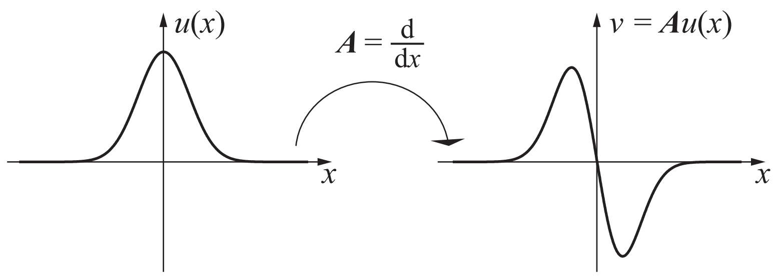
Några utvalda lösningar till

Kvantvärldens fenomen
-teori och begrepp



Del 2: Formalism och runda system

Magnus Ögren

Här följer ett urval av lösningar till några problem från del 2 av boken *Kvantvärldens fenomen - teori och begrepp, Gunnar Ohlén*, denna kan rekvireras från Studentlitteratur (ISBN 91-44-03450-4). I detta dokument *www.studentlitteratur.se/files/sites/kvantvarlden/losningsforslagdel2.pdf* refererar vi konsekvent till Gunnars bok som *läroboken*. Uppgifterna är numrerade enligt ***kapitel.uppgift***. Jag tar tacksamt emot kommentarer och påpekanden gällande innehållet (→*magnus@ogren.se*). För ett utsökt arbete med figurerna tackar jag Johnny Kvistholm. Ett stort tack för värdefulla kommentarer går till Magnus Borgh, Sara Bargi, Ragnar Bengtsson och Gunnar Ohlén vid avdelningen för Matematisk fysik i Lund.

Lund i augusti 2006

Magnus Ögren

I samråd med F-teknologerna: Aron Wahlberg, Erik Månsson och Martin Levenius har vi utvecklat materialet med ytterliggare några lösta uppgifter samt med kompletteringar till lärobokens facit.

Lund i mars 2007

Magnus Ögren

Version:2007

5.1 Vid en viss tidspunkt ges vågfunktionen av

$$\phi(x) = Nx\exp\left(-(x/a)^2\right).$$

Bestäm N så att vågfunktionen är normerad. Bestäm sedan $x\phi$, $p_x\phi$, $p_x^2\phi$ och $H\phi$. Det gäller att $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$. Beräkna även $\langle H\rangle$.

Lösning 5.1: Normerad vågfunktion betyder att

$$\int \phi^\star\phi dx = N^2\int_{-\infty}^{\infty} x^2\exp\left(-2(x/a)^2\right)dx = 1$$

Utnyttja (partialintegrera som nedan eller titta i formelsamlingen) att

$$\int_{-\infty}^{\infty} xxe^{-2(x/a)^2}dx = \underbrace{\left[x(-)\frac{a^2}{4}e^{-2(x/a)^2}\right]_{-\infty}^{\infty}}_{0} +$$

$$+\frac{a^2}{4}\int_{-\infty}^{\infty} 1e^{-2(x/a)^2}dx = \frac{a^2}{4}a\sqrt{\frac{\pi}{2}}.$$

Alltså måste gälla att

$$N = \sqrt{\frac{4\sqrt{2}}{a^3\sqrt{\pi}}} = \frac{2^{5/4}}{a^{3/2}\pi^{1/4}}. \tag{1}$$

Beräkning av $p_x\phi$

$$p_x\phi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi = -i\hbar N\left(\exp\left(-(x/a)^2\right) - x\frac{2x}{a^2}\exp\left(-(x/a)^2\right)\right) =$$

$$= i\hbar N\left(\frac{2x^2}{a^2}-1\right)\exp\left(-(x/a)^2\right).$$

Beräkning av $p_x^2\phi$ (med hjälp av ovanstående beräkning)

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\phi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(i\hbar N\left(\frac{2x^2}{a^2}-1\right)\exp(-(x/a)^2)\right) =$$

$$= \hbar^2 N\left(\frac{4x}{a^2} - \left(\frac{2x^2}{a^2}-1\right)\frac{2x}{a^2}\right)\exp\left(-(x/a)^2\right) =$$

$$= \hbar^2 N\frac{2x}{a^2}\left(3-\frac{2x^2}{a^2}\right)\exp\left(-(x/a)^2\right).$$

Beräkning av $\langle H\rangle$

$$\langle H\rangle = \langle H_{kin}\rangle + \langle H_{pot}\rangle = \frac{\langle p_x^2\rangle}{2m} + \frac{1}{2}k\left\langle x^2\right\rangle.$$

Vi börjar med att räkna ut $\left\langle p_x^2\right\rangle$ (med hjälp av beräkningen ovan för $p_x^2\phi$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^\star p_x^2 \phi dx = \int_{-\infty}^{\infty} Nx\hbar^2 N\frac{2x}{a^2}\left(3-\frac{2x^2}{a^2}\right)\exp\left(-2\left(x/a\right)^2\right)dx =$$

$$= N^2\hbar^2\frac{6}{a^2}2\left(\int_0^{\infty} x^2\exp\left(-2\left(x/a\right)^2\right)dx - \frac{2}{3a^2}\int_0^{\infty} x^4\exp\left(-2\left(x/a\right)^2\right)dx\right),$$

använd nu din formelsamling för de två integralerna

$$= N^2\hbar^2\frac{12}{a^2}\left(\frac{a^3}{8}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\right) - N^2\hbar^2\frac{8}{a^4}\left(\frac{3a^5}{32}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\right) = \frac{3}{4}N^2\hbar^2\sqrt{\frac{\pi}{2}}a.$$

Sätter vi nu in uttrycket för N från ekvation (1) samt dividerar med $2m$ får vi väntevärdet för den kinetiska energin

$$\langle H_{kin}\rangle = \frac{3}{4}\left(\frac{4\sqrt{2}}{a^3\sqrt{\pi}}\right)\hbar^2\sqrt{\frac{\pi}{2}}a/\left(2m\right) = \frac{3\hbar^2}{2ma^2}.$$

Låt oss nu räkna ut $\left\langle x^2\right\rangle$

$$\int_{-\infty}^{\infty} Nx\exp\left(-\left(x/a\right)^2\right)x^2 Nx\exp\left(-\left(x/a\right)^2\right)dx =$$

$$= N^2\, 2\int_0^{\infty} x^4\exp\left(-2\left(x/a\right)^2\right)dx,$$

nu använder vi formelsamlingen för integralen, sätter in N från ekvation (1) samt multiplicerar med $\frac{1}{2}k$ för att få väntevärdet för den potentiella energin

$$\langle H_{pot}\rangle = \frac{1}{2}k\left(\frac{4\sqrt{2}}{a^3\sqrt{\pi}}\right)2\left(\frac{3\sqrt{\pi}a^5}{32\sqrt{2}}\right) = \frac{3}{8}ka^2.$$

Energin är summan av kinetiska och potentiella energierna

$$E = \langle H\rangle = E_{kin} + E_{pot} = \langle H_{kin}\rangle + \langle H_{pot}\rangle = \frac{3\hbar^2}{2ma^2} + \frac{3}{8}ka^2.$$

Kommentar: Den intresserade läsaren kan sätta in $k = m\omega^2$, $a = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}$, förenkla och förklara resultatet!

5.3 En operator definieras enligt $A = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$ med definitionsmängd

$$D = \{u(x)\,|0 < x < a,\; u(0) = u(a) = 0\}$$

Visa att denna operator är Hermitesk. En operator är positiv om $\langle A \rangle > 0$. Visa att denna operator är positiv samt beräkna dess egenvärden.

Lösning 5.3: Vi vill visa att $\langle u|Av\rangle = \langle Au|v\rangle$ dvs $\int_0^a u^\star(x)\,(-)\,\frac{d^2}{dx^2}v(x)dx = \int_0^a -\frac{d^2}{dx^2}u^\star(x)v(x)dx$. Låt oss partialintegrera vänsterledet (V.L.)

$$V.L. = \left[u^\star(x) - \frac{d}{dx}v(x)\right]_0^a - \int_0^a \frac{d}{dx}u^\star(x) - \frac{d}{dx}v(x)dx =$$

$$= 0 + \int_0^a \frac{d}{dx}u^\star(x)\frac{d}{dx}v(x)dx, \tag{2}$$

där randtermen försvinner pga randvillkoren. Vi fortsätter att partialintegrera en gång till

$$V.L. = \int_0^a \frac{d}{dx}u^\star(x)\frac{d}{dx}v(x)dx = \left[\frac{d}{dx}u^\star(x)v(x)\right]_0^a - \int_0^a \frac{d^2}{dx^2}u^\star(x)v(x)dx =$$

$$= 0 + \int_0^a -\frac{d^2}{dx^2}u^\star(x)v(x)dx = H.L..$$

Vi har således nu visat att operatorn A är Hermitesk. För att visa att operatorn är positiv sätter vi $u = v$ i ekvation (2)

$$\langle A\rangle = \langle u|Au\rangle = \int_0^a \frac{d}{dx}u^\star(x)\frac{d}{dx}u(x)dx = \int_0^a \left|\frac{d}{dx}u(x)\right|^2 dx \geq 0.$$

Likheten inträffar bara då $\frac{d}{dx}u(x) = 0$ för alla x i intervallet[1], randvillkoren ger då $u(x) \equiv 0$. Denna 'nollfunktion' är inte fysikalisk relevant och alltså har vi visat att $\langle A\rangle > 0$.

