

# Kvantemekanikk i 3 dimensjoner

March 11, 2022

I det følgende skal vi betrakte tre-dimensjonale kvantemekaniske systemer. Mye er nesten 1-til-1 analogt med en-dimensjonale potensialer, men det dukker også opp helt nye konsepter i 3D som drivmoment.

## Partikkel i 3D boks

Vi starter med å se på partikkel i en tre-dimensjonal boks, dette kan beregnes helt analogt med i en 1D. Vi har nå at Hamilton operatoren som

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}) \quad (1)$$

$$= \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} + V(x, y, z) \quad (2)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \quad (3)$$

hvor vi har at energien er summen av kinetisk og potensiell energi og at bevegelsesmengden kan dekomponeres i bevegelsesmengden i  $x$ ,  $y$  og  $z$  retning. Vi får da T.U.S.L. som

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (4)$$

en partiell differensialligning. Vi har nå at

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & x, y, z \in (0, L) \\ \infty & x, y, z \notin (0, L) \end{cases} \quad (5)$$

Vi kan dekomponere dette probleme ved hjelp av separasjon av variable og følgende Ansatz

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z) \quad (6)$$

slik at vi får 3 ordinære differensialligninger istedenfor den mer vriene-å-løse partielle differensialligningen. Vi setter inn for Ansatzen vår i T.U.S.L. og finner

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (YZ \frac{\partial^2}{\partial x^2} X + XZ \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y + XY \frac{\partial^2}{\partial z^2} Z) + V(x, y, z)XYZ = EXYZ \quad (7)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{X} \frac{\partial^2}{\partial x^2} X + \frac{1}{Y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} Z \right) + V(x, y, z) = E \quad (8)$$

Vi får nå tre ordinære differensialligninger siden vi har at inne i boksen hvor  $V(x) = 0$  og må ha at hvert av leddene på venstre side må være lik en konstant og vi får da

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) = E_x X(x) \quad (9)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) = E_y Y(y) \quad (10)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} Z(z) = E_z Z(z) \quad (11)$$

hvor  $E = E_x + E_y + E_z$ . Dette er for hver komponent helt identisk med det en-dimensjonale problemet og vi får da

$$\psi(x, y, z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{3}{2}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right) \quad x, y, z \in (0, L) \quad (12)$$

og vi har energien som

$$E = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} \quad (13)$$

$$= \frac{(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \quad (14)$$

## Drivmoment

Vi ser nå på systemer som er sfærisk symmetrisk. Noen potensialer er ikke separable i Cartesiske koordinater, men det viser seg at de ofte er separable i sfæriske koordinater om vi antar at  $V = V(r)$ . Dvs. sfærisk symmetriske potensialer er separable i sfæriske koordinater. Vi starter med å betrakte bevegelsesmengde operatoren i 3D i Cartesiske koordinater

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i}_x + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{i}_y + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{i}_z \right) = \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (15)$$

og vi har

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\hbar \nabla^2 \quad (16)$$

hvor

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (17)$$

kalles Laplace operatoren. I sfæriske koordinater har vi Laplace operatoren som

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (18)$$

Vi skal i det følgende betrakte drivmoment til en kvantemakanisk partikkel. Vi har fra klassisk fysikk at

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (19)$$

Som vi kan betrakte komponent for komponent i Cartesiske koordinater

$$L_y = yp_z - zp_y \quad (20)$$

$$L_y = zp_x - xp_z \quad (21)$$

$$L_z = xp_y - yp_x \quad (22)$$

Som i kvantemakanikken da blir, når vi opphøyer klassiske variabler til kvantemakaniske operatorer

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = y\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} \quad (23)$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = z\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \quad (24)$$

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \quad (25)$$

Siden vi nå vil beskrive angulær bevegelsesmengde så er det enklest å bruke sfæriske koordinater. Vi har at relasjonen mellom sfæriske og Cartesiske koordinater er

$$x = r \sin(\theta) \cos(\phi) \quad (26)$$

$$y = r \sin(\theta) \sin(\phi) \quad (27)$$

$$z = r \cos(\theta) \quad (28)$$

Dette gir

$$\frac{\partial x}{\partial \phi} = -y \quad (29)$$

$$\frac{\partial y}{\partial \phi} = x \quad (30)$$

$$\frac{\partial z}{\partial \phi} = 0 \quad (31)$$

$$(32)$$

Dette gir videre at

$$\frac{\partial}{\partial \phi} = \frac{\partial x}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial z} \quad (33)$$

$$= -y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y} \quad (34)$$

Dette gir da at z-komponenten av drivmoment operatoren er forholdsvis enkel

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (35)$$

siden rotasjon om z-aksen bare krever forandring i azimutal vinkelen. Rotasjon om x- eller y-aksen krever endring i både azimutal og polar vinkel og er derfor noe mer kompleks. Vi har at

