JOS LAATIKON MITAT ENSIN $(a, \frac{10}{9}a, \frac{10}{11}a) \Rightarrow$

$$E_{n_1n_2n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n_1^2 + \frac{81}{100}n_2^2 + \frac{121}{100}n_3^2\right) = E_1 \frac{100n_1^2 + 81n_2^2 + 121n_3^2}{100}$$

$\Rightarrow$ ENSIMMÄINEN ENERGIAPYSTYRIVI

JOS NYT KAKSI ENSIMMÄISTÄ SÄRMÄÄ SAMAT $(a, a, \frac{10}{11}a)$

$$\Rightarrow E_{n_1n_2n_3} = E_1 \frac{100n_1^2 + 100n_2^2 + 121n_3^2}{100}$$

NYT VOIDAAN VAIHTAA $n_1 \Leftrightarrow n_2$ ENERGIAN MUUTTUMATTA.

JOS KAIKKI SIVUT YHTÄ PITKIÄ (a, a, a)

$$\Rightarrow E_{n_1n_2n_3} = E_1 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

NYT KAIKKI KVANTTILUVUT SAMASSA ASEMASSA ENERGIAN MÄÄRÄYTYMISESSÄ

to display this behavior as follows:

n_1	n_2	n_3	$\frac{100}{E_1}E_{n_1n_2n_3}$	$\sqrt{\frac{a^3}{8}}\psi_{n_1n_2n_3}$
1	1	1	302 → 321 → 300	$\cos\frac{\pi x}{a}\cos\frac{\pi y}{a}\cos\frac{\pi z}{a}$
1	1	2	665 684 600	$\cos\frac{\pi x}{a}\cos\frac{\pi y}{a}\sin\frac{2\pi z}{a}$
1	2	1	545 → 621 → 600	$\cos\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a}\cos\frac{\pi z}{a}$
2	1	1	602 621 600	$\sin\frac{2\pi x}{a}\cos\frac{\pi y}{a}\cos\frac{\pi z}{a}$
1	2	2	908 984 900	$\cos\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a}\sin\frac{2\pi z}{a}$
2	1	2	965 → 984 → 900	$\sin\frac{2\pi x}{a}\cos\frac{\pi y}{a}\sin\frac{2\pi z}{a}$
2	2	1	845 921 900	$\sin\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a}\cos\frac{\pi z}{a}$
2	2	2	1208 → 1284 → 1200	$\sin\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a}\sin\frac{2\pi z}{a}$

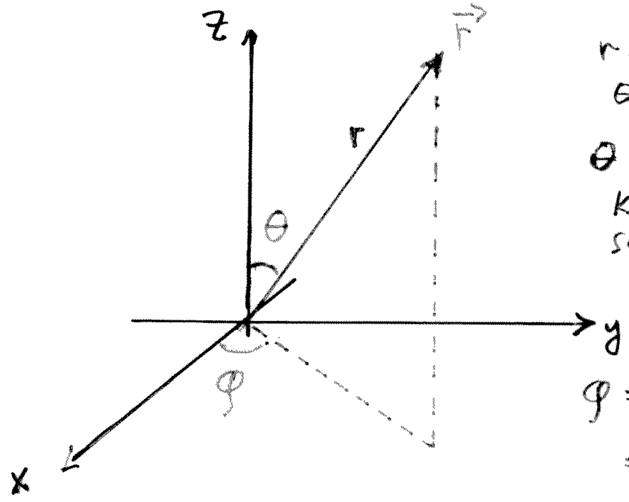
...

5. IMPULSSIMOMENTIN KVANTITTUMINEN

TÄSTÄ ETEENPÄIN TARVITAAN

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

MISSÄ r, θ, φ OVAT PALLOKOORDINAATIT



$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ ETÄISYYS ORIGOSTA

$\theta = \arccos(z/r)$ KULMA z-AKSELIN SUHTEEN

$\varphi = \arccos\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} = \arcsin\frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}}$

PROJEKTION KULMA X-AKSELIN SUHTEEN

NÄISSÄ KOORDINAATEISSA

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

$(\Rightarrow$ m.m. $x^2 + y^2 + z^2 = r^2(\sin^2\theta\cos^2\varphi + \sin^2\theta\sin^2\varphi + \cos^2\theta) = r^2)$

HUOM:

$r > 0$

$0 \leq \theta \leq \pi$

$0 \leq \varphi \leq 2\pi$

RELEVANTTI TILAVUUSELEMENTTI

$d\tau = dx\,dy\,dz \longrightarrow r^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi$

5.1. PALLOSYMMETRINEN POTENTIAALI JA KESKEISVOIMA

KLASSINEN
KESKEISVOIMA: VOIMA PITKIN $\vec{r}$-VEKTORIA
(ORIGOSTA POIS TAI SIIHEN PÄIN)
– EI "VÄÄNTÖÄ" $\quad \vec{F} = \pm F\,\hat{r}$

JOHDETTAVISSA PALLOSYMMETRISESTÄ POTENTIAALISTA $V(r)$:

$$\vec{F} = -\nabla V(r) = -\hat{r}\,\frac{dV(r)}{dr}$$

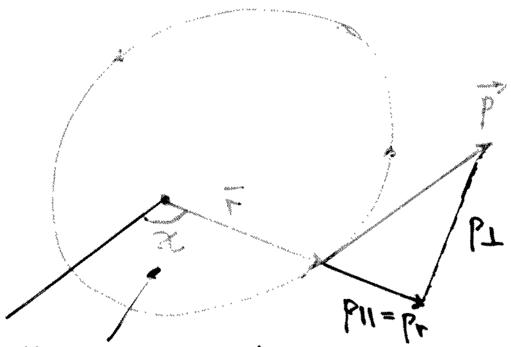
(EI KULMADERIVAATTOJA $\to 0$)

TÄLLAISEN VOIMAN VAIKUTUKSESSA IMPULSSIMOMENTTI $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ SÄILYY:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \underbrace{\underbrace{\frac{d\vec{r}}{dt}}_{\propto\,\vec{p}}\times\vec{p}}_{0} + \underbrace{\vec{r}\times\underbrace{\frac{d\vec{p}}{dt}}_{\vec{F}}}_{0} = 0$$