Nu vill vi beräkna operatorns egenvärden

$$Au_i = \lambda_i u_i \;\Rightarrow\; \frac{d^2}{dx^2}u_i(x) + \lambda_i u_i\,(x) = 0.$$

Denna differentialekvation bör vara bekant, den allmänna lösningen kan skrivas

$$u_i(x) = A\sin(\sqrt{\lambda_i}x) + B\cos(\sqrt{\lambda_i}x)$$

Randvillkoret $u(0) = 0$ ger att $B = 0$, det andra randvillkoret $u(a) = 0$ ger att

$$\sin(\sqrt{\lambda_i}a) = 0 \;\Rightarrow\; \sqrt{\lambda_i}a = k\pi\;,\; k = 0, 1, 2, 3... \;\Rightarrow\; \lambda_i = \frac{k^2\pi^2}{a^2}\;,\; k = 0, 1, 2, 3...$$

[1] Med tillägget för den integrationteoretiskt intresserade läsaren: 'utom på en nollmängd'.

Fallet $k=0$ ger $u(x)\equiv 0$ vilket är fysikaliskt irrelevant. Vi ser också att vi kan låta vårt index i vara k, dvs operatorns egenvärden är

$$\lambda_i = \frac{i^2\pi^2}{a^2}\ ,\ i = 1,2,3...$$

Kommentar: Hur hänger detta ihop med vad vi visade nyss ovan $\langle A\rangle > 0$?

5.7 Vågfunktionen för en partikel i en oändligt djup potentialbrunn ges vid en viss tidpunkt av $\phi(x) = Nx(a-x)$. Med vilken sannolikhet ger en energimätning ett annat värde än E_1 dvs grundtillståndets energi.

Lösning 5.7: Vi börjar med att normera vågfunktionen

$$1 = N^2\int_0^a x^2(a-x)^2dx =$$

$$= N^2\left[\frac{a^2x^3}{3}+\frac{x^5}{5}-\frac{2ax^4}{4}\right]_0^a = N^2\frac{a^5}{30}\ \Rightarrow\ N=\sqrt{\frac{30}{a^5}}. \qquad (3)$$

Vi utnyttjar nu att $\phi(x)$ kan skrivas som en (ev. oändlig) summa av egenfunktioner (t.ex.) till Hamiltonoperatorn för denna brunn, dvs

$$\phi(x) = Nx(a-x) = \sum_{n=1}^{?} c_n\psi_n(x)\,.$$

Från uppgift **5.4**. (eller läroboken sidan 112) vet vi att egenfunktionen hörande till grundtillståndet ($n=1$) är $\psi_1(x)=\sqrt{2/a}\sin(\pi x/a)$. Utvecklingskoefficienten c_1 ges av integralen (skalärprodukten $\langle\psi_1|\phi\rangle$)

$$c_1 = N\sqrt{2/a}\int_0^a \sin(\pi x/a)\,x\,(a-x)\,dx$$

$$= N\sqrt{2a}\underbrace{\int_0^a x\sin(\pi x/a)\,dx}_{I_1} - N\sqrt{2/a}\underbrace{\int_0^a x^2\sin(\pi x/a)\,dx}_{I_2} = \frac{2^{5/2}a^{5/2}N}{\pi^3}.$$

Där de två integralerna (t.ex.) kan beräknas m.h.a. partialintegration

$$I_1 = \int_0^a x\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)dx = -\frac{a}{\pi}\left[x\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right]_0^a + \int_0^a 1\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)dx$$

$$= \frac{a^2}{\pi} + 0 - \frac{a}{\pi}\left[\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right]_0^a = \frac{a^2}{\pi},$$

$$I_2 = \int_0^a x^2 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = -\frac{a}{\pi}\left[x^2 \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right]_0^a + 2\frac{a}{\pi}\int_0^a x \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \frac{a^3}{\pi} + 2\frac{a^2}{\pi^2}\left[x \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right]_0^a - 2\frac{a^2}{\pi^2}\int_0^a 1 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = \frac{a^3}{\pi} - 4\frac{a^3}{\pi^3}.$$

Enligt Köpenhamnstolkningen är sannolikheten för att mäta energin E_n lika med $|c_n|^2$, sannolikheten för något annat värde blir alltså $1 - |c_n|^2$. D.v.s. i vårt fall $P(E \neq E_1) = 1 - \left(\frac{2^{5/2} a^{5/2} N}{\pi^3}\right)^2$ Om vi nu sätter in N enligt ekvation (3) kan vi förenkla ytterliggare

$$P(E \neq E_1) = 1 - \left(\frac{2^{5/2} a^{5/2} \sqrt{\frac{30}{a^5}}}{\pi^3}\right)^2 = 1 - \frac{960}{\pi^6} \approx 0.0014.$$

Kommentar: Det är alltså mycket liten chans att vi inte får resultatet E_1 vid en energimätning, detta borde bero på att vågfunktionen $\phi(x)$ är 'mycket lik' den första egenfunktionen ψ_1, detta bekräftas om man ritar de båda funktionerna och/eller jämför deras ledande term i en Taylorutveckling för $x = 0$ och $x = a$.

5.9 Vad är $(AB)^\dagger$? När är $[A, B]$ Hermitesk? Samma fråga för $i\,[A, B]$?

Lösning 5.9: För alla (ev. sammansatta) operatorer C gäller $\langle \phi | C\psi \rangle = \left\langle C^\dagger \phi | \psi \right\rangle$ således utgår vi från följande likhet

$$\langle \phi | AB\psi \rangle = \left\langle (AB)^\dagger \phi | \psi \right\rangle. \tag{4}$$

Vi utvecklar nu vänsterledet, *V.L.* i ekvation (4)

$$\langle \phi | AB\psi \rangle = \left\langle A^\dagger \phi | B\psi \right\rangle = \left\langle B^\dagger A^\dagger \phi | \psi \right\rangle.$$

För att detta skall vara lika med *H.L.* i (4) måste alltså gälla att

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger.$$

Kommentar: Detta har du sett ett specialfall av i linjär algebra, för transponering av två matriser A och B gäller $(AB)^T = B^T A^T$.

För att $[A,\, B]$ skall vara Hermitesk måste gälla att

$$\langle \phi | \, [A,\, B]\, \psi \rangle = \langle [A,\, B]\, \phi | \psi \rangle \, . \tag{5}$$

Vi utvecklar *V.L.* av ekvation (5)

$$\langle \phi | \, [A,\, B]\, \psi \rangle = \langle \phi | AB\psi \rangle - \langle \phi | BA\psi \rangle = \left\langle A^\dagger \phi | B\psi \right\rangle - \left\langle B^\dagger \phi | A\psi \right\rangle$$

$$= \left\langle B^\dagger A^\dagger \phi | \psi \right\rangle - \left\langle A^\dagger B^\dagger \phi | \psi \right\rangle = \left\langle \left[B^\dagger,\, A^\dagger\right] \phi | \psi \right\rangle = \left\langle - \left[A^\dagger,\, B^\dagger\right] \phi | \psi \right\rangle .$$

En direkt jämförelse med *H.L.* av (5) ger då att det måste gälla att $A = -A^\dagger$ samt $B = B^\dagger$ eller att $A = A^\dagger$ samt $B = -B^\dagger$.

Kommentar: Om både A och B är hermiteska (vilket operatorer ofta är i kvantmekaniken) har vi alltså $A = A^\dagger$ samt enligt ovan $A = -A^\dagger$, motsvarande för B. Enda lösningen är då att $[A, B] = 0$.

Samma fråga för $i\,[A,\, B]$, samma lösning! (observera att i allmänhet $(iC)^\dagger = -iC^\dagger$)
För att $i\,[A,\, B]$ skall vara Hermitesk måste gälla att

$$\langle \phi | i\, [A,\, B]\, \psi \rangle = \langle i\, [A,\, B]\, \phi | \psi \rangle \, . \tag{6}$$

Vi utvecklar *V.L.* av ekvation (6)

$$\langle \phi | i\, [A,\, B]\, \psi \rangle = \langle \phi | iAB\psi \rangle - \langle \phi | iBA\psi \rangle = \left\langle -iA^\dagger \phi | B\psi \right\rangle - \left\langle -iB^\dagger \phi | A\psi \right\rangle$$

$$= \left\langle -iB^\dagger A^\dagger \phi | \psi \right\rangle - \left\langle -iA^\dagger B^\dagger \phi | \psi \right\rangle = \left\langle -i \left[B^\dagger,\, A^\dagger\right] \phi | \psi \right\rangle = \left\langle i \left[A^\dagger,\, B^\dagger\right] \phi | \psi \right\rangle .$$

En direkt jämförelse med *H.L.* av (6) ger då att det måste gälla att $A = A^\dagger$ samt $B = B^\dagger$.

Kommentar: Detta gäller alltid då A och B är hermiteska (se kommentaren ovan).

5.12 Låt ϕ_k vara de ortonormerade egenfunktionerna till operatorn A som egenvärdena λ_k. Tillståndet för en partikel ges vid en viss tidpunkt av $\phi = (\phi_1 + \phi_2)/\sqrt{2}$. Bestäm obestämbarheten $\triangle A$. När är $\triangle A = 0$?