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left( -\sin(\phi) \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot(\theta) \cos(\phi) \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (36)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left( \cos(\phi) \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot(\theta) \sin(\phi) \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (37)$$

Vi har da

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (38)$$

$$= -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (39)$$

Vi vil nå finne eigenfunksjonene til  $\hat{\mathbf{L}}^2$ . Vi starter med å merke oss at

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0 \quad (40)$$

som vi ser må være tilfellet siden  $\hat{L}_z$  deriverer mhp.  $\phi$  og  $\hat{\mathbf{L}}^2$  ikke har noen direkte  $\phi$  avhengighet annen enn andrederivert-operatoren og vi vet at rekkefølgen av partiell-deriverte er likegyldig hvilket gir oss at  $\hat{\mathbf{L}}^2$  og  $\hat{L}_z$  kommunuterer. Det viser seg at vi også har

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_y] = 0 \quad (41)$$

men dette er litt emr infløkt å vise; man må regne ut kommutatoren for å se det.

Dette betyr da at  $\hat{\mathbf{L}}^2$  og  $\hat{L}_z$  har et komplett sett av simultane eigenfunksjoner. Dette betyr at vi kan beregne eigenfunksjonene til  $\hat{L}_z$  identisk til  $\hat{\mathbf{L}}^2$  som formodentlig er enklere.

Vi har benyttet oss av separasjon av variabler og skriver  $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$  som er eigenfunksjonen til både  $\hat{\mathbf{L}}^2$  og  $\hat{L}_z$  slik at

$$\hat{L}_z Y(\theta, \phi) = L_z Y(\theta, \phi) \quad (42)$$

$$\hat{L}_z \Theta(\theta)\Phi(\phi) = L_z \Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (43)$$

Slik at vi får

$$\hat{L}_z Y(\theta, \phi) = L_z Y(\theta, \phi) \quad (44)$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \Theta(\theta)\Phi(\phi) = L_z \Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (45)$$

$$\Rightarrow \Theta(\theta) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \Phi(\phi) = \Theta(\theta) L_z \Phi(\phi) \quad (46)$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \Phi(\phi) = L_z \Phi(\phi) \quad (47)$$

Som gir at

$$\Phi(\phi) = e^{i \frac{L_z \phi}{\hbar}} \quad (48)$$

hvor vi ser bort i fra konstanten som burde ha kommet fra løsningen i differensialligningen, vi setter heller konstanten til slutt når vi normaliserer  $Y(\theta, \phi)$ . hvor vi ser bort i fra konstanten som burde ha kommet fra løsningen i differensialligningen, vi setter heller konstanten til slutt når vi normaliserer  $Y(\theta, \phi)$ . Dette er da en eigenfunksjon for  $\hat{L}_z$ , siden vi kan ha  $\Theta(\theta)$  som hva som helst, e.g. en konstant.

Dette uttrykket ligner umiskinnelig på uttrykket for bevegelsesmengdens eigenfunksjon. Men det er en stor forskjell, siden vi her trenger å ha at når  $\phi$  forandrer seg med  $2\pi$  så må vi komme tilbake til det samme stedet. Vi trenger derfor å ha at

$$\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi) \quad (49)$$

Siden om dette ikke er tilfellet og vi har e.g.  $\Phi(0) \neq \Phi(2\pi)$  så er ikke den deriverte definert ved  $\phi = 0$ . Dette er ekvivalent med at den deriverte mhp.  $x$  (og derfor bevegelsesmengden) er uendelig om bølgefunktjonen ikke er kontinuerlig. Dette gir da

$$e^{i \frac{L_z(\phi+2\pi)}{\hbar}} = e^{i \frac{L_z \phi}{\hbar}} \quad (50)$$

$$\Rightarrow e^{i \frac{2\pi L_z}{\hbar}} = 1 \quad (51)$$

Hvor vi vet at vi har at  $e^{ix} = 1$  når  $x$  er heltallsmultiplum av  $\pi$  slik at vi får

$$L_z = m_l \hbar \quad \forall m_l \in \mathbb{N} \quad (52)$$

Dvs vi har alltid at z-komponenten av drivmomentet er kvantisert, og de tillatte verdiene er heltallsmultiplum av  $\hbar$ .

