ΚΕΝΤΡΙΚΑ ΔΥΝΑΜΙΚΑ

Ο τελεστής Hamilton για ένα σωμάτιο που κινείται μέσα σ' ένα κεντρικό δυναμικό V(r) είναι:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{(r)} \qquad (1)$$

Η λαπλασιανή σε σφαιρικές συντεταγμένες είναι:

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

Οπότε η **(1)** λόγω της **(2)** δίνει:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hbar^2}{2mr^2}\left[\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] + V_{(r)} \qquad (3)$$

Αλλά ο τελεστής του τετραγώνου του μέτρου της στροφορμής είναι:

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

οπότε η **(3)** γράφεται:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V_{(r)} \qquad (4)$$

Στην παραπάνω εξίσωση ο όρος $\frac{\hat{L}^2}{2mr^2} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$ ονομάζεται **φυγοκεντρικό δυναμικό** και αντιπροσωπεύει την περιστροφική κινητική ενέργεια του σωματιδίου για δεδομένη τιμή του κβαντικού αριθμού l της στροφορμής του , ο όρος $V(r)$ **πραγματικό δυναμικό**, ενώ $V_{eff(r)} = \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V_{(r)}$ ονομάζεται **ενεργό δυναμικό.**

Επειδή ο τελεστής Hamilton για κεντρικό δυναμικό V(r) αντιμετατίθεται με τους τελεστές $\hat{L}_z$ και $\hat{L}^2$ δηλαδή $\left[\hat{H},\hat{L}_z\right]=\left[\hat{H},\hat{L}^2\right]=0$ οι τελεστές $\hat{H}$, $\hat{L}_z$ και $\hat{L}^2$ έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις $\Psi_{(r,\theta,\varphi)}$ οι οποίες θα ικανοποιούν τις εξισώσεις ιδιοτιμών των τελεστών:

$$\hat{H}\Psi=E\Psi,\qquad \hat{L}^2\Psi=l(l+1)\hbar^2\Psi\quad και\quad \hat{L}_z\Psi=m\hbar\Psi$$

Χωρίζοντας τις ιδιοσυναρτήσεις $\Psi_{(r,\theta,\varphi)}$ σε έναν ακτινικό όρο $R_{(r)}$ και το γωνιακό όρο $Y^m_{l(\theta,\varphi)}$ των σφαιρικών αρμονικών, δηλαδή για $\Psi_{(r,\theta,\varphi)}=R_{(r)}Y^m_{l(\theta,\varphi)}$ η εξίσωση ιδιοτιμών της Hamiltonian δίνει:

$$\hat{H}\Psi=E\Psi\Rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Psi_{(r,\theta,\varphi)}\right)+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}\Psi_{(r,\theta,\varphi)}+V_{(r)}\Psi_{(r,\theta,\varphi)}=E\Psi_{(r,\theta,\varphi)}\Rightarrow$$

$$\Rightarrow-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\left(R_{(r)}Y^m_{l(\theta,\varphi)}\right)\right)+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}\left(R_{(r)}Y^m_{l(\theta,\varphi)}\right)+V_{(r)}\left(R_{(r)}Y^m_{l(\theta,\varphi)}\right)=E\left(R_{(r)}Y^m_{l(\theta,\varphi)}\right)\qquad \textbf{(5)}$$

Αλλά επειδή ο $\hat{L}^2$ δεν εξαρτάται απ' τη μεταβλητή r παρά μόνο απ΄ τις θ, φ αφήνει αναλλοίωτη την $R_{(r)}$. Οπότε:

$$\hat{L}^2\left(R_{(r)}Y^m_{l(\theta,\varphi)}\right)=R_{(r)}\hat{L}^2Y^m_{l(\theta,\varphi)}=R_{(r)}l(l+1)\hbar^2Y^m_{l(\theta,\varphi)}$$

και η **(5)** δίνει:

$$Y^m_{l(\theta,\varphi)}\left(-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\right)\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{(r)}}{dr}\right)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}R_{(r)}Y^m_{l(\theta,\varphi)}+V_{(r)}R_{(r)}Y^m_{l(\theta,\varphi)}=ER_{(r)}Y^m_{l(\theta,\varphi)}\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\quad-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{(r)}}{dr}\right)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}R_{(r)}+V_{(r)}R_{(r)}=ER_{(r)}\qquad \textbf{(6)}$$

Θέτοντας $y_{(r)}=rR_{(r)}$ μετασχηματίζουμε την **(6)** σε μια πιο εύχρηστη μορφή, πολλαπλασιάζοντάς τη κατά μέλη με r και λαμβάνοντας υπόψη ότι:

$$\frac{dR_{(r)}}{dr} = \frac{d}{dr}\left(\frac{y_{(r)}}{r}\right) = -\frac{y_{(r)}}{r^2} + \frac{1}{r}\frac{dy_{(r)}}{dr}$$

και

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{(r)}}{dr}\right) = \frac{d}{dr}\left(-y_{(r)} + r\frac{dy_{(r)}}{dr}\right) = -\frac{dy_{(r)}}{dr} + \frac{dy_{(r)}}{dr} + r\frac{d^2y_{(r)}}{dr^2} = r\frac{d^2y_{(r)}}{dr^2}$$

Συνεπώς η **(6)** δίνει:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2y_{(r)}}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}y_{(r)} + V_{(r)}y_{(r)} = Ey_{(r)} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{\boldsymbol{\frac{d^2y_{(r)}}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V_{(r)} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right)y_{(r)} = 0}}$$

και αποτελεί την **ακτινική εξίσωση Schrödinger.**
Δηλαδή η εξίσωση του ακτινικού μέρους ικανοποιεί μια "μονοδιάστατη" εξίσωση Schrödinger υπό ενεργό δυναμικό $V_{eff(r)}$.

Συγγραφή – Επιμέλεια: Παναγιώτης Φ. Μοίρας