Lösning 5.12: Enligt läroboken sidan 122 definieras obestämbarheten för operatorn A enligt

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}.$$

Vi behöver därför beräkna följande förväntningsvärden, $\langle A \rangle$ och $\left\langle A^2 \right\rangle$.

$$\langle A \rangle = \left\langle (\phi_1 + \phi_2)/\sqrt{2} | A (\phi_1 + \phi_2)/\sqrt{2} \right\rangle = \frac{1}{2} \langle (\phi_1 + \phi_2) | \lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2 \rangle$$

$$= \frac{1}{2} \lambda_1 \langle (\phi_1 + \phi_2) | \phi_1 \rangle + \frac{1}{2} \lambda_2 \langle (\phi_1 + \phi_2) | \phi_2 \rangle = \frac{1}{2} (\lambda_1 + \lambda_2),$$

där vi utnyttjat att egenfunktionerna är ortonormerade, dvs

$$\langle (\phi_1 + \phi_2) | \phi_1 \rangle = \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle + \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle = 1 + 0 = 1.$$

$$\left\langle A^2 \right\rangle = \left\langle (\phi_1 + \phi_2)/\sqrt{2} | A^2 (\phi_1 + \phi_2)/\sqrt{2} \right\rangle$$

$$= \left\langle (\phi_1 + \phi_2)/\sqrt{2} | \left(\lambda_1^2 \phi_1 + \lambda_2^2 \phi_2 \right)/\sqrt{2} \right\rangle = \frac{1}{2} \left(\lambda_1^2 + \lambda_2^2 \right).$$

Obestämbarheten är alltså

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} = \sqrt{\frac{1}{2} (\lambda_1^2 + \lambda_2^2) - \left(\frac{1}{2} (\lambda_1 + \lambda_2) \right)^2} = \frac{1}{2} (\lambda_1 - \lambda_2).$$

Vi ser direkt att $\triangle A = 0$ då $\lambda_1 = \lambda_2$.

5.15 Låt ϕ_n vara egentillstånd till Hamiltonoperatorn H och B en godtycklig operator.

a) Visa att $\langle \phi_n | [H, B] \phi_n \rangle = 0$.

b) Antag att $H = \frac{p_x^2}{2m} + V(x)$ och $B = x p_x$. Visa följande samband, 'virialteoremet' för egentillstånd till Hamiltonoperatorn:

$$2 \langle E_{kin} \rangle = \left\langle x \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} \right\rangle.$$

c) Tillämpa detta teorem på den harmoniska oscillatorn d.v.s. då

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2.$$

Lösning 5.15 a): När vi visar **a)** kan vi utnyttja att ϕ_n är egentillstånd till H dvs $H \phi_n = E_n \phi_n$ samt att $H^\dagger = H$ (vi vill mäta reella energier!). Vi får då

$$\langle \phi_n \left| [H,\, B] \, \phi_n \right\rangle = \langle \phi_n \left| HB\phi_n - BH\phi_n \right\rangle = \langle \phi_n \left| HB\phi_n \right\rangle - \langle \phi_n \left| BE_n\phi_n \right\rangle$$

$$= \langle H\phi_n \left| B\phi_n \right\rangle - E_n \langle \phi_n \left| B\phi_n \right\rangle = E_n^\star \langle \phi \left| B\phi_n \right\rangle - E_n \langle \phi_n \left| B\phi_n \right\rangle$$

$$= (E_n - E_n) \langle \phi_n \left| B\phi_n \right\rangle = 0.$$

Lösning 5.15 b): Vi utnyttjar nu resultatet från **a)** med $B = xp_x$. Det lönar sig dock att först förenkla kommutatorn enligt följande

$$[H,\, B] = -\left[xp_x,\, \frac{1}{2m}p_x^2 + V(x)\right] = -\left[xp_x,\, \frac{1}{2m}p_x^2\right] - [xp_x,\, V(x)]$$

$$= \left[\frac{1}{2m}p_x^2,\, x\right] p_x + x \underbrace{\left[\frac{1}{2m}p_x^2,\, p_x\right]}_{0} + \underbrace{[V(x)\,,\, x]}_{0} p_x + x\,[V(x)\,,\, p_x]\,.$$

De två icke-försvinnande kommutatorerna kan beräknas enligt följande

$$\left[\frac{1}{2m}p_x^2,\, x\right] p_x = -\frac{1}{2m}\,[x,\, p_x p_x]\, p_x$$

$$= -\frac{1}{2m}\left(\underbrace{[x,\, p_x]}_{i\hbar} p_x + p_x \underbrace{[x,\, p_x]}_{i\hbar}\right) p_x = -\frac{i\hbar}{m}p_x^2,$$

$$x\,[V(x)\,,\, p_x]\,\Psi = -i\hbar x \left(V(x)\,\Psi' - \frac{\partial}{\partial x}(V(x)\,\Psi)\right)$$

$$= -i\hbar x \left(V(x)\,\Psi' - V(x)\,\Psi' - \frac{\partial V(x)}{\partial x}\Psi\right) = i\hbar x \frac{\partial V(x)}{\partial x}\Psi.$$

Vi har alltså

$$[H,\, xp_x] = -\frac{i\hbar}{m}p_x^2 + i\hbar x \frac{\partial V(x)}{\partial x}.$$

Vi tillämpar nu resultatet från **a)**

$$0 = \langle \phi_n \left| [H,\, B] \, \phi_n \right\rangle = \left\langle \phi_n \left| -\frac{i\hbar}{m}p_x^2\phi_n + i\hbar x \frac{\partial V(x)}{\partial x}\phi_n \right. \right\rangle =$$

$$= -\left\langle \phi_n \left| \frac{i\hbar}{m} p_x^2 \phi_n \right.\right\rangle + \left\langle \phi_n \left| i\hbar x \frac{\partial V(x)}{\partial x} \phi_n \right.\right\rangle,$$

efter att vi dividerat med $i\hbar$ i bägge termerna har vi den sökta likheten

$$2\left\langle \phi_n \left| \frac{p_x^2}{2m} \phi_n \right.\right\rangle = 2\langle E_{kin}\rangle = \left\langle \phi_n \left| x \frac{\partial V(x)}{\partial x} \phi_n \right.\right\rangle = \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle.$$

Lösning 5.15 c): Harmoniska oscillatorpotentialen $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ insatt i resultatet ovan från **b)** $2\langle E_{kin}\rangle = \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle$ ger

$$2\langle E_{kin}\rangle = \left\langle x m\omega^2 x \right\rangle = 2\left\langle \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right\rangle = 2\langle E_{pot}\rangle,$$

dvs väntevärdet av den kinetiska och potentiella energin är lika stor.

Kommentar: Hur ser motsvarande utträkning ut för en klassisk oscillator?

5.18. En partikel befinner sig i en endimensionell harmonisk oscillator. Vid tiden $t = 0$ ges dess vågfunktion av

$$\phi(x) = N x^3 \exp(-m\omega x^2/(2\hbar)).$$

a) Vid denna tidpunkt mäter man partikelns energi. Vilka mätvärden kan man få? Bestäm även motsvarande sannolikheter!

b) Efter energimätningen som gav utfallet $E = 3\hbar\omega/2$ mäter man omedelbart partikelns läge. Vad är sannolikheten att finna partikeln i det klassiskt förbjudna området? (Det klassiskt förbjudna området definieras av villkoret att $V(x) \geq E_{total}$.)

Lösning 5.18 a): Generellt gäller att man kan skriva upp vågfunktionen som en serieutveckling i basen till en harmonisk oscillator

$$\phi = \sum_{k=0}^{?} c_k \psi_k.$$

Koefficienterna c_k kan erhållas som skalärprodukten $c_k = \langle \psi_k | \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^\star \phi dx$ och för alla koefficienter hör en viss sannolikhet $0 \leq |c_k|^2 \leq 1$ att uppmäta energin svarande mot tillstånd k, vilken för en endimensionell harmonisk oscillator är $E_k = \hbar\omega\left(k+\frac{1}{2}\right)$. I detta fall förenklas dock lösningen om vi observerar att $qx^3 = q_3\psi_3 + q_1\psi_1$ de enda två förekommande koefficienterna kan då identifieras termvis, men vi börjar med att normera vågfunktionen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^\star \phi dx = 1 \Rightarrow N^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^6 \exp(-m\omega x^2/\hbar) dx = 1 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow N = ... = \frac{4}{\sqrt{30}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)^3.$$

Om vi nu använder formelsamlingen för att skriva egenfunktionerna för $k=1$ och $k=3$

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} 2\xi e^{-\xi^2/2},\ \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x,$$

$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{48}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left(-12\xi + 8\xi^3\right) e^{-\xi^2/2},\ \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x,$$

ser vi att

$$\frac{4}{\sqrt{30}}\xi^3 = c_1 \frac{1}{\sqrt{2}} 2\xi + c_3 \frac{1}{\sqrt{48}} \left(-12\xi + 8\xi^3\right) \Rightarrow \begin{cases} c_1 = \sqrt{\frac{3}{5}} \\ c_3 = \sqrt{\frac{2}{5}} \end{cases}.$$

Man kan alltså få mätvärden på energin som motsvarar egenfunktionerna för $k=1$ och $k=3$, dvs $E = 3\hbar\omega/2$ samt $E = 7\hbar\omega/2$ ($E_k = \hbar\omega(k+1/2)$). Motsvarande sannolikheter erhålls som absolutbeloppet i kvadrat på utvecklingskoefficienterna, d.v.s. $|c_1|^2 = 3/5$ och $|c_3|^2 = 2/5$, som sig bör blir totala sannolikheten 1.