VAKIO SUURUUDELTAAN JA SUUNNALTAAN
$\to$ LIIKE VAKIOTASOSSA $\perp\ \vec{L}$

$\vec{p}$ VOIDAAN JAKAA KOMPONENTTEIHIN $\parallel$ JA $\perp$ $\vec{r}$



KIERTOKULMA JONKUN SÄTEEN SUHTEEN

$$p_r = \mu\,\frac{dr}{dt}$$

$$p_\perp = \mu\, r\,\underbrace{\frac{d\alpha}{dt}}$$

r:IÄÄ VASTAAN KOHTISUORA NOPEUS = KULMANOPEUS $\times\, r$

ILMEISESTI $\vec{L}$:N SUURUUS TULEE KOHTISUORASTA IMPULSSIN OSASTA $\quad L = r\,p_\perp \quad$ (RISTITULO!)

SIIS LIIKE-ENERGIA ON SILLOIN JAETTAVISSA

$$\frac{p^2}{2\mu} = \frac{p_r^2 + p_\perp^2}{2\mu} = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2\mu r^2}$$

$\leftarrow$ LIIKEVAKIO OSOITTAJA

KOKONAISENERGIA:

$$\frac{p^2}{2\mu} + V(r) = \frac{p_r^2}{2\mu} + \underbrace{\frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r)}_{\text{EFEKTIIVINEN POTENTIAALIENERGIA}} = E$$

$V_{eff}(r)$ SISÄLTÄÄ MYÖS "KESKIPAKO-POTENTIAALIN"

KOSKA KLASSISESTI $\frac{p_r^2}{2\mu}$ OLTAVA POSITIIVINEN, MYÖS $L^2/2\mu r^2$ VAIKUTTAA KLASSISESTI SALLITTUIHIN r:N ARVOIHIN POTENTIAALIN TAVOIN $\Rightarrow$ REPULSIO LYHYILLÄ ETÄISYYKSILLÄ

(JOS IMPULSSIMOMENTTIA "KESKIPAKOVOIMA" PITÄÄ KAPPALEET ERILLÄÄN)

5.2. SCHRÖDINGERIN YHTÄLÖ PALLOKOORDINAATEISSA

SCHRÖDINGERIN YHTÄLÖ KOLMESSA ULOTT.

$$p^2 \longrightarrow \hbar^2 \nabla^2$$

VERRATTAESSA KLASSISEEN LIIKE-ENERGIAAN ILMEISESTI

$$p_r \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$$

(GRADIENTTIOPERAATTORIN r-KOMPONENTTI)

JA

$$p_r^2 \longrightarrow -\hbar^2 \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) = -\frac{\hbar^2}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\, r$$

HUOM: OPEROI AALTOFUNKTIOON

$$\left(-\frac{\hbar^2}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi)\right)$$

(HELPPO OSOITTAA KÄYTTÄEN KETJUSÄÄNTÖÄ $\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi$:LLE)

KIINNOSTAVAMPI ON JÄLJELLE JÄÄVÄN ∇^2:N KULMAOSAN JA IMPULSSIMOMENTIN YHTEYS

VASTAAVUUS KLASSISEEN ANTAISI

$$\frac{\vec{L}^2}{r^2} \longrightarrow -\hbar^2 \nabla^2 (\text{KULMAT}) \qquad \text{ELI}$$

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

OPEROI AALTOFUNKTIOON!

TARKASTELLAAN $\vec{L}$:N KOMPONENTTEJA: ONKO TODELLA NÄIN?

USEIMMIN KÄYTETTY IMPULSSIMOMENTIN KOMPONENTTI ON z-KOMPONENTTI

$$L_z = xp_y - yp_x \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(r\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial y} - r\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$\vec{L}^2$:N OLETETUSSA LAUSEKKEESSA ESIINTYY $\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$:

$$\frac{\partial}{\partial\varphi} = \frac{\partial x}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial y}$$

KETJUSÄÄNTÖ

$$= -r\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial x} + r\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial y} + 0$$

$$= x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}$$

SAMA KUIN L_z LUKUUNOTTAMATTA $\frac{\hbar}{i}$:TÄ

$$\Longrightarrow \boxed{L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}}$$

MUUT KOMPONENTIT HANKALAMPIA: HELPOSTI SAA $\left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial\theta}, \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$:N $\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$:N AVULLA, MUTTA TOISIN PÄIN TYÖLÄS. OTETAAN VALMIS TULOS JA VAIN TARKISTETAAN:

$$L_x = \frac{\hbar}{i}\left[-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left[-\sin\varphi\left(\frac{\partial x}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial z}\right)\right.$$

(KETJUSÄÄNTÖ)

$$\left. - \cot\theta\cos\varphi\left(\frac{\partial x}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial z}\right)\right]$$

$$= \frac{\hbar}{i}\Big[-\sin\varphi\; r\Big(\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial x} + \cos\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial y} - \sin\theta\frac{\partial}{\partial z}\Big)$$
$$- \cot\theta\cos\varphi\; r\Big(-\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial x} + \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial y} + 0\Big)\Big]$$

$$= \frac{\hbar}{i} r\Big[-\cancel{\sin\varphi\cos\theta}\cos\varphi\frac{\partial}{\partial x} - \sin^2\varphi\cos\theta\frac{\partial}{\partial y}$$
$$+ \sin\varphi\sin\theta\frac{\partial}{\partial z} + \cancel{\cos\theta\cos\varphi}\sin\varphi\frac{\partial}{\partial x} - \cos\theta\cos^2\varphi\frac{\partial}{\partial y}\Big]$$

$$= \frac{\hbar}{i}\Big(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\Big) = y p_z - z p_y$$

KUTEN PITÄÄKIN

SAMOIN $L_y = \frac{\hbar}{i}\Big(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\Big)$

NYT HELPPO TODETA ETTÄ

$$\vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$
$$= \Big(\frac{\hbar}{i}\Big)^2\Big(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Big)$$

KUTEN OUNASTELTIIN: $-\hbar^2\nabla^2$:N KULMAOSA.

