle verdier av ℓ, forventer vi bundne tilstander, med $E_{n_r,\ell} < 0$, for alle ℓ, med radielt kvantetall $n_r = 0, 1, 2, \ldots$, og tilhørende bølgefunksjoner $u_{n_r,\ell}(r)$ med n_r nullpunkter.

Systemet (H, He^+, Li^{2+}, ...) består av to partikler, elektronet med masse m_e og kjernen med masse $Z \cdot m_p$ (+ evt. m_n pr nøytron). Som for toatomige molekyler separerer bevegelsen i tyngdepunktbevegelsen (fri partikkel med masse $m_e + Z \cdot m_p + N \cdot m_n$; uinteressant for oss) og relativbevegelsen, som en partikkel med redusert masse, som for H-atomet er (med $Z=1$, $N=0$)

$$\mu = \left(1/m_e + 1/m_p \right)^{-1} = 0.9995\, m_e \approx m_e$$

Ligningen for u blir

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left\{ \frac{\lambda}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{1}{4} \right\} u = 0$$

med dimensjonsløse størrelser

$$\rho = r \cdot \sqrt{-8\mu E/\hbar^2}$$

$$\lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar} \cdot \sqrt{\frac{-\mu}{2E}} \qquad (E<0)$$

- For $\underline{l=0}$ ser vi at en løsning, uten nullpunkter for $\rho > 0$, er $u(\rho) = \rho \cdot \exp(-\rho/2)$, for da er $u''(\rho) = \exp(-\rho/2)\cdot(\rho/4 - 1)$, og innsetting gir

$$\exp(-\rho/2)\,(\rho/4 - 1 + \lambda - \rho/4) = 0,$$

som er oppfylt når $\lambda = 1$, dvs $E = -\dfrac{\mu\,(Ze^2)^2}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}$.

Med $Z=1$ og $\mu = m_e$ er dette $E \approx -13.6$ eV.

- For $\underline{l>0}$ skal vi se at $u(\rho) = \rho^{l+1}\cdot\exp(-\rho/2)$ fungerer bra, både i grensen $\rho\to\infty$ og når $\rho\to 0$.

For store ρ ($\rho \gg \lambda$ og $\rho \gg l$) er ligningen omtrent

$$u'' - \frac{1}{4}u = 0$$

med

$$u'' = e^{-\rho/2}\left\{l(l+1)\rho^{l-1} - (l+1)\rho^{l} + \frac{1}{4}\rho^{l+1}\right\}$$

$$\approx e^{-\rho/2}\cdot\frac{1}{4}\rho^{l+1} \qquad \Rightarrow u'' - \frac{1}{4}u \approx 0 \;;\; \text{OK}$$

Når $\rho\to 0$, er ligningen omtrent

$$u'' - \frac{l(l+1)}{\rho^2}u = 0$$

med $u = \rho^{l+1}\cdot\exp(-\rho/2) \approx \rho^{l+1}$, $u' \approx (l+1)\rho^{l}$

og $u'' \approx l(l+1)\rho^{l-1}$

$$\Rightarrow u'' - \frac{l(l+1)}{\rho^2}u \approx 0 \quad ; \quad \text{OK}$$

- Dermed satser vi på løsningsformen $u(\rho) = e^{-\rho/2}\cdot v(\rho)$ med potensrekke for $v(\rho)$ som starter fra ρ^{l+1}, dvs

$$v(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k\cdot\rho^{l+1+k}$$

Ligningen for $v(\rho)$:

$$v'' - v' + \left\{ \frac{\lambda}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right\} v = 0$$

Innsetting gir rekursjonsformelen

$$\frac{C_k}{C_{k-1}} = \frac{\ell + k - \lambda}{k(2\ell + 1 + k)} \quad ; \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

som for $k \gg 1$ gir $C_k / C_{k-1} \approx 1/k$, og dermed

$v(\rho) = \left(\sum_k^{\infty} \frac{1}{k!} \rho^k \right) \cdot \rho^{\ell+1} \sim e^{\rho} \cdot \rho^{\ell+1}$, slik at

$u(\rho) \sim \rho^{\ell+1} \cdot e^{\rho/2} \to \infty$ når $\rho \to \infty$.

Rekka må bryte av, dvs $\lambda =$ et heltall $\geq \ell + 1$.
Vi bytter navn fra λ til n:

$$n = \ell + 1 + n_r \quad ; \quad n_r = 0, 1, 2, \dots$$

For gitt n er $\ell = n - 1 - n_r \leq n - 1$

Dvs: $n = 1, 2, 3, \dots$; $\ell = 0, 1, \dots, n-1$

Energiegenverdier for de bundne tilstandene er:

$$E_n = -\frac{\mu (Ze^2)^2}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2 n^2} = -\mu c^2 \cdot \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\approx -13.6\,\text{eV} \cdot Z^2/n^2$$

$\left(\alpha = e^2/4\pi\varepsilon_0 \hbar c \approx 1/137 \right)$