Lösning 5.18 b): Efter mätningen 'kollapsar' vågfunktionen till den egenfunktion som motsvarar det uppmätta egenvärdet. I vårt fall uppmäter vi $E = 3\hbar\omega/2 = \hbar\omega\left(1+\frac{1}{2}\right)$, $k=1$ så systemet beskrivs efter mätningen av egenfunktionen $\psi_1 = \sqrt{2}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \xi e^{-\xi^2/2}, \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$ (se uppgift **5.16** eller formelsamlingen). Det klassiskt förbjudna området ges av $V(x) \geq E_{total}$ där $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ samt $E = \hbar\omega\left(1+\frac{1}{2}\right)$ detta ger villkoret $|x| \geq \sqrt{\frac{3\hbar}{m\omega}}$. Sannolikheten att finna partikeln i det klassiskt förbjudna området är alltså

$$P\left(|x| \geq \sqrt{\frac{3\hbar}{m\omega}}\right) = \int_{-\infty}^{-\sqrt{\frac{3\hbar}{m\omega}}} \psi_1^\star \psi_1 dx + \int_{\sqrt{\frac{3\hbar}{m\omega}}}^{\infty} \psi_1^\star \psi_1 dx$$

$$= 1 - 2\int_0^{\sqrt{\frac{3\hbar}{m\omega}}} \psi_1^\star \psi_1 dx = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \int_0^{\sqrt{\frac{3\hbar}{m\omega}}} \xi^2 e^{-\xi^2} dx =$$

$$= \left[\begin{array}{c} dx = \frac{d\xi}{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}} \\ x = \sqrt{\frac{3\hbar}{m\omega}} \Rightarrow \xi = \sqrt{3} \end{array} \right] = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\sqrt{3}} \xi \xi e^{-\xi^2} d\xi$$

$$= 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left\{ \left[\frac{\xi e^{-\xi^2}}{-2} \right]_0^{\sqrt{3}} + \frac{1}{2} \underbrace{\int_0^{\sqrt{3}} e^{-\xi^2} d\xi}_{\frac{\sqrt{\pi}}{2} erf(\sqrt{3})} \right\} \approx 0.5558.$$

6.3 En partikel som är bunden att röra sig i en dimension påverkas av potentialen $V(x) = V_0(x/\ell)^4$. Använd variationsmetoden för att finna ett approximativt värde på grundtillståndets energi.

Lösning 6.3: Denna potential växer snabbare än en harmonisk oscillator potential ($\propto x^2$), man skulle då kunna argumentera för att välja en variationsfunktion som avtar snabbare är e^{-x^2}. I praktiken blir detta aningen komplicerat och vi väljer att återigen använda $u_\alpha(x) = (2\alpha/\pi)^{1/4} \exp(-\alpha x^2)$ som variationsfunktion. Bidraget från den kinetiska energin blir samma som i uppgift **6.1**, nämligen

$$\langle H_{kin} \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha.$$

Den potentiella energin beräknas enligt följande

$$\langle H_{pot} \rangle = \frac{V_0}{\ell^4} \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\, 2 \int_0^\infty x^4 \exp(-2\alpha x^2) dx = \frac{V_0}{\ell^4} \frac{3}{16\alpha^2}.$$

Väntevärdet av den totala energin är alltså

$$\langle H \rangle = \langle H_{kin} \rangle + \langle H_{pot} \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{V_0}{\ell^4} \frac{3}{16\alpha^2}.$$

Vi minimerar detta uttryck med avseende på parametern α

$$\frac{d \langle H \rangle}{d\alpha} = 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{V_0}{\ell^4} \frac{3}{8\alpha^3} = 0 \Rightarrow \alpha = \left(\frac{3mV_0}{4\hbar^2 \ell^4} \right)^{1/3}.$$

Med detta α insatt i den totala energin får vi en uppskattning av systemets grundenergi E_1 enligt

$$E_1 \leq \frac{\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{V_0}{\ell^4} \frac{3}{16\alpha^2} = \frac{3}{8} \left(\frac{6V_0 \hbar^4}{m^2 \ell^4} \right)^{1/3}.$$

Kommentar: Som varje fysiker alltid bör göra, kontrollerar du också att energin du beräknat verkligen har dimensionen energi!

6.6 En partikel befinner sig i en endimensionell oändligt djup brunn med bredden a,

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty & \text{annars} \end{cases} .$$

En störning $V_1(x) = V_0\delta(x - a/2)/a$ finns. Använd metoden 'ändliga underrum' för att finna matrisen för Hamiltonoperatorn. Gör beräkningen i det tre olika underrum som svarar mot de två, tre och fyra lägsta tillstånden. Finn sedan egenvärdena till motsvarande matriser.

Lösning 6.6: För en liten störning i den oändligt djupa brunnen är det naturligtvis lämpligt att använda den välkända basen för den ostörda brunnens Hamiltonoperator

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad n = 1,\ 2,\ 3,\ \dots .$$

Enligt teorin (sidan 141-146 i läroboken) skall vi bilda våra matriselement enligt

$$m_{n,j} = \langle \psi_n | H \psi_j \rangle + \langle \psi_n | V_1 \psi_j \rangle =$$

$$= \langle \psi_n | E_j \psi_j \rangle + \frac{2V_0}{a^2} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \delta(x - a/2) \sin\left(\frac{j\pi x}{a}\right) dx.$$

Den första termen ger alltså bara bidrag då $n = j$, 'diagonalelement'. För den som har glömt det påminner vi också om hur δ-funktionen 'skär ut' integrandens värde

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x - x_0)dx = f(x_0).$$

Vi ser då att $m_{n,j} = 0$ om minst en av sinusfaktorerna är 0 för $x = a/2$ dvs då n eller(/och) j är ett jämnt tal. Nedan skriver vi upp den matris som svarar mot de fyra lägsta tillstånden, de två efterfrågade mindre matriserna finns 'uppe till vänster' i denna matris

$$\begin{bmatrix} E_1 + \langle \psi_1 | V_1 \psi_1 \rangle & 0 & \langle \psi_1 | V_1 \psi_3 \rangle & 0 \\ 0 & E_2 & 0 & 0 \\ \langle \psi_3 | V_1 \psi_1 \rangle & 0 & E_3 + \langle \psi_3 | V_1 \psi_3 \rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_4 \end{bmatrix} =$$

$$
= \begin{bmatrix} E_1 + \frac{2V_0}{a^2} & 0 & -\frac{2V_0}{a^2} & 0 \\ 0 & E_2 & 0 & 0 \\ -\frac{2V_0}{a^2} & 0 & E_3 + \frac{2V_0}{a^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_4 \end{bmatrix}.
$$

Egenvärdena till motsvarande 2×2-matris fås ur följande sekularekvation

$$
(E_2 - E)\left(E_1 + \frac{2V_0}{a^2} - E\right) = 0 \Rightarrow E = E_1 + \frac{2V_0}{a^2},\ E = E_2.
$$

Den första energinivån blir alltså förskjuten $\frac{2V_0}{a^2}$ uppåt medans den andra energinivån inte påverkas.

För att genomföra beräkningarna för matriserna av storlek 3×3 och 4×4 använder man lämpligen metoden 'utveckling efter rad/kolonn', resultaten är i fallet 3×3

$$
E = \frac{E_1 + E_3}{2} + \frac{2V_0}{a^2} + \sqrt{\frac{E_1^2 + E_3^2 - 2E_1E_3}{4} + \frac{4V_0^2}{a^4}},\ E = E_2,
$$

$$
E = \frac{E_1 + E_3}{2} + \frac{2V_0}{a^2} - \sqrt{\frac{E_1^2 + E_3^2 - 2E_1E_3}{4} + \frac{4V_0^2}{a^4}}.
$$

Och i 4×4-fallet

$$
E = \frac{E_1 + E_3}{2} + \frac{2V_0}{a^2} + \sqrt{\frac{E_1^2 + E_3^2 - 2E_1E_3}{4} + \frac{4V_0^2}{a^4}},\ E = E_2,
$$

$$
E = \frac{E_1 + E_3}{2} + \frac{2V_0}{a^2} - \sqrt{\frac{E_1^2 + E_3^2 - 2E_1E_3}{4} + \frac{4V_0^2}{a^4}},\ E = E_4.
$$

Kommentar: För $V_0 \to 0$ i uttrycken ovan återfår man de ostörda energierna.

6.8 Antag att funktionen u är sådan att den är ortogonal mot grundtillståndets vågfunktion.

a) Visa att $\langle u \,|Hu\rangle \geq E_2$.

b) Betrakta uppgift **2**, rita en figur som visar vågfunktionen för det första exciterade tillståndet samt ange dess allmänna egenskaper. Vilka av de givna förslagen på variationsfunktion är ortogonala mot grundtillståndets vågfunktion? Vilken är mest lämpad som variationsvågfunktion?

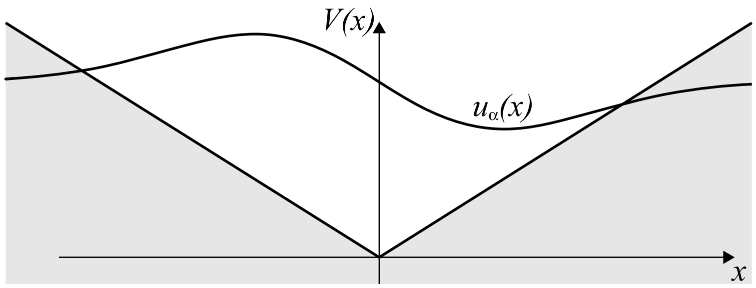


Figure 1: En skiss av vågfunktionen för det första exciterade tillståndet till potentialen $V(x) = |x|$ beskriven i uppgift **6.2**.

c) Bestäm ett approximativt värde på energin för det första exciterade tillståndet!