$-\frac{\vec{L}^2}{\hbar^2}\Psi$

NYT SCHRÖDINGERIN YHTÄLÖ ON SIIS

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\Big[\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Psi\Big) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Psi\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}\Big]$$
$$+ V(r)\,\Psi(\vec{r}) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r})$$

STATIONAARISILLA TILOILLA TAAS AIKARIIPPUVUUS

$$e^{-iEt/\hbar} \Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \to E$$

$\Rightarrow$ KOLMIULOTTEINEN OMINAISARVOYHTÄLÖ (AJASTA RTON S-YHTÄLÖ)

5.3. KIERTOLIIKE TASOSSA

TARKASTELLAAN YMPYRÄLIIKETTÄ TASOSSA. UNOHDETAAN HETKEKSI EPÄTARKKUUS r:N ARVOSSA JA AJATELLAAN HIUKKASEN LIIKKUVAN ETÄISYYDELLÄ R ORIGOSTA. TÄTÄ RAJOITETTA (PAKOTETTA) LUKUUNOTTAMATTA POTENTIAALI ON 0.

$\Rightarrow$ LIIKE-ENERGIA KLASSISESTI

$$\frac{p_\perp^2}{2\mu} = \frac{L_z^2}{2\mu R^2} = E$$

(AINOA $\vec{L}$:N KOMPONENTTI)

$\Rightarrow$ SCHRÖDINGERIN YHTÄLÖ (AJASTA RTON; STATIONAARINEN)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu R^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Psi = E\Psi$$

(OLISI VOINUT AJATELLA: KOORDINAATTI $R\varphi$ JA VAST. IMPULSSI JA DERIVAATTA)

$$\Rightarrow \Psi = A e^{\pm i\lambda\varphi} \qquad \lambda^2 = \frac{2\mu R^2}{\hbar^2}E$$

VAADITAAN YKSIKÄSITTEISYYTTÄ: $\Psi(\varphi + 2\pi) = \Psi(\varphi)$

$$\Rightarrow A e^{\pm i\lambda(\varphi+2\pi)} = A e^{\pm i\lambda\varphi} \Rightarrow e^{\pm 2\pi i\lambda} = 1$$

OLTAVA $\lambda = m$ = KOKONAISLUKU

$\Rightarrow$ ENERGIA $E = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2}m^2$ KVANTITTUNUT KUTEN IMPULSSIMOMENTTI

VRT. DE BROGLIEN AALTO BOHRIN ATOMISSA (KOKONAISLUKUMÄÄRÄ AALTOJA)

TÄMÄ ON (TIETYSTI) MYÖS L_z:N OMINAISFUNKTIO

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} A e^{\pm im\varphi} = \underbrace{\pm\hbar m}_{} A e^{\pm im\varphi}$$

L_z:N OMINAISARVO !

HUOM: SALLIMALLA KOKONAISLUVULLE m POSITIIVISET TAI NEGATIIVISET ARVOT (M.L. 0) VOI LUOPUA $\pm$:STA

AIKARIIPPUVUUS $\Rightarrow \begin{cases} m>0 & \varphi \text{ KASVAA} \\ m<0 & \varphi \text{ PIENENEE} \end{cases}$

ENERGIA SAMA $\pm m$:LLE $\Rightarrow$ DEGENERAATIO KIERTOSUUNNAN SUHTEEN

NORMITUS: $\int_0^{2\pi} |\Psi|^2 d\varphi = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

KOKO (AJASTA RVA) AALTOFUNKTIO ON

$$\Psi_m(\varphi,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} e^{-iE_m t/\hbar} \qquad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$$

ENERGIAN JA L_z:N OMINAISFUNKTIO
$\Rightarrow$ KUMPIKIN TARKKA SAMANAIKAISESTI

- KVANTITTUMINEN MYÖS TN-JAKAUMAN YKSIARVOISUUDESTA (λ-λ' KOKONAISLUKU)

QM I: IMP. MOM. YLEINEN TEORIA
$\Rightarrow$ KVANTITTUNUT $\lambda = m$

5.4. IMPULSSIMOMENTIN OMINAISFUNKTIOT: PALLOFUNKTIOT

HALUAMME JATKAA AJASTA RIIPPUMATTOMAN SCHRÖDINGERIN YHTÄLÖN RATKAISEMISTA. ILMEISESTI $V(r)$ VAIKUTTAA SUORAAN AINAKIN RADIAALISEEN RIIPPUVUUTEEN. OSOITTAUTUU, ETTÄ KOSKA SE EI RIIPU KULMAMUUTTUJISTA, NÄITÄ VASTAAVA OSA VOIDAAN RATKAISTA (KAHTA VAKIOTA VAILLE) ILMAN V:TÄ.

ILMEISESTI $V(r)$ SOPII MUUTTUJIEN EROTUKSEEN r-RIIPPUVUUS VS. MUUT (EI SEKOITA MUUTTUJIA)
$\Rightarrow$ YRITE $\Psi(\vec{r}) = \Psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\,Y(\theta,\varphi)$
SIJOITETAAN S-YHTÄLÖÖN (SIIRRETÄÄN TERMEJÄ)

$$\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\underset{RY}{\Psi}\Big) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2}(E - V(r))\underset{RY}{\Psi} = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Psi\Big) - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2} \quad RY$$

$\Rightarrow$

$$\frac{1}{R}\Big[\frac{d}{dr}\Big(r^2\frac{dR}{dr}\Big) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2}(E - V(r))\Big] = -\frac{1}{Y}\Big[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\Big]$$

VAIN r:N FUNKTIO

VAIN KULMIEN FUNKTIO

$\rightarrow$ MOLEMMAT PUOLET SAMA VAKIO λ (SEPAROITUU)

$$\therefore \begin{cases} \frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left(E - V(r)\right)R = \lambda R \\ \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} = -\lambda Y \end{cases}$$

JOS NÄILLE $\exists$ KUNNON RATKAISUT, TULOYRITE TOIMII.

