

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \Psi = E \Psi \quad ; \quad \Psi_{(r,\theta,\varphi)} = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi) \quad \frac{1}{\text{انبار}}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r}) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \Psi = E \Psi$$

با تقسیم در طرف بر Ψ ، جدا سازی متغیرها، به دو معادله مستقل در r و θ می‌رسیم. در هر دو طرف، با بارها، ثابت $l(l+1)$ می‌آید. معادله شعاعی عبارت خواهد بود از:

$$-\frac{\hbar^2}{2m R(r)} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r}) + \frac{m \omega^2 r^4}{2} - E r^2 = -l(l+1) \frac{\hbar^2}{2m}$$

معادله زاویه‌ای:

$$\frac{\hbar^2}{2m \Theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta}) + l(l+1) \sin^2 \theta + \frac{\hbar^2}{2m \Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = 0$$

$$R(r) = u(r)/r, \quad k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, \quad \alpha = \frac{m\omega^2}{\hbar k^2}, \quad \rho = kr \quad \underline{ج}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{d\rho^2} + \frac{\alpha \hbar \rho^2}{2k^2} u + \frac{\hbar^2}{2m} u + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m \rho^2} u = 0$$

$$\rho \rightarrow \infty \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{d\rho^2} + \frac{\alpha \hbar \rho^2}{2k^2} u = 0 \quad \underline{د}$$

$$\Rightarrow u_{\infty}(\rho) \propto \exp \left[-\sqrt{\frac{\alpha m}{4\hbar k^2}} \rho^2 \right]$$

$$\rho \rightarrow 0 \Rightarrow u_0(\rho) \propto \rho^{l+1} \quad \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{d\rho^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m \rho^2} u = 0$$

$$u(\rho) = V(\rho) \exp\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\alpha m}{\hbar^2}} \rho^2\right] \rho^{-(l+1)} \quad (5)$$

$$\Rightarrow \rho \frac{d^2 V}{d\rho^2} + 2(l+1 - \alpha \rho^2) \frac{dV}{d\rho} + \rho(1 - \alpha(2l+3))V = 0$$

با نوشتن $\frac{dU}{d\rho}$ ، $\frac{d^2 U}{d\rho^2}$ ، استفاده از معادله شرودینگر در صورتی که V به معادله دیراک اصل با U می‌رسیم.

$$V(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n \Rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n-1)n \rho^{n-1} + 2(l+1)a_n \rho^{n-1} \quad (6)$$

$$-2\alpha a_n \rho^{n+1} + (1 - \alpha(2l+3))a_n \rho^{n+1} = 0$$

$$\Rightarrow a_{n+2} = \frac{\alpha(2n+2l+3) - 1}{(n+2)(n+2l+3)} a_n$$

از رابطه‌ی شکست به دست می‌آید که $a_1 = 0$ است بنابراین طبق رابطه‌ی بازگشتی $a_{2k+1} = 0$ برای k هر عدد صحیحی خواهد بود.

توجه شود که تابع $V(\rho)$ در $n \rightarrow \infty$ دارای نوسان می‌شود بنابراین جواب صحیح باید در n این

صفر جوابی بریده شود. بنابراین بازگشتی $a_{\tilde{n}} \neq 0$ ، $a_{\tilde{n}+2} = 0$ در رابطه‌ی V ارزیابی می‌شود.

می‌توان به دست آورد

$$\alpha = \frac{1}{2\tilde{n}+2l+3} \Rightarrow E_{\tilde{n}l} = (\tilde{n}+l+\frac{3}{2})\hbar\omega$$

بازگشت دادن $n = \tilde{n} + l = 0, 1, 2, \dots$ داریم

$$E_n = (n + \frac{3}{2})\hbar\omega$$

$$xy'' + (m+1-x)y' + ny = 0 \rightarrow L_n^{(m)}(x)$$

1 2

$$\int_0^{\infty} x^m e^{-x} L_{n_1}^{(m)}(x) L_{n_2}^{(m)}(x) dx = \frac{\Gamma(n_1+m+1)}{n_1!} \delta_{n_1, n_2}$$

1

$e^{-x} x^m$: تابع وزن

$$L_n^{(m)}(x) = \frac{1}{n!} x^{-m} e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^{n+m} e^{-x})$$

3

$$n L_n^{(m)}(x) = (n+m) L_{n-1}^{(m)}(x) - x L_{n-1}^{(m+1)}(x)$$

4

$$\frac{d L_n^{(m)}(x)}{dx} = - L_{n-1}^{(m+1)}(x) = \frac{1}{x} \left[n L_n^{(m)}(x) - \frac{m+n}{x} L_{n-1}^{(m)}(x) \right]$$

5

$$[P_1, P_2] = P_1 P_2 - P_2 P_1$$

$$P_1 P_2 = \frac{1}{2} \left[P_x^2 + \frac{\hbar}{a^2} P_x y + \frac{\hbar}{a^2} y P_x + \frac{\hbar^2}{a^4} y^2 \right]$$

$$P_2 P_1 = \frac{1}{2} \left[P_x^2 + \frac{\hbar}{a^2} y P_x - \frac{\hbar}{a^2} P_x y - \frac{\hbar^2}{a^4} y^2 \right]$$

$$[P_x, y] = 0 \Rightarrow [P_1, P_2] = 0$$

$$[u, P_y] = 0 \Rightarrow [q_1, q_2] = 0 \quad \text{: فرم دانه}$$

$$[q_1, P_1] = \frac{1}{2} \left[x P_x - \frac{\hbar n y}{a^2} - \frac{a^2}{\hbar} P_y P_x - P_y y \right]$$