Lösning 6.8 a): Om u skall vara ortogonal mot grundtillståndets vågfunktion dvs $\langle u|\psi_1\rangle = 0$ kan vi i en serieutveckling av u sätta $c_1 = 0$, dvs vi kan börja med index 2

$$u = \sum_{n=2}^{\infty} c_n \psi_n.$$

Väntevärdet för energin kan uttryckas

$$\langle u|Hu\rangle = \left\langle \sum_{n=2}^{\infty} c_n\psi_n | H \sum_{m=2}^{\infty} c_m\psi_m \right\rangle = \left\langle \sum_{n=2}^{\infty} c_n\psi_n | \sum_{m=2}^{\infty} c_m H\psi_m \right\rangle =$$

$$= \left\langle \sum_{n=2}^{\infty} c_n\psi_n | \sum_{m=2}^{\infty} c_m E_m\psi_m \right\rangle = \sum_{n=2}^{\infty}\sum_{m=2}^{\infty} E_m c_n^{\star} c_m \underbrace{\langle\psi_n|\psi_m\rangle}_{\delta_{n,m}} =$$

$$= \sum_{m=2}^{\infty} E_m|c_m|^2 \geq \sum_{m=2}^{\infty} E_2|c_m|^2 = E_2 \underbrace{\sum_{m=2}^{\infty} |c_m|^2}_{1} = E_2.$$

Lösning 6.8 b): Vågfunktionen för det första exciterade tillståndet har de flesta egenskaper som grundtillståndet har med det viktiga undantaget att den har en nod. Av symmetriskäl måste noden vara belägen i mitten, dvs vi har att göra med en udda funktion, se figur 1 där vi skissat en (reell) sådan vågfunktion. De två första funktionerna i uppgift **2** uppfyller detta, den första är dock krånglig att räkna med så vi väljer $u_\alpha(x) = Nx\exp(-\alpha x^2)$.

Lösning 6.8 c): Vi inleder med den obligatoriska normeringen

$$N^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 exp\left(-2\alpha x^2\right) dx = 1 \Rightarrow N = 2\left(\frac{2\alpha^3}{\pi}\right)^{1/4}.$$

Vi delar nu upp förväntningsvärdet av Hamiltonoperatorn i två delar enligt $\langle H\rangle = \langle H_{kin}\rangle + \langle H_{pot}\rangle$

$$\langle H_{kin}\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}4\left(\frac{2\alpha^3}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\left(x\exp(-\alpha x^2)\right) dx =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}4\left(\frac{2\alpha^3}{\pi}\right)^{1/2} 2\alpha\, 2\int_0^{\infty} \left(2\alpha x^4 - 3x^2\right)\exp(-2\alpha x^2)dx = \frac{3\hbar^2}{2m}\alpha.$$

En liknande uträkning för den potentiella energin ger

$$\langle H_{pot}\rangle = \frac{V_0}{a}4\left(\frac{2\alpha^3}{\pi}\right)^{1/2} 2\int_0^{\infty} x^3\exp(-2\alpha x^2)dx = \frac{\sqrt{2}V_0}{a\sqrt{\pi}}\alpha^{-1/2}.$$

Väntevärdet av den totala energin är alltså

$$\langle H\rangle = \langle H_{kin}\rangle + \langle H_{pot}\rangle = \frac{3\hbar^2}{2m}\alpha + \frac{\sqrt{2}V_0}{a\sqrt{\pi}}\alpha^{-1/2}.$$

Vi minimerar detta uttryck med avseende på parametern α

$$\frac{d\langle H\rangle}{d\alpha} = 0 \Rightarrow \frac{3\hbar^2}{2m} - \frac{V_0}{a\sqrt{2}\sqrt{\pi}}\alpha^{-3/2} = 0 \Rightarrow \alpha = \left(\frac{\sqrt{2}mV_0}{3\sqrt{\pi}a\hbar^2}\right)^{2/3}.$$

Med detta α insatt i den totala energin får vi en uppskattning av systemets första exciterade energinivå E_2 enligt

$$E_2 \leq \frac{3\hbar^2}{2m}\alpha + \frac{\sqrt{2}V_0}{a\sqrt{\pi}}\alpha^{-1/2} = \frac{3}{2}\left(\frac{6V_0^2\hbar^2}{\pi a^2 m}\right)^{1/3}.$$

6.9 Enligt relativistisk partikelmekanik ges den kinetiska energin av

$$E_{kin} = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} - mc^2.$$

Här är p rörelsemängden, m (vilo-) massan och c ljusfarten.

a) Serieutveckla E_{kin} efter p och visa att den första ickeförsvinnande korrektionen till det ickerelativistiska uttrycket ges av

$$-(p^2/(2m))^2/(2mc^2).$$

b) Antag att denna term kan betraktas som en störning. Beräkna energiskiftet i första ordningen för en partikel i en endimensionell oändligt djup brunn på grund av denna term. Diskutera giltigheten av beräkningen. Välj en elektron i en brunn med bredden 1 nm och en nukleon i en 'endimensionell kärna' med lämplig bredd.

Lösning 6.9 a): Vi gör först följande omskrivning

$$E_{kin} = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} - mc^2 = mc^2\left(\sqrt{1+\frac{p^2}{m^2c^2}} - 1\right). \qquad (7)$$

Därefter använder vi den välkända Taylorutvecklingen

$$\sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2,\ x \ll 1.$$

Med hjälp av denna skriver vi om uttrycket (7) för små värden på p/mc enligt

$$E_{kin} \approx mc^2\left(\frac{p^2}{2m^2c^2} - \frac{p^4}{8m^4c^4}\right) = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2}.$$

Vi observerar att den första termen är den klassiska kinetiska energin och att den andra termen är den efterfrågade korrektionen (samt kontrollerar att även denna term har dimensionen energi).

Lösning 6.9 b): Enligt första ordningens störningsteori (läroboken sidan 138) skall vi beräkna

$$\Delta E_n = \langle \phi_n | V_1 \phi_n \rangle = -\frac{1}{8m^3c^2}\langle \phi_n | \hat{p}^4 \phi_n \rangle = -\frac{\hbar^4}{8m^3c^2}\left\langle \phi_n \middle| \frac{\partial^4}{\partial x^4}\phi_n \right\rangle.$$

Denna uppgift handlar om en oändligt djup brunn i en dimension, så egenfunktionerna är

$$\phi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \Rightarrow \frac{\partial^4}{\partial x^4}\phi_n = \left(\frac{n\pi}{a}\right)^4\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right).$$

I detta fall behöver vi alltså inte beräkna någon integral utan får svaret direkt

$$\Delta E_n = -\frac{\hbar^4}{8m^3c^2}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^4\langle \phi_n | \phi_n \rangle = -\frac{1}{2mc^2}\left(\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2}\right)^2 = -\frac{1}{2mc^2}E_n^2,$$

där E_n betecknar de ostörda energinivåerna. Det följer då att approximationen är god när korrektionen är liten i förhållande till den ostörda nivån dvs då $E_n \ll mc^2$. Vi undersöker nu kvantitativt effekten av denna korrektion för två olika system, en elektron i en brunn med bredden 1 nm och en nukleon i en 'endimensionell kärna' med bredden 1 fm. Låt oss beteckna elektronens (vilo-) massa med m_e, då gäller med a uttryckt i meter följande för grundtillståndet $n = 1$ i brunnen

$$\Delta E_1 = -\frac{1}{2m_e\,(3\cdot 10^8)^2}\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2m_e\,(10^{-9})^2}\right)^2 = -\frac{10^{20}\pi^4\hbar^4}{72m_e^3}$$

$$\approx -2.21\cdot 10^{-26}\ \mathrm{J} \approx -1.4\cdot 10^{-7}\ \mathrm{eV}.$$

Motsvarande uppskattning för kärnan med $a = 1$ fm $= 10^{-15}$ m ger ($m_p \approx 2000\cdot m_e$)

$$\Delta E_1 = -\frac{1}{4000m_e\,(3\cdot 10^8)^2}\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{4000m_e\,(10^{-15})^2}\right)^2 = -\frac{10^{35}\pi^4\hbar^4}{576m_e^3}$$

$$\approx -2.77\cdot 10^{-12}\ \mathrm{J} \approx -17\,\mathrm{MeV}.$$

Då detta i båda fallen är betydligt mindre än grundenergin E_1 kan uppskattningen förväntas vara rimlig.

Kommentar: Detta visar också att det normalt är rimligt att använda icke-relativistisk kvantmekanik (Schrödingerekvationen) i dessa sammanhang. I kärnfallet förbättras även situationen av att a igentligen bör väljas något större, tex $a \sim 5$ fm för syre.

7.4 Visa att $\langle L_x\rangle = 0$ i ett egentillstånd till L_z, till exempel genom att ta förväntningsvärdet av kommutatorn $[L_y,\ L_z]$.