KULMAMUUTTUJAYHTÄLÖSSÄ PÄÄSTÄÄN PITEMMÄLLE: YRITETÄÄN EROTTAA VIELÄ θ JA φ:

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

TAAS KIRJOITTAMALLA $Y(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)\,\Phi(\varphi)$ SEPAROITUU

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

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m^2\Phi = 0 \quad \Longrightarrow \quad \Phi(\varphi) = Ae^{im\varphi}$$

KUTEN EDELLÄ: YKSIARVOISUUS $\varphi \to \varphi + 2\pi$

$\Rightarrow$ $m = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots$ KOKONAISLUKU

$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

TÄYSIN RATKAISTU φ-MUUTTUJAN SUHTEEN

JÄÄ θ-YHTÄLÖ

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta = 0$$

θ-RIIPPUVUUDESSA: $\theta \in [0,\pi]$ (MÄÄR.);

YHTÄLÖSSÄ SINGULAARISUUS 0:SSA JA π:SSÄ.

MUUTTUJANVAIHTO $\theta \to u = \cos\theta \in [-1,1]$

$du = -\sin\theta\, d\theta$

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{du}{d\theta}\frac{d}{du} = -\sin\theta\frac{d}{du} = \sqrt{1-u^2}\frac{d}{du}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d}{du}\left[(1-u^2)\frac{d\Theta}{du}\right] + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-u^2}\right)\Theta = 0$$

ELI

$$(1-u^2)\frac{d^2\Theta}{du^2} - 2u\frac{d\Theta}{du} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-u^2}\right)\Theta = 0$$

KUN $m=0$, TUNNETAAN MATEMATIIKASSA **LEGENDREN YHTÄLÖNÄ**

$$(1-u^2)\frac{d^2P}{du^2} - 2uP' + \underbrace{\lambda}_{\to\, \ell(\ell+1)} P = 0$$

JOLLA ON VÄLILLÄ $[-1,1]$ (TS. $\theta \in [0,\pi]$) SÄÄNNÖLLISIÄ NORMITTUVIA RATKAISUJA

VAIN KUN $\lambda = \ell(\ell+1)$, MISSÄ $\ell = 0, 1, 2, \ldots$ (EI-NEG. KOKONAISLUKU)

SILLOIN RATKAISUT OVAT LEGENDREN POLYNOMEJA ASTETTA ℓ: $\Theta(\theta) = P_\ell(u) = P_\ell(\cos\theta)$

KUN $m \neq 0$ RATKAISUT NS. LEGENDREN LIITTOPOLYNOMEJA: $\Theta(\theta) = P_\ell^{|m|}(u) = P_\ell^{|m|}(\cos\theta)$.

(NÄMÄ VOIVAT SISÄLTÄÄ $\sqrt{1-u^2} = \sin\theta$)

OLTAVA MYÖS $|m| \leq \ell$

NÄMÄ OVAT HYVIN TUNNETTUJA FUNKTIOITA!

Y.O. TULOKSET SCHRÖDINGERIN YHTÄLÖN KULMAOSAN RATKAISUJA, SIIS YHTÄLÖSSÄ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2}\psi + V(r)\psi = E\psi$$

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

IMPULSSIMOMENTIN NELIÖ

SIIS ON SAMALLA LÖYDETTY IMPULSSIMOMENTIN NELIÖN OMINAISARVO $\vec{L}^2 \to \hbar^2 \ell(\ell+1)$ $(\ell = 0, 1, 2, \dots)$

JA SEN OMINAISFUNKTIO $P_\ell^{|m|}(\cos\theta)$

SEKÄ LISÄKSI (KOSKA $L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$)

L_z:N OMINAISARVOT $L_z \to \hbar m$ JA $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

VASTAAVAT OMINAISFUNKTIOT $e^{im\varphi}$.

NÄIDEN $\boxed{\text{NORMITETTU}}$ TULO $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ ON S-YHTÄLÖN RATKAISU KULMAMUUTTUJIEN SUHTEEN SEKÄ $\vec{L}^2$:N JA L_z:N YHTEINEN OMINAISFUNKTIO:

$$\vec{L}^2\, Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \hbar^2 \ell(\ell+1)\, Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

$$L_z\, Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \hbar m\, Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

$\boxed{\text{PALLOFUNKTIOT}}$ (SPHERICAL HARMONICS)

TARKEIMMAT OMINAISUUDET:

- NORMITETTU YLI TÄYDEN AVARUUSKULMAN

$$\int d\Omega\, |Y_{\ell m}(\theta,\varphi)|^2 = \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, |Y_{\ell m}(\theta,\varphi)|^2 = 1$$

- ORTOGONAALISET KUN $\ell \neq \ell'$ TAI $m \neq m'$

$$\int d\Omega\, Y^*_{\ell' m'}(\theta,\varphi)\, Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = 0$$

$\Rightarrow$ YHDISTETTYNÄ: $\int d\Omega\, Y^*_{\ell' m'}(\theta,\varphi)\, Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$

(TAUSTA: ERI OM. ARVOJA VASTAAVAT OMINAISFUNKTIOT)

- **TÄYDELLISYYS:** MIELIVALTAINEN KULMARIIPPUVUUS $f(\theta,\varphi)$ VOIDAAN KEHITTÄÄ MIELIV. TARKASTI NÄIDEN AVULLA

$$f(\theta,\varphi) = \sum_{\ell m} a_{\ell m} Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \qquad a_{\ell m} = \int d\Omega\, Y^*_{\ell m}(\theta,\varphi) f(\theta,\varphi)$$

6-1 Spherical Harmonics

ENSIMMÄISET PALLOFUNKTIOT $\ell \leq 2$, $|m| \leq \ell$

$\ell = 0$	$m = 0$	$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
$\ell = 1$	$m = 1$	$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\phi}$
	$m = 0$	$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$
	$m = -1$	$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{-i\phi}$
$\ell = 2$	$m = 2$	$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{2i\phi}$
	$m = 1$	$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}$
	$m = 0$	$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$
	$m = -1$	$Y_{2-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{-i\phi}$
	$m = -2$	$Y_{2-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{-2i\phi}$
	...	