Vi vil nå bestemme  $\theta$  avhengigheten til  $Y(\theta, \phi)$  og vi har eigenverdiligningen

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y(\theta, \phi) \quad (53)$$

hvor vi faktorerer ut en faktor av  $\hbar^2$  av eigenverdien, slik at  $l(l+1)$  er dimensjonsløs. Vi taper ingen generalitet på å uttrykke eigenverdien på denne måten, og vi skal snart se hvorfor vi velger å skrive den på denne formen. Dette gir

$$-\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \Theta(\theta)\Phi(\phi) = l(l+1)\hbar^2 \Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (54)$$

$$\Rightarrow -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \Theta(\theta) e^{i\phi m_l} = l(l+1)\hbar^2 \Theta(\theta) e^{i\phi m_l} \quad (55)$$

$$\Rightarrow -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{m_l^2}{\sin^2(\theta)} \right] \Theta(\theta) = l(l+1)\hbar^2 \Theta(\theta) \quad (56)$$

$$\Rightarrow \left[ \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + l(l+1) \sin^2(\theta) - m_l^2 \right] \Theta(\theta) = 0 \quad (57)$$

Dette er Legendre's ligning for argument  $\cos(\theta)$  og løsningene til dette er

$$\Theta(\theta) = NP_l^{m_l}(\cos(\theta)) \quad (58)$$

assosierede Legendre funksjonene

$$P_l^{m_l}(x) = (1 - x^2)^{\frac{|m_l|}{2}} \left( \frac{\partial}{\partial x} \right)^{|m_l|} P_l(x) \quad (59)$$

hvor  $P_l(x)$  igjen er Legendre polynomene gitt e.g. ved Rodrigues formel som sier at

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left( \frac{\partial}{\partial x} \right)^l (x^2 - 1)^l \quad (60)$$

Det  $l$ 'te Legendre polynomet  $P_l(x)$  er et  $l$ 'te ordens polynom som er enten jevnt eller odde avhengig av pariteten til  $l$ . Men  $P_l^{m_l}(x)$  er ikke generelt et polynom siden vi får en faktor  $\sqrt{1 - x^2}$  når  $m_l$  er odde. Vi ser videre at når  $m_l < l$  så får vi at  $P_l^{m_l}(x) = 0$  og vi ser at Rodrigues formel kun gir mening for ikke-negative heltall.

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (61)$$

$$m_l = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l \quad (62)$$

Det finnes dog løsninger for andre verdier av  $m_l$  og  $l$  av Legendre's ligning, men det viser seg at de løsningen da ikke er endelige ved  $\theta = 0$  og  $\theta = \pi$ . Disse løsningene er derfor ikke normaliserbar og følgelig ikke fysikalske, og vi må forkaste de. Vi har da at løsningene er  $Y_l^{m_l}(\theta, \phi) = NP_l^{m_l}(\theta)e^{im_l\phi}$  som vi kan bestemme konstanten til vha normaliseringsbetingelsen. Vi finner da de sfæriske harmoniske er

$$Y_l^{m_l} = (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^{m_l}(\cos(\theta)) e^{im_l\phi} \quad (63)$$

Vi har at de sfæriske harmoniske er ortonormale

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi (Y_l^{m_l'})^* Y_l^{m_l} \sin(\theta) d\theta d\phi = \delta_{m_l, m_l'} \delta_{l, l'} \quad (64)$$

Slik at vi har både eigenverdien til kvadratet og z-komponenten til drivmomentet som kvantisert. Vi skriver de sfæriske harmoniske som  $Y_l^{m_l}(\theta, \phi)$  og eigenverdiligningene

$$\hat{L}_z Y_l^{m_l}(\theta, \phi) = m_l \hbar Y_l^{m_l}(\theta, \phi) \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (65)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_l^{m_l}(\theta, \phi) = l(l+1) \hbar^2 Y_l^{m_l}(\theta, \phi) \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (66)$$

Vi ser på absoluttverdien til drivmomentet

$$|\mathbf{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar \quad (67)$$

og merker oss at dette alltid er strengt større enn den maksimale projeksjonen av drivmomentet på z-aksen

$$L_{z,max} = l \hbar \quad (68)$$

Siden  $m_l$  alltid er mindre enn eller lik  $l$ . Hvilket vil si at vi aldri kan legge hele drivmomentet, som er en vektor, stringent i z-retning.