Lösning 7.4: Låt ϕ vara ett egentillstånd till L_z, dvs $L_z\phi = m\phi$. Vi gör först följande omskrivning (se läroboken sidan 152)

$$\langle L_x\rangle_\phi = \langle\phi\,|L_x\phi\rangle = -\frac{i}{\hbar}\,\langle\phi\,|[L_y,\ L_z]\,\phi\rangle\,.$$

Genom att utnyttja att L_z är hermitesk ($L_z^\dagger = L_z$) och att m är ett reellt kvanttal får vi

$$i\hbar\,\langle L_x\rangle_\phi = \langle\phi\,|[L_y,\ L_z]\,\phi\rangle = \left\langle\phi|L_y\,\underbrace{L_z\phi}_{m\phi}\right\rangle - \langle\phi\,|L_zL_y\phi\rangle =$$

$$= m \langle \phi \, | L_y \phi \rangle - \langle L_z \phi \, | L_y \phi \rangle = m \langle \phi \, | L_y \phi \rangle - m \langle \phi \, | L_y \phi \rangle = 0.$$

7.7 En partikels tillstånd beskrivs av vågfunktionen

$$\phi(\mathbf{r}) = f(r) \, Y_\ell^m(\theta, \varphi) \, .$$

a) Använd den allmänna obestämbarhetsrelationen för att ge en undre gräns för produkten

$$\triangle L_x \cdot \triangle L_y.$$

b) Bestäm det exakta värdet av denna storhet i detta tillstånd genom att utnyttja att det på grund av symmetri gäller att

$$< L_x^2 > = < L_y^2 > .$$

Lösning 7.7 a): Vi använder den allmänna obestämbarhetsrelationen (sidan 122 i läroboken)

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq |\langle C \rangle| /2, \; C = i \, [A, B] \, .$$

I detta fall får vi

$$C = i \, [L_x, L_y] = -\hbar L_z \; \Rightarrow \; |\langle C \rangle| /2 = \frac{\hbar}{2} \, |\langle L_z \rangle| \, .$$

Nu gäller speciellt för $\phi(\mathbf{r}) = f(r) \, Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ att

$$\langle L_z \rangle = \langle Y_\ell^m \, | L_z \, Y_\ell^m \rangle = \hbar m,$$

så att

$$\triangle L_x \cdot \triangle L_y \geq \frac{\hbar^2 \, |m|}{2}.$$

Lösning 7.7 b): Vi utgår från definitionen för obestämbarhet

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}.$$

Enligt uppgift **7.4** är $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$ så att

$$\triangle L_x = \triangle L_y = \sqrt{\langle L_x^2 \rangle} = \sqrt{\langle L_y^2 \rangle},$$

p.g.a. symmetrin mellan x och y. Enligt $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ har vi då att

$$\left\langle L_x^2 \right\rangle = \left\langle L_y^2 \right\rangle = \frac{1}{2} \left(\left\langle L^2 \right\rangle - \left\langle L_z^2 \right\rangle \right).$$

För $\phi(\mathbf{r}) = f(r) \, Y_\ell^m (\theta, \varphi)$ gäller nu

$$\left\langle L^2 \right\rangle = \left\langle Y_\ell^m \left| L^2 \, Y_\ell^m \right. \right\rangle = \hbar^2 \ell (\ell + 1), \; \left\langle L_z^2 \right\rangle = \left\langle Y_\ell^m \left| L_z^2 \, Y_\ell^m \right. \right\rangle = \hbar^2 m^2.$$

Slutligen får vi då

$$\triangle L_x \cdot \triangle L_y = \left\langle L_x^2 \right\rangle = \left\langle L_y^2 \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left(\ell (\ell + 1) - m^2 \right).$$

Kommentar: Eftersom $\ell \geq |m|$ är detta resultat i överensstämmelse med vad vi visade i **a)**.

7.8. En partikel beskrivs vid en viss tidpunkt av vågfunktionen

$$\phi(\mathbf{r}) = N \left(3x^2 - y^2 + z^2 \right) f(r).$$

Uttryck denna funktion i sfäriska koordinater. Man mäter vid denna tidpunkt rörelsemängdmomentets z-komponent. Vilka mätvärden kan erhållas och vad är deras sannolikheter?

Lösning 7.8: Funktionen kan uttryckas i sfäriska koordinater genom följande omskrivning

$$3x^2 - y^2 + z^2 = r^2 \left(3 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - \sin^2 \theta \sin^2 \varphi + \cos^2 \theta \right)$$

$$= r^2 \left(4 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - \sin^2 \theta \underbrace{\left(\sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi \right)}_{1} + \underbrace{\left(\sin^2 \theta - \sin^2 \theta \right)}_{0} + \cos^2 \theta \right)$$

$$= r^2 \left(4 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - 2 \sin^2 \theta + 1 \right) = r^2 \left(1 + 2 \sin^2 \theta \underbrace{\left(2 \cos^2 \varphi - 1 \right)}_{\cos 2\varphi} \right).$$

Vårt problem förenklas nu betydligt genom följande identifikation med klotytfunktioner

$$r^2\left(1+2\sin^2\theta\cos 2\varphi\right)=r^2\sqrt{4\pi}\left(Y_0^0+\sqrt{\frac{8}{15}}\left(Y_2^2+Y_2^{-2}\right)\right).$$

Alternativ trigonometrisk omskrivning: Möjligen är följande tillvägagångsätt mera naturligt

$$3\sin^2\theta\cos^2\varphi-\sin^2\theta\sin^2\varphi+\cos^2\theta$$

$$=3\sin^2\theta\left(\frac{e^{2i\varphi}+e^{-2i\varphi}+2}{4}\right)+\sin^2\theta\left(\frac{e^{2i\varphi}+e^{-2i\varphi}-2}{4}\right)+\cos^2\theta$$

$$=\sin^2\theta\left(e^{2i\varphi}+e^{-2i\varphi}\right)+\underbrace{\sin^2\theta+\cos^2\theta}_{1}.$$

Vi vet nu direkt vilka värden på rörelsemängdens z komponent som vi kan erhålla vid mätning, nämligen de som förekommer i de tre ingående klotytfunktionerna $m=-2,\ 0,\ 2$. För att beräkna deras sannolikheter måste vi först normera vågfunktionen dvs bestämma konstanten N. Den radiella delen påverkar inte rörelsemängdsmomentet så vi definierar funktionen

$$U\left(\theta,\varphi\right)=N\left(3x^2-y^2+z^2\right)/r^2=N\sqrt{4\pi}\left(Y_0^0+\sqrt{\frac{8}{15}}\left(Y_2^2+Y_2^{-2}\right)\right)$$

som vinkeldelen av $\phi(\mathbf{r})$, då gäller

$$1=\left\langle U\left(\theta,\varphi\right)\middle|U\left(\theta,\varphi\right)\right\rangle$$

$$=N^2 4\pi\left\langle Y_0^0+\sqrt{\frac{8}{15}}\left(Y_2^2+Y_2^{-2}\right)\middle|Y_0^0+\sqrt{\frac{8}{15}}\left(Y_2^2+Y_2^{-2}\right)\right\rangle$$

$$=N^2 4\pi\left(\left\langle Y_0^0+\sqrt{\frac{8}{15}}\left(Y_2^2+Y_2^{-2}\right)\middle|Y_0^0\right\rangle\right.$$

$$+\left\langle Y_0^0+\sqrt{\frac{8}{15}}\left(Y_2^2+Y_2^{-2}\right)\middle|\sqrt{\frac{8}{15}}Y_2^2\right\rangle+$$

$$+\left\langle Y_0^0+\sqrt{\frac{8}{15}}\left(Y_2^2+Y_2^{-2}\right)\middle|\sqrt{\frac{8}{15}}Y_2^{-2}\right\rangle\Bigg).$$

Genom att utnyttja att klotytfunktionerna är ortonormerade

$$\left\langle Y_{l'}^{m'}|Y_l^m\right\rangle=\delta_{l'l}\delta_{m'm},$$

får vi

$$N^2 4\pi\left(1+\frac{8}{15}+\frac{8}{15}\right)=1\;\Rightarrow\;N=\sqrt{\frac{15}{4\pi\cdot 31}}.$$

Vinkeldelen av vågfunktionen kan då skrivas

$$U(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{15}{31}}\left(Y_0^0+\sqrt{\frac{8}{15}}\left(Y_2^2+Y_2^{-2}\right)\right)$$

$$=\sqrt{\frac{15}{31}}Y_0^0+\sqrt{\frac{8}{31}}Y_2^2+\sqrt{\frac{8}{31}}Y_2^{-2},$$

och vi kan då direkt utläsa sannolikheterna för de olika mätvärdena som beloppet i kvadrat på respektive koefficient

$$P(L_z=0)=\frac{15}{31},\;P(L_z=2)=\frac{8}{31},\;P(L_z=-2)=\frac{8}{31}.$$

Vi ser då även att totala sannolikheten är 1 som sig bör.

7.11 En partikel med massan m rör sig i rummet under påverkan av den sfäriskt symmetriska potentialen (sfärisk lådpotential)

$$V(r)=\begin{cases}-V_0, & r<a\\ 0, & r>a\end{cases}.$$

Grundtillståndet, som är ett s-tillstånd dvs $\ell=0$, har energin

$$E=-V_0/2.$$

a) Finn lösningen till den radiella Schrödingerekvationen och ställ upp det villkor som gäller mellan a och V_0 i detta fall.

b) I denna potential finns det inga bundna tillstånd för tillräckligt höga värden på ℓ. Kan du, genom att bestämma den effektiva potentialen bestämma ett värde på ℓ där det med säkerhet inte finns något bundet tillstånd?