SIIS RATKAISEMALLA SCHRÖDINGERIN YHTÄLÖ KOLMAMUUTTUJIEN SUHTEEN SAATIIN SUORAAN **KVANTITTUNUT** IMPULSSIMOMENTTI JA SEN z-KOMPONENTTI (SIIS DISKREETIT ARVOT, LUONNOLLISENA YKSIKKÖNÄ $\hbar^2$ JA $\hbar$).
OMINAISFUNKTIOIDEN OMINAISARVOINA NÄMÄ OVAT TARKKOJA.

ENTÄ L_x JA L_y?

$$\hat{L}^2 - L_z^2 = \hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 m^2 \geq \hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 l^2 = \hbar^2 l$$

JÄTTÄÄ TILAA NIILLEKIN. OSOITTAUTUU, ETTÄ **KUN** L_z ON TUNNETTU, EPÄTARKKUUSPERIAATE KIELTÄÄ L_x:N JA L_y:N MÄÄRÄÄMISEN (QMI).

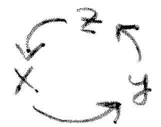
PERUSTELLAAN HIUKAN: KARTEESISILLA KOORDINAATEILLA

$$L_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad L_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} L_xL_y - L_yL_x &= i\hbar L_z \\ L_yL_z - L_zL_y &= i\hbar L_x \\ L_zL_x - L_xL_z &= i\hbar L_y \end{aligned}}$$

SYKLINEN PERMUTOINTI



KOMMUTOINTI- ELI VAIHDANTASÄÄNNÖT

(ESIM:

$$\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\psi = \left(y\frac{\partial}{\partial x} + \cancel{yz\frac{\partial^2}{\partial z\partial x}} - \cancel{yx\frac{\partial^2}{\partial z^2}}\right)\psi - \left(\cancel{z^2\frac{\partial^2}{\partial y\partial x}} - \cancel{zx\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}}\right)\psi$$

$$-\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi = -\left(\cancel{zy\frac{\partial^2}{\partial x\partial z}} - \cancel{z^2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}}\right)\psi + \left(\cancel{xy\frac{\partial^2}{\partial z^2}} - x\frac{\partial}{\partial y} - \cancel{xz\frac{\partial^2}{\partial z\partial y}}\right)\psi$$

$$\therefore L_xL_y - L_yL_x = -\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$= i\hbar\,\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = i\hbar L_z$$

MUOT KOMPONENTIT SAMALLA TAVALLA.

KUN OPEROINTIJÄRJESTYKSELLÄ ON VÄLIÄ (SITÄHÄN Y.O. RELAATIOT TARKOITTAVAT), VASTAAVAT MITTAUKSET HÄIRITSEVÄT TOISIAAN JA MUUTTAVAT TOISEN "TULOSTA" ELI **OMINAISFUNKTIOTA**

YRITETÄÄN LASKEA ERI KOMPONENTTIEN ARVOT **OLETTAEN** NIILLÄ KAIKILLA OLEVAN YHTEISEN OMINAISFUNKTION ψ, JOLLE SIIS

$$\begin{cases} L_x\psi = \hbar l_x\psi \\ L_y\psi = \hbar l_y\psi \\ L_z\psi = \hbar l_z\psi \end{cases}$$

KÄYTETÄÄN $L_z = \frac{-i}{\hbar}(L_xL_y - L_yL_x)$

$$\hbar l_z\psi = L_z\psi = -\frac{i}{\hbar}(L_xL_y - L_yL_x)\psi = -\frac{i\hbar^2}{\hbar}(l_xl_y - l_yl_x)\psi = \underline{0}$$

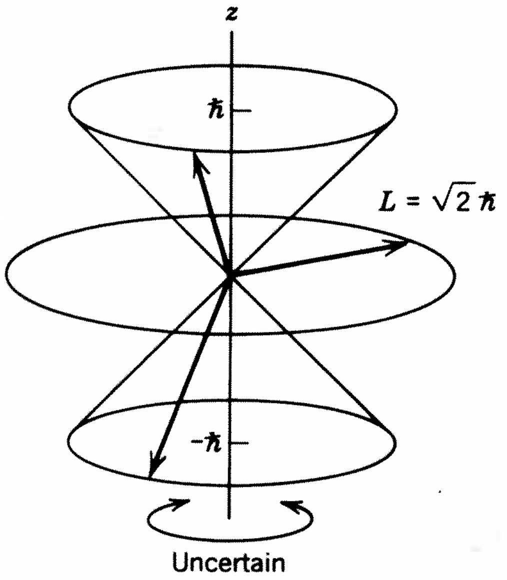
TÄLLÖIN OLISI (KAIKKIEN) ARVO 0 $\Rightarrow \hat{L}^2 = 0$

165

Figure 6-7
Quantized angular momentum vectors for $\ell = 1$. The allowed z components of $\mathbf{L}$ are $\pm\hbar$ and 0.

KUVAA $\vec{L}$:N PROJEKTIOTA L_z Z-AKSELILLE.

EI DYNAAMISTA PREKESSIOTA (EI AIKARIIPPUVUUTTA)



SIIS: JOS $\ell \neq 0 \Rightarrow$ KAIKILLA KOMPONENTEILLA EI VOI OLLA YHTEISTÄ OMINAISFUNKTIOTA. ITSEASIASSA VAIN YKSI VOI OLLA TÄSMÄLLISESTI MÄÄRÄTTY KERRALLAAN; KONVENTIONAALISESTI TÄMÄ VALITAAN L_z.
SIIS $\vec{L}$:N PITUUS ON $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$, MUTTA VAIN L_z TUNNETTU $\hbar m \leq \hbar\ell \Rightarrow$ "KULMA" Z-AKSELIN KANSSA (MUTTA FYSIKAALISESTI HYÖDYTÖN) HYÖDYLLISTÄ PITÄYTYÄ KVANTTILUKUIHIN ℓ JA m!