Vi kan forstå dette ved å betrakte kommutatoren og uskarphetsrelasjonene mellom drivmoment-operatorene

i de forskjellige retningene. Vi har e.g.

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}] \quad (69)$$

$$= [y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}, z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}] + [z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}] \quad (70)$$

$$= y \left[ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}, z \right] \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \left[ z, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \right] x \quad (71)$$

$$= y [\hat{p}_z, \hat{z}] \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} [\hat{z}, \hat{p}_z] x \quad (72)$$

$$= -i\hbar y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} x i\hbar \quad (73)$$

$$= i\hbar (-y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} x) \quad (74)$$

$$= i\hbar \hat{L}_z \quad (75)$$

hvor vi har brukt kommutator-identiteten

$$[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C} + \hat{D}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{D}] + [\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{D}] \quad (76)$$

og at hvert av leddene som deriverer med hensyn på en variabel kommutere med ledd som ikke avhenger av den variabelen.

Vi ser da at x- og y-komponenten til drivmomentet ikke kommerterer og vi vet da at vi har en uskarphet-srelasjonen mellom de. Vi får

$$\Delta L_x \Delta L_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle L_z \rangle| \quad (77)$$

Det vil si at om vi har en partikkel i en egenstilling av  $\hat{L}_z$  med eigenverdi  $m_l \hbar \neq 0$  så følger det at z-komponenten til partikkel er kjent med sikkerhet, men siden  $\langle L_z \rangle$  så er  $\Delta L_x$  og  $\Delta L_y$  begge ulik 0. Dette betyr at det er en iboende uskarphet i  $L_x$  og  $L_y$  og vi ser at vi i kvantemekanikk ikke har et begrep om at drivmomentet er en vektor i rommet som peker i en bestemt retning, siden det impliserer at vi kjenner  $L_x$ ,  $L_y$  og  $L_z$  skarpt samtidig.

Vi betrakter dette i kontrast til lineær bevegelsesmengde hvor vi har

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = \left[ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right] = 0 \quad (78)$$

slik at vi kan bestemme de forskjellige komponentene til bevegelsesmengden skarpt samtidig.

## Hydrogenatomet

Vi skal nå se og regne på Hydrogenatomet. Vi vet at vi har et elektristisk påtensiale mellom protonet og elektronet i Hydrogen atomet, så vi antar derfor et Coulomb potensialet som vi har som

$$V_C(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (79)$$

vi vet er sentralsymmetrisk. Vi har at  $e$  er elementærladningen altså ladningen til elektronet,  $\epsilon_0$  er vakuumpermittiviteten og  $Z$  er atomtallet som for Hydrogenatomet må være  $Z = 1$ , men vi kan også uten videre

betrakte ionisert Helium med  $Z = 2$ . Vi har da T.U.S.L. som

$$E\psi = \hat{H}\psi \quad (80)$$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_C(r)\right)\psi \quad (81)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \psi - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi \quad (82)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \hat{\mathbf{L}}^2 \right) \psi - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi \quad (83)$$

hvor vi eksplisit ser at all vinkel-avhengigheten til Hamilton-operatoren er gitt i  $\hat{\mathbf{L}}^2$  som gjør at vi får følgende Ansatz

$$\psi = R(r)Y_l^{m_l}(\theta, \phi) \quad (84)$$

Dette gir ved innsettelse i T.U.S.L.

$$ER(r)Y_l^{m_l} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r)Y_l^{m_l} + \frac{1}{2mr^2} \hat{\mathbf{L}}^2 R(r)Y_l^{m_l} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} R(r)Y_l^{m_l} \quad (85)$$

$$\Rightarrow ER(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} R(r) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} R(r) \quad (86)$$

Vi gjennomfører et variabel bytte for å forenkle dette litt

$$u(r) = rR(r) \quad (87)$$

Dette gir

$$Eu(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r) + \left( \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) u(r) \quad (88)$$

som vi merker at er lik den en-dimensjonale S.L. men med et nytt effektivt potensiale

$$V_{eff} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (89)$$

Vi har her at den første termen er et sentrifugal ledd, og den kalles ofte sentrifugal barrieren. Dette ledet holder for  $l > 0$  elektronet vekke ifra protonet.