Anmärkning: Den sfäriska lådpotentialen ger en icke alltför dålig approximation till den potential som en nukleon känner inuti en atomkärna.

Lösning 7.11 a): Den radiella Schrödingerekvationen är (se läroboken sidan 158)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\left(rR\left(r\right)\right)+\frac{\hbar^2\ell\left(\ell+1\right)}{2mr^2}R\left(r\right)+V\left(r\right)R\left(r\right)=ER\left(r\right)$$

om vi väljer $u\left(r\right)=rR\left(r\right)$ får vi för $\ell=0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''+V\left(r\right)u=Eu.$$

För $r<a$ (område I) gäller att $V\left(r\right)=-V_0$ och $E=-V_0/2$, detta ger ekvationen

$$u_I''+\frac{mV_0}{\hbar^2}u_I=0\;\Rightarrow\;u_I=A\sin\left(\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}r\right)+B\cos\left(\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}r\right),\qquad(8)$$

där randvillkoret $u_I\left(0\right)=0$ ger $B=0$. För $r>a$ (område II) gäller att $V\left(r\right)=0$ och $E=-V_0/2$, vilket ger

$$u_{II}''-\frac{mV_0}{\hbar^2}u_{II}=0\;\Rightarrow\;u_{II}=C\exp\left(-\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}r\right)+D\exp\left(\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}r\right),\qquad(9)$$

randvillkoret $u_{II}\left(r\rightarrow\infty\right)\rightarrow0$ ger nu att $D=0$. Vidare skall vågfunktionen och dess derivata vara kontinuerliga i punkten $r=a$, dvs $u_I\left(a\right)=u_{II}\left(a\right)$ samt $u_I'\left(a\right)=u_{II}'\left(a\right)$. Från ekvation (8) och (9) får vi då följande ekvationssystem

$$\begin{cases}A\sin\left(\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}a\right)=C\exp\left(-\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}a\right)\\ A\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}\cos\left(\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}a\right)=-C\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}\exp\left(-\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}a\right)\end{cases}.$$

Det måste alltså gälla att

$$\cos\left(\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}a\right)=-\sin\left(\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}a\right),$$

och den första (positiva) vinkel som uppfyller detta är (rita en enhetscirkel!)

$$\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}a=\frac{3\pi}{4}\;\Rightarrow\;V_0a^2=\frac{9\pi^2\hbar^2}{16m}.$$

Vilket är det sökta villkoret mellan a och V_0.

Lösning 7.11 b): Den effektiva potentialen är

$$V_{\mathit{eff}}(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r).$$

Vi kan inte ha några bundna tillstånd om centrifugalpotentialen 'lyfter' den effektiva potentialen över nollnivån för alla $r \leq a$ (skissa!). Vi kan då ställa upp följande villkor för $r \to a$

$$\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2ma^2} + V(r \to a) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2ma^2} - V_0 > 0 \ \Rightarrow \ \ell(\ell+1) > \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2},$$

detta är en andragradsekvation i ℓ med följande (positiva) lösning

$$\ell > -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}}\ , \ \ell = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots .$$

8.3. Hamiltonoperatorn för elektronen i en väteliknande jon ges av

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - Z\frac{e_0^2}{r}.$$

a) Visa att vågfunktionen $\phi(\mathbf{r}) = \sqrt{Z^3/(\pi a_0^3)}\exp(-Zr/a_0)$ är normerad och att den satisfierar Schrödingerekvationen. Vilka kvanttal svarar denna vågfunktion mot?

b) Bestäm förväntningsvärdet av dels den kinetiska energin, och dels den potentiella energin i tillståndet med $n = 2$, $\ell = 1$ och $m = 1$ i väteatomen.

Lösning 8.3 a): Vågfunktionen har inget vinkelberoende (svarar mot klotytfunktionen Y_0^0) så det räcker att visa att följande integral i radiell del är normerad

$$\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\int_0^\infty \exp(-2Zr/a_0)\, 4\pi r^2 dr = 4\pi\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\frac{2!}{(2Z/a_0)^{2+1}} = 1,$$

där vi utnyttjat formelsamlingen för $n = 2$. Vi vill nu visa att den satisfierar Schrödingerekvationen d.v.s. $H\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r})$. Vi börjar med den kinetiska delen av Hamiltonoperatorn och utnyttjar igen att $\phi(\mathbf{r})$ inte har något beroende av vinkelvariabler

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\phi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\phi(r)) =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\phi'(r) + \phi(r)\right) = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{2\phi'(r)}{r} + \phi''(r)\right)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{2Z}{a_0 r} - \frac{Z^2}{a_0^2}\right)\phi(r) = \left(Z\frac{e_0^2}{r} + E_1\right)\phi(r). \tag{10}$$

I sista steget har vi identifierat $e_0^2 = \frac{\hbar^2}{m_e a_0}$ och $E_1 = -\frac{Z^2\hbar^2}{2m_e a_0^2}$ i likhet med fallet $Z = 1$ beskrivet på sidan 162, 163 i läroboken. Det är nu klart att första termen i (10) tar ut bidraget från den potentiella delen av Hamiltonoperatorn, d.v.s. vi har visat att $H\phi(\mathbf{r}) = E_1\phi(\mathbf{r})$. Vi har då samtidigt identifierat huvudkvanttalet till $n = 1$ (jämför sidan 167 i läroboken). De övriga kvanttalen vet vi också eftersom vi tidigare konstaterat att vinkeldelen är Y_0^0, d.v.s. $(n, \ell, m) = (1, 0, 0)$.

Lösning 8.3 b): Vi vet att den totala energin i detta fall är

$$E_2 = -\frac{Z^2\hbar^2}{2m_e a_0^2}\cdot\frac{1}{2^2} = -\frac{1}{8}\frac{Z^2}{a_0}e_0^2. \tag{11}$$

Vi bestämmer nu förväntningsvärdet av den potentiella energin för tillståndet (se formelsamlingen)

$$\phi_{211} = -\frac{Z^{5/2}}{8\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{r}{a_0}\exp\left(-Zr/(2a_0)\right)\sin(\theta)\exp(i\varphi).$$

Vi skall alltså beräkna

$$\langle V\rangle = -Ze_0^2\left\langle \phi_{211}\left|\frac{1}{r}\phi_{211}\right.\right\rangle$$

$$= -\frac{Z^6 e_0^2}{64\pi a_0^5}\int_0^\infty r\exp\left(-Zr/a_0\right)r^2 dr \underbrace{\int_0^\pi \sin^2\theta\sin\theta d\theta}_{\int_0^\pi \sin\theta + \frac{d}{d\theta}\left(\frac{1}{3}\cos^3\theta\right)d\theta}$$

$$\times\underbrace{\int_0^{2\pi}\exp(-i\varphi)\exp(i\varphi)\,d\varphi}_{2\pi} = -\frac{Z^6 e_0^2}{24 a_0^5}\int_0^\infty r^3\exp\left(-Zr/a_0\right)dr = -\frac{Z^2 e_0^2}{4a_0}. \tag{12}$$

När vi nu vet den potentiella energin (12) kan vi beräkna den kinetiska mha ekvation (11) enligt

$$\langle T\rangle \equiv E_{kin} = E_{total} - E_{pot} = -\frac{1}{8}\frac{Z^2 e_0^2}{a_0} + \frac{Z^2 e_0^2}{4a_0} = \frac{1}{8}\frac{Z^2 e_0^2}{a_0}.$$

8.4 För att bestämma storleken på "sannolikhetsmolnet" av elektroner i en atom brukar man använda en effektiv medelradie enligt $r_{rms} = \sqrt{\langle r^2 \rangle}$ där rms står för "root-mean-square". Bestäm denna storhet för 2s och 2p tillståndet i väteatomen.

Lösning 8.4: 2s tillståndet ($n = 2, \ell = 0, m = 0$) har vågfunktionen (se formelsamlingen)

$$\phi_{200} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right).$$

Vågfunktionen har inget vinkelberoende dvs är proportionell mot Y_0^0, detta gör att $\langle r^2 \rangle_{2s} = \langle \phi_{200} \left| r^2 \phi_{200} \right. \rangle$ kan beräknas mha formelsamlingen genom följande integration i radiell led

$$\langle r^2 \rangle_{2s} = \frac{1}{8\pi a_0^3} \int_0^\infty r^2 \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) 4\pi r^2 dr$$

$$= \frac{1}{2a_0^3} \left(4! a_0^5 + \frac{6! a_0^7}{4a_0^2} - \frac{5! a_0^6}{a_0}\right) = \frac{1}{2a_0^3} \left(24a_0^5 + 180a_0^5 - 120a_0^5\right) = 42a_0^2.$$

För 2p tillståndet ($n = 2, \ell = 1, m = -1, 0, 1$) har vi vågfunktionerna (se formelsamlingen)

$$\phi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \cos\theta = \frac{1}{\sqrt{24a_0^5}} r \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) Y_1^0 (\theta, \varphi),$$

$$\phi_{21\pm1} = \mp \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \sin\theta \exp(\pm i\varphi) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{24a_0^5}} r \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) Y_1^{\pm1} (\theta, \varphi).$$

Omskrivningen till klotytfunktioner, som är normerade under integration av vinkelvariablerna, gör att vi åter igen kan integrera endast i radiell led

$$\langle r^2 \rangle_{2p} = \frac{1}{24a_0^5} \int_0^\infty r^4 \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) r^2 dr = \frac{1}{24a_0^5} 6! a_0^7 = 30a_0^2.$$

Kommentar: Allmänt gäller $\langle r^2 \rangle_{n\ell} = \frac{a_0^2 n^2 \left(5n^2 + 1 - 3\ell(\ell+1)\right)}{2}$.