SEPAROITUVA TULOMUOTOINEN $R(r)\,Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ SCHRÖDINGERIN YHTÄLÖN RATKAISU ON SEURAUS POTENTIAALIN $V(r)$ KIERTOSYMMETRIASTA. TÄMÄ SYMMETRIA EI AINA VOIMASSA (SÄHKÖINEN TAI MAGNEETTINEN DIPOLI–DIPOLI, YDINVV, ULKOINEN SM KENTTÄ, GRAVITAATIO LABORATORIOSSA ...), MUTTA PALLOFUNKTIOT VOIVAT OLLA HYÖDYLLISIÄ APPROKSIMAATIOIDEN LÄHTÖKOHTANA TAI KANTAFUNKTIOINA KEHITELMÄSSÄ $\sum_{\ell m} a_{\ell m} Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ MISSÄ VAKIOT $a_{\ell m}$ JÄÄVÄT MÄÄRÄTTÄVIKSI.

ESIMERKKI: r TÄYSIN MÄÄRÄTTY (ESIM. KIINTEÄ PYÖRIJÄ TAI HIUKKANEN PALLOKUORELLA)

LIIKE- (PYÖRIMIS-) ENERGIASTA S-YHTÄLÖ

$$\frac{\vec{L}^2}{2\mu R^2}\Psi = \frac{\vec{L}^2}{2I_0}\Psi = E\Psi \quad \stackrel{\text{OLTAVA}}{\Rightarrow} \quad \Psi_{\ell m} = Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

HITAUSMOMENTTI

(ITSEASIASSA LIN. KOMB. ERI m:STÄKIN KÄY) BM?

$$\Rightarrow E_\ell = \frac{\hbar^2}{2I_0}\ell(\ell+1)$$ ENERGIA KVANTITTUNUT

$$m = \underbrace{-\ell, -\ell+1, \ldots, \ell-1, \ell}_{2\ell+1 \text{ KPL}} \Rightarrow$$ $2\ell+1$ TILAA JOILLA TÄMÄ ENERGIA $\Rightarrow$ $(2\ell+1)$-KERT. DEGENERAATIO

ODOTETTAVISSA VASTAAVA DEGENERAATIO YLEISEMMÄLLEKIN PALLOSYMMETRISELLE POTENTIAALILLE (MUIST: SYMMETRIA $\Leftrightarrow$ DEGENERAATIO)

5.5. INVERSIOINVARIANSSI JA PARITEETTI

EDELLÄ KÄSITELTY POTENTIAALI KIERTOINVARIANTTI, (MUUTTUMATON KIERROISSA $\theta \to \theta'$, $\varphi \to \varphi'$).

SE ON MYÖS INVARIANTTI <u>INVERSIOSSA</u>
$\vec{r} \to -\vec{r}$ (ELI $x \to -x$, $y \to -y$, $z \to -z$)

INVERSIOINVARIANTTEJA POTENTIAALEJA ON KOHDATTU AIEMMINKIN 1-ULOTTEISENA: LAATIKKO $(-a/2, a/2)$ JA HARM. OSK.

SILLOIN NÄHTIIN, ETTÄ AALTOFUNKTIOILLA OLI **TÄSMÄLLINEN PARITEETTI** $\psi(-x) = \pm\psi(x)$ **KULLAKIN ENERGIALLA.** TÄMÄ PÄTEE YLEISEMMINKIN: NIMITTÄIN S-YHTÄLÖ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

PÄTEE KAIKILLA $\vec{r}$; SIIS MYÖS KUN $\vec{r} \to -\vec{r}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\underset{\substack{\uparrow\\ \text{PARILLINEN}}}{\nabla^2}\psi(-\vec{r}) + V(-\vec{r})\psi(-\vec{r}) = E\psi(-\vec{r})$$

JOS NYT $V(-\vec{r}) = V(\vec{r})$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(-\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(-\vec{r}) = E\psi(-\vec{r})$$

SIIS $\psi(-\vec{r})$ (FUNKTIONA) TOTEUTTAA SAMAN S-YHTÄLÖN KUIN $\psi(\vec{r})$ SAMALLA ENERGIALLA $\Rightarrow \psi(-\vec{r}) = \pm\psi(\vec{r})$
JOS ENERGIA EI DEGENER.

(OIK. VOISI OLLA JOKU VAKIO $\psi(-\vec{r}) = A\psi(\vec{r})$, MUTTA KAHTEEN KERTAAN TEHTYNÄ $\psi(\vec{r}) = A^2\psi(\vec{r})$ JA $A = \pm 1$)

<u>PALLOFUNKTIOILLA HYVÄ PARITEETTI $(-)^{\ell}$</u>

INVERSIOSSA: $\begin{cases} \theta \to \pi - \theta \\ \varphi \to \varphi + \pi \end{cases}$

$$Y_{\ell m}(\pi-\theta, \varphi+\pi) = N_{\ell m}\underbrace{P_\ell^{|m|}(\overbrace{\cos(\pi-\theta)}^{-\cos\theta})}_{(-)^{\ell-|m|}P_\ell^{|m|}(\cos\theta)}\underbrace{e^{im(\varphi+\pi)}}_{(-)^m e^{im\varphi}}$$

m:STÄ RIIPPUMATTA!

$$= N_{\ell m}(-)^{\ell}P_\ell^{|m|}(\cos\theta)e^{im\varphi} = (-)^{\ell}\,Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

SIIS JOS PALLOSYMMETRISESSÄ POTENTIAALISSA HYVÄÄ ℓ:N ARVOA VASTAAVA AALTOFKT KÄYTÖSSÄ (EI-DEGEN. SIDOTULLE TILALLE YKSIKÄSITTEINEN; m-DEGENERAATIO SALLITTU) $\Rightarrow \psi$ HYVÄ PARITEETTI $\boxed{\pm 1}$

ESIMERKKI: Y_{21}:N PARITEETTI

$$Y_{21}(\pi-\theta, \varphi+\pi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\underbrace{\sin(\pi-\theta)}_{\sin\theta}\underbrace{\cos(\pi-\theta)}_{-\cos\theta}\underbrace{e^{i(\varphi+\pi)}}_{-e^{i\varphi}}$$

$$= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{i\varphi} = Y_{21}(\theta,\varphi)$$

PITÄÄ OLLA: $(-)^2 = +$ OK.