$$- \frac{1}{2} \left[P_x x - \frac{\hbar x y}{a^2} + \frac{a^2}{\hbar} P_x P_y - y P_y \right] = \frac{1}{2} ([x, P_x] + [y, P_y]) = i\hbar$$

$$[q_2, P_2] = \frac{1}{2} [u, P_x] + \frac{1}{2} [y, P_y] = i\hbar$$

$$q_1^2 - q_2^2 = \frac{1}{2} \left[\left(x^2 + \frac{a^2}{\hbar} 2x P_y + \frac{a^4}{\hbar^2} P_y^2 \right) - \left(n^2 + \frac{a^4}{\hbar^2} P_y^2 - \frac{a^2}{\hbar} 2n P_y \right) \right]$$

$$= \frac{a^2}{\hbar} 2x P_y$$

$$P_1^2 - P_2^2 = - \frac{\hbar}{a^2} 2y P_n \Rightarrow L_z = \frac{\hbar}{2a^2} (q_1^2 - q_2^2) + \frac{a^2}{2\hbar} (P_1^2 - P_2^2)$$

$$= n P_y - y P_n$$

$$L_z = \left(\frac{1}{2} m q_1^2 + \frac{P_1^2}{2m} \right) - \left(\frac{1}{2} m q_2^2 + \frac{P_2^2}{2m} \right) = H_1 - H_2$$

$$m = \hbar / a^2, \omega = 1$$

$$L_z |\psi\rangle = (H_1 - H_2) |\psi\rangle = \left[(n_1 + \frac{1}{2}) - (n_2 + \frac{1}{2}) \right] |\psi\rangle$$

$$= (n_1 - n_2) |\psi\rangle$$

مقدار عددی

ب

ج

د

$$H(\alpha) U_n(r, \alpha) = E(\alpha) U_n(r, \alpha), \quad \int d^3r U_n^*(r, \alpha) U_n(r, \alpha) = 1$$

$$\Rightarrow E(\alpha) = \int d^3r U_n^*(r, \alpha) H(\alpha) U_n(r, \alpha)$$

$$\frac{\partial E(\alpha)}{\partial \alpha} = \int d^3r \frac{\partial U_n^*(r, \alpha)}{\partial \alpha} H(\alpha) U_n(r, \alpha) + \int d^3r U_n^*(r, \alpha) H(\alpha) \frac{\partial U_n(r, \alpha)}{\partial \alpha} + \int d^3r U_n^*(r, \alpha) \frac{\partial H(\alpha)}{\partial \alpha} U_n(r, \alpha)$$

$$E(\alpha) \left[\int d^3r \frac{\partial U_n^*(r, \alpha)}{\partial \alpha} U_n(r, \alpha) + \int d^3r U_n^*(r, \alpha) \frac{\partial U_n(r, \alpha)}{\partial \alpha} \right] = 0$$

$$= E(\alpha) \frac{\partial}{\partial \alpha} \underbrace{\int d^3r U_n^*(r, \alpha) U_n(r, \alpha)}_1 = 0$$

در عملی اول عبارت انداز:

$$\Rightarrow \frac{\partial E(\alpha)}{\partial \alpha} = \int d^3r U_n^*(r, \alpha) \frac{\partial H(\alpha)}{\partial \alpha} U_n(r, \alpha) = \left\langle \frac{\partial H(\alpha)}{\partial \alpha} \right\rangle$$

در حالتی اتم هیدروژن، $-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{\hbar c \alpha}{r}$ ظهور می‌کند و درجه مدار

انرژی هم برابر است با $E_{nl} = \frac{1}{2} m c^2 \alpha^2 \frac{1}{n^2}$ اگر α را به خود α در نظر بگیریم، خواهیم داشت:

$$-\hbar c \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} = \frac{\partial}{\partial \alpha} E_{nl} = -\frac{m c^2 \alpha}{n^2} \Rightarrow \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} = \frac{m c \alpha}{\hbar n^2} = \frac{1}{a_0 n^2}$$

در حالتی شعاعی، عبارت $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$ وجود دارد. اگر از l به عنوان پارامتر مورد نظرمان

استفاده کنیم خواهیم داشت:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \frac{2l+1}{r^2} \right\rangle = \frac{1}{2} m c^2 \alpha^2 \frac{2}{n^3}$$

$$\Rightarrow \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} = \frac{1}{a_0^2 n^3 (l+1/2)}$$

$$R_{10}(r) = 2a_0^{-3/2} e^{-r/a_0} \Rightarrow P_{10}(r) = r^2 |R_{10}(r)|^2 = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0}$$

$$P_{10}'(r) : \frac{dP_{10}(r)}{dr} \Big|_{r=r_1} = 0 \Rightarrow 2r_1 - \frac{2r_1^2}{a_0} = 0 \Rightarrow \underline{r_1 = a_0}$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{(2\sqrt{6} a_0^{5/2})} r e^{-r/2a_0} \Rightarrow P_{21}(r) = \frac{1}{24 a_0^5} r^4 e^{-r/a_0}$$

$$\frac{dP_{21}(r)}{dr} \Big|_{r=r_2} = 0 \Rightarrow 4r_2^3 - \frac{r_2^4}{a_0} = 0 \Rightarrow \underline{r_2 = 4a_0}$$

$$R_{n,(n-1)}(r) = A_n r^{n-1} e^{-r/na_0} \Rightarrow P_{n,(n-1)}(r) = A_n^2 r^{2n} e^{-2r/na_0}$$

$$\frac{dP_{n,(n-1)}(r)}{dr} \Big|_{r=r_n} = 0 \Rightarrow 2nr_n^{2n-1} - \frac{2r_n^{2n}}{na_0} = 0 \Rightarrow \underline{r_n = a_0 n^2}$$

عبارت‌های مشابه در بالا در اینجا شش می‌باشد $r_n = a_0 n^2$