5.6. RADIAALINEN AALTOFUNKTIO

KULMARIIPPUVUUS RATKESI (KESKEISVOIMALLE) RIIPPUMATTA POTENTIAALIN TARKASTA MUODOSTA (KIERTOSYMMETRIA TARPEEKSI). MUUTTUJIEN SEPAROINTI ANTOI MYÖS r-RIIPPUVUUDELLE YHTÄLÖN, RADIAALISEN SCHR. YHTÄLÖN

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)}_{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR)} + \underbrace{\left[V(r)+\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}l(l+1)\right]}_{\text{VRT. } V_{eff}} R(r) = E R(r)$$

KERTOMALLA $\frac{1}{r}$ POIS $\Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2(rR)}{dr^2} + \left[V(r)+\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}l(l+1)\right](rR) = E(rR)$$

USEIN MERKITÄÄN $R(r)=\frac{u(r)}{r}$ ELI $u(r)=rR(r)$

SAMANLAINEN YHTÄLÖ KUIN YKSIUL. TAPAUKSESSA $\Psi(x)$ (TIETYSTI MÄÄRITELTY VAIN $r>0$) $\Rightarrow$ EI PARITEETTIMUUNNOSTA $r\to -r$. PARITEETTI PALLOFUNKTIOISSA.

KULLEKIN $V_{eff}=V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$ VOI OLLA JOUKKO RATKAISUJA $R_{nl}(r)$ JA E_{nl}. STATIONAARINEN KOKONAISRATKAISU

$$\underbrace{\Psi_{nlm}}_{\text{KOLME KVANTTILUKUA}}(\vec{r},t) = R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\phi)\,e^{-iE_{nl}t/\hbar}$$

ENERGIAN, $\vec{L}^2$:N JA L_z:N OMINAISTILA | TARKAT

(JOS EI-DEGEN., MYÖS PARITEETIN)

UUSI RADIAALINEN KVANTTILUKU n YHTEYDESSÄ (KUTEN 1-ULOTT.) NOLLAKOHTIEN LUKUMÄÄRÄÄN. (SIDOTUILLA TILOILLA, JOS NIITÄ ON; "VAPAILLA" TILOILLA E MIELIVALTAINEN JATKUMOSSA $(>V(\infty))$

HUOM: E_{nl} OMINAISARVO EI RIIPU m:STÄ, (JOKA PUOLESTAAN RIIPPUU z-AKSELIN SUUNNISTUKSESTA; V SIITÄ RIIPPUMATON)

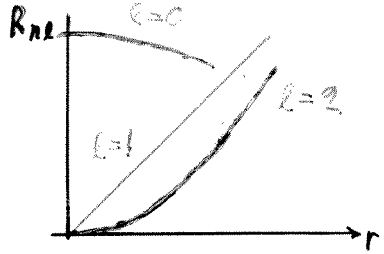
TARKASTELLAAN KÄYTTÄYTYMISTÄ ORIGON YMPÄRILLÄ OLETTAEN, ETTÄ $V(r)$ VÄHEMMÄN SINGULAARINEN KUIN $1/r^2$. SILLOIN PIENILLÄ $r\to 0$ KESKIPAKO-OSA DOMINOI JA

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2(rR)}{dr^2} \approx \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\,rR$$

$$\frac{d^2(rR)}{dr^2} = \frac{l(l+1)}{r^2}(rR) \Longrightarrow rR = C r^{l+1} \quad (\text{TAI } C' r^{-l})$$

ELI $R(r)=Cr^{l}$ (TAI $C' r^{-l-1}$)

HYVÄKSYTÄÄN VAIN SÄÄNNÖLLINEN RATK.



$\Rightarrow$ KVALITATIIVINEN VARSIN YLEINEN KÄYTTÄYTYMINEN LÄHELLÄ ORIGOA.

TAAS AALTOFUNKTION NELIÖ TODENNÄKÖISYYS-TIHEYS. INTEGRAALEISSA TILAVUUSALKIO

$$d\tau = r^2 dr \underbrace{\sin\theta\, d\theta\, d\varphi}_{d\Omega}$$

$d\Omega$ AVARUUSKULMA-ALKIO

NORMITUS $\Rightarrow \underbrace{\int d\tau}_{\text{KOKO AV.}} |\Psi(r,\theta,\varphi)|^2 = 1$

"KOKO AVARUUS" NYT $\int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$

MYÖS INTEGRAALIT VOIVAT SEPAROITUA

$$\rightarrow \int_0^\infty |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr \underbrace{\int d\Omega\, |Y_{\ell m}(\theta,\varphi)|^2}_{1}$$

$\Rightarrow$ RADIAALIFUNKTION NORMITUSEHTO

$$\int_0^\infty |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr = 1$$

HALUTTAESSA VOIDAAN MÄÄRITELLÄ "RADIAALINEN TODENNÄKÖISYYSTIHEYS" $P_{n\ell}(r) = r^2 |R_{n\ell}(r)|^2$, MISSÄ TILAVUUSELEMENTIN r^2 SISÄLLYTETTY (JOSKUS JOPA $4\pi r^2 |R_{n\ell}(r)|^2$ MISSÄ KOKO AVARUUSKULMA SISÄLLYTETTY), MUTTA KÄSITTEEN KANSSA SYYTÄ OLLA **VAROVAINEN**

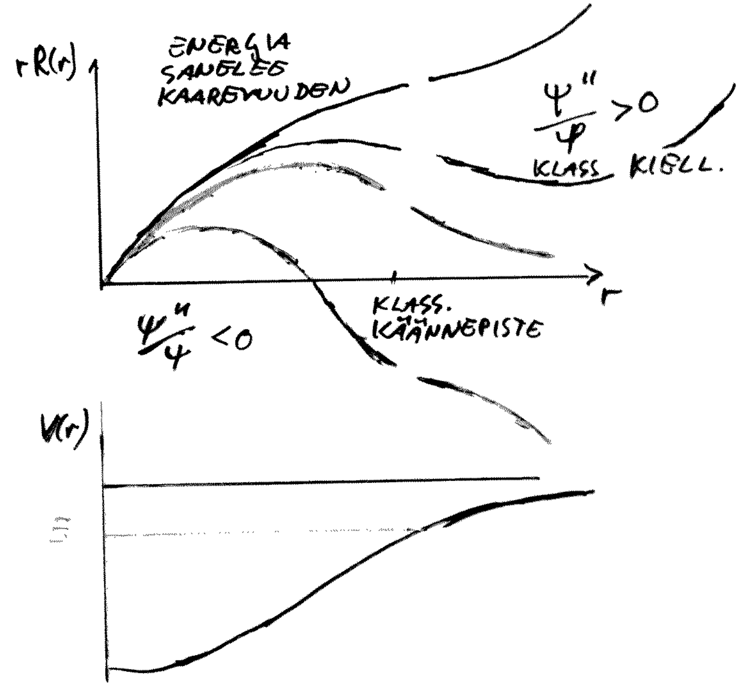
HUOM: ERI n:IT $\Rightarrow$ $R_{n\ell}$ JA $R_{n'\ell}$ ORTOGONAALISET

$$\int_0^\infty R^*_{n\ell}(r) R_{n'\ell}(r)\, r^2 dr = \delta_{nn'}$$

SAMAAN TAPAAN KUIN 1-ULOTTEISESSA TAPAUKSESSA SIDOTUN TILAN REUNAEHDOISTA SEURAA ENERGIAN KVANTITTUMINEN:

ORIGOSSA SÄÄNNÖLLINEN AALTOFKT KUIN

$r R_\ell(r) = C r^{\ell+1}$ (C SÄÄTÄÄ NORMITUKSEN)



FYSIKAALISTEN SUUREIDEN ODOTUSARVOJA LASKETAAN KUIN ENNEN

$$\int \psi^* \underset{\leftarrow \text{OBSERVAABELI}}{Q} \psi \, d\tau$$

ESIM: $\langle r \rangle = \int \psi^*_{n\ell m} \, r \, \psi_{n\ell m} \, d\tau$

$$= \int_0^\infty r^2 dr \int d\Omega \; r \, |R_{n\ell}(r)|^2 \, |Y_{\ell m}(\theta,\varphi)|^2$$

$$= \int_0^\infty r^3 |R_{n\ell}(r)|^2 dr$$

SAMOIN MIELIVALTAINEN r:N FUNKTIO

EI-STATIONAARINEN TAPAUS EI KUMMEMPI, MUTTA YLEENSÄ ODOTUSARVO RIIPPUU AJASTA (JOS OBSERVAABELIN MUUTUJAA VOIVAT VASTATA ERI AALTOFUNKTIOT ERI ENERGIOILLA ERI PUOLILLA)

KULMAMUUTTUJILLA TÄRKEIMMÄT OBSERVAABELIT $\vec{L}^2$ JA L_z:

$$\langle \vec{L}^2 \rangle = \int \psi^*_{n\ell m} \underbrace{\vec{L}^2 \psi_{n\ell m}}_{\hbar^2 \ell(\ell+1)\psi_{n\ell m}} d\tau = \hbar^2 \ell(\ell+1)$$

JOS ψ SUPERPOSITIO ERI $Y_{\ell m}$:STÄ, ESIM.

$$\psi(\vec{r}) = a R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\hat{r}) + b R_{n'\ell'}(r) Y_{\ell' m}(\hat{r})$$

$$\Rightarrow \langle \vec{L}^2 \rangle = \int (a^* R^*_{n\ell} Y^*_{\ell m} + b^* R^*_{n'\ell'} Y^*_{\ell' m}) \vec{L}^2 (a R_{n\ell} Y_{\ell m} + b R_{n'\ell'} Y_{\ell' m})$$

$$= \hbar^2 \int (a^* R^*_{n\ell} Y^*_{\ell m} + b^* R^*_{n'\ell'} Y^*_{\ell' m}) \left[\ell(\ell+1) a R_{n\ell} Y_{\ell m} + \ell'(\ell'+1) b R_{n'\ell'} Y_{\ell' m} \right]$$

$$= |a|^2 \hbar^2 \ell(\ell+1) + |b|^2 \hbar^2 \ell'(\ell'+1) + 0$$

OLTAVA TULKINTANA a, b $\vec{L}^2$:N VASTAAVIEN ARVOJEN TN-AMPLITUDI JA $|a|^2$ SEKÄ $|b|^2$ ℓ:N JA ℓ':N TODENNÄKÖISYYDET. (VRT. LUENTO-ESIM.)

VASTAAVASTI L_z:LLE ERI m:N ARVOJEN SUPERPOSITIOT

NORMITUS

<u>ESIMERKKI</u>: $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{111} + \psi_{11-1}) = \frac{1}{\sqrt{2}} R_{11} (Y_{11} + Y_{1-1})$.

LASKE $\langle L_z \rangle$ JA L_z:N EPÄMÄÄRÄISYYS

$$\left[\langle L_z^2 \rangle - \langle L_z \rangle^2 \right]^{1/2} = \Delta L_z$$

$$\int \psi^* L_z \psi \, d\tau = \frac{1}{2} \int (\psi^*_{111} + \psi^*_{11-1}) \underbrace{L_z (\psi_{111} + \psi_{11-1})}_{(\hbar \psi_{111} - \hbar \psi_{11-1})} d\tau$$

$$= \frac{1}{2}\hbar - \frac{1}{2}\hbar + 0 = 0 \quad \text{(TIETYSTI)}$$

RISTITERMIT $\to 0$ (ORTOG.)

VAIN NORMITUSINTEGRAALEJA

$$\int \psi^* L_z^2 \psi \, d\tau = \frac{1}{2} \int (\psi^*_{111} + \psi^*_{11-1}) \underbrace{L_z^2 (\psi_{111} + \psi_{11-1})}_{\hbar^2 (\psi_{111} + \psi_{11-1})} d\tau$$

$$= \frac{1}{2}\hbar^2 + \frac{1}{2}\hbar^2 + 0 = \hbar^2$$

$\therefore \; \Delta L_z = \hbar$

$\vec{L}^2$:N ARVO AINA $\hbar^2 \, 1(1+1) = 2\hbar^2$