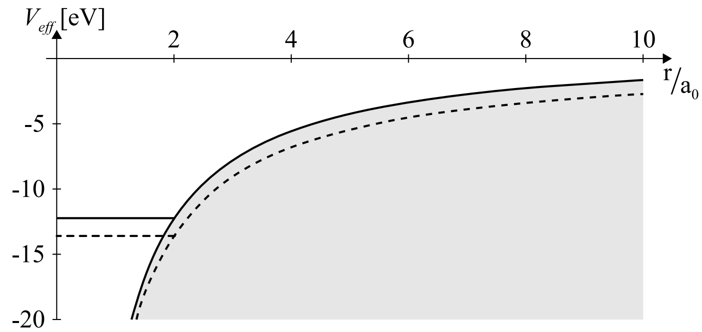


Figure 2: Skärmad potential (heldragen skuggad) och den ostörda Coulombpotentialen (streckad) illustrerad för det något orealistiska fallet $Z = 1$. Den heldragna horisontella linjen är den totala energin från störningsräkningen med $\mu = 0.05$. Den streckade horisontella linjen utgör grundtillståndets energi -13.6 eV.

8.6 En ensam elektron i en väteliknande jon med laddningen Z känner av en ren Coulombpotential. Om yttre elektroner tillkommer så störs denna potential. Detta kan beskrivas med en 'skärmad Coulombpotential'

$$V(r) = -Z\frac{e_0^2}{r}\exp\left(-\mu r/a_0\right)$$

där μ är en konstant som bestämmer styrkan på skärmningen. Vad är skillnaden mellan Coulombpotentialen och den skärmade potentialen? Visa i en figur! Beräkna med hjälp av första ordningens störningsteori hur grundtillståndets energi förändras på grund av denna skärmning. Förenkla uttrycket när $\mu \ll 1$.

Lösning 8.6: I figur 2 har vi skissat Coulombpotentialen och den skärmade potentialen. För att göra en störningsräkning med en term i Hamiltonoperatorn H_p som är liten för små μ, skriver vi

$$H = H_0 + H_p = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze_0^2}{r} + \frac{Ze_0^2}{r}\left(\underbrace{1 - e^{-\mu r/a_0}}_{\approx \mu r/a_0 + \ldots}\right).$$

Vågfunktionen för en vätelik jon med laddning Z är (sidan 170 i läroboken)

$$\phi_{100} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}}e^{-Zr/a_0}.$$

Vi får då ($\int dV = 4\pi\int r^2 dr$)

$$\Delta E = \langle\phi_{100}\,|H_p\;\phi_{100}\rangle = \frac{4e_0^2 Z^4}{a_0^3}\int_0^\infty \left(1 - e^{-\mu r/a_0}\right) r e^{-2Zr/a_0} dr =$$

$$= \frac{4e_0^2 Z^4}{a_0^3} \left(\underbrace{\int_0^\infty r e^{-2Zr/a_0} dr}_{\frac{1}{\left(\frac{2Z}{a_0}\right)^2}} - \underbrace{\int_0^\infty r e^{(-\mu-2Z)r/a_0} dr}_{\frac{1}{\left(\frac{2Z+\mu}{a_0}\right)^2}} \right)$$

$$= \frac{4e_0^2 Z^4}{a_0} \left(\frac{1}{4Z^2} - \frac{1}{(2Z+\mu)^2} \right). \tag{13}$$

Vi undersöker nu den ledande termen i $\mu \ll 1$ för den andra faktorn ovan och gör därför omskrivningen

$$\frac{1}{4Z^2} - \frac{1}{(2Z+\mu)^2} = \frac{\mu^2 + 4Z\mu}{4Z^2 (2Z+\mu)^2} \approx \frac{\mu}{4Z^3}.$$

Där vi i sista ledet bara behållt termer av ordning $\mathcal{O}(\mu)$ i täljaren och $\mathcal{O}(1)$ i nämnaren. Från ekvation (13) får vi alltså

$$\Delta E \approx \frac{Z e_0^2}{a_0} \mu.$$

För en grafisk illustration se figur 2.

8.7 Vi har tidigare härlett det så kallade virialteoremet i det endimensionella fallet (se uppgift **15** i kapitel 5).

a) Argumentera för att det i tre dimensioner gäller att

$$2 \langle E_{kin} \rangle \;=\; \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V \rangle .$$

b) Använd detta teorem för att finna ett allmänt uttryck för

$$\langle 1/r \rangle_{n\ell} \;= \left\langle \phi_{n\ell m} \middle| \frac{1}{r} \phi_{n\ell m} \right\rangle .$$

Lösning 8.7 a): Vi använder följande uttryck för en allmän operator A från sidan 118 i läroboken

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle . \tag{14}$$

Vi uttrycker Hamiltonoperatorn i tre dimensioner som $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$ och undersöker kommutatorn i högerledet för operatorn $A = \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$

$$[H, A] = -\left[\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}, \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})\right] = -\left[(xp_x + yp_y + zp_z), \frac{(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)}{2m}\right]$$

$$- [(xp_x + yp_y + zp_z), V(\mathbf{r})].$$

Med hjälp av en testfunktion kan vi nu beräkna kommutatorn till

$$[H, A] = -\frac{i\hbar}{m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + i\hbar\left(x\frac{\partial V}{\partial x} + y\frac{\partial V}{\partial y} + z\frac{\partial V}{\partial z}\right)$$

$$= -2i\hbar E_{kin} + i\hbar(\mathbf{r} \cdot \nabla V).$$

Vi ser nu från (14) att eftersom $A = \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$ inte har något tidsberoende måste det gälla att

$$0 = \frac{i}{\hbar}\langle [H, A] \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle -2i\hbar E_{kin} + i\hbar(\mathbf{r} \cdot \nabla V) \rangle \Rightarrow 2\langle E_{kin} \rangle = \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V \rangle.$$

Lösning 8.7 b): Vi vill använda resultatet från uppgift **a)** och beräknar ∇V för väteatomens potential $V = -\frac{e_0^2}{r}$ m.h.a. sfäriska koordinater

$$\nabla V = \frac{\partial V}{\partial r}\vec{e}_r + \frac{1}{r}\underbrace{\frac{\partial V}{\partial \theta}}_{0}\vec{e}_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\underbrace{\frac{\partial V}{\partial \varphi}}_{0}\vec{e}_\varphi = \frac{e_0^2}{r^2}\vec{e}_r.$$

Detta ger då att

$$\mathbf{r} \cdot \nabla V = r\vec{e}_r \cdot \frac{e_0^2}{r^2}\vec{e}_r = \frac{e_0^2}{r} = -V \Rightarrow \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V \rangle = \langle -V \rangle.$$

Utnyttjar vi nu virialteoremet vi visade i uppgift **a)** får vi

$$2\langle E_{kin} \rangle = \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V \rangle = \langle -V \rangle \Rightarrow \langle E_{kin} \rangle = -\frac{1}{2}\langle V \rangle. \tag{15}$$

Tillsammans med uttrycket för den totala energin

$$\langle H \rangle = \langle E_{kin} + V \rangle = \langle E_{kin} \rangle + \langle V \rangle = \frac{1}{2}\langle V \rangle = E_n = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}\frac{1}{n^2},$$

följer då från ekvation (15) följande allmänna uttryck för förväntningsvärdet av r^{-1}

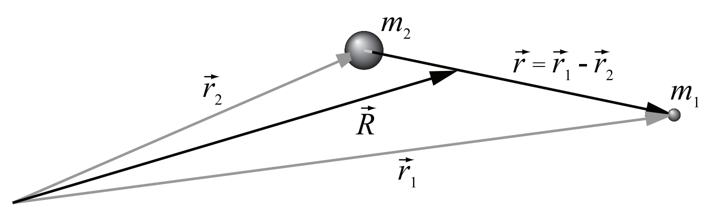


Figure 3: Skiss över de två olika koordinatsystemen.

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = -\frac{1}{e_0^2} \langle V \rangle = -\frac{2}{e_0^2} \langle H \rangle = \frac{2}{e_0^2} \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \frac{1}{n^2} = \frac{1}{a_0 n^2}.$$

Vi konstaterar också att det endast beror på huvudkvanttalet n till skillnad mot tex $\langle r^2 \rangle$ som beräknas i uppgift **4**.

8.9 I klassisk mekanik inför man den så kallade reducerade massan för att kunna beskriva ett tvåpartikelsystem. På detta sätt kan den relativa rörelsen behandlas som ett enpartikelproblem, där massan ges av $m_{red} = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$. Härled detta ur Newtons rörelselagar genom att införa en relativ koordinat $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ samt koordinaten för tyngdpunkten $\mathbf{R} = (m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2)/(m_1 + m_2)$. På motsvarande sätt kan det kvantmekaniska tvåkroppars problemet reduceras. Hur påverkar detta vätespektrum?

Lösning 8.9: Från figur 3 följer det att koordinaten för tyngdpunkten är $\mathbf{R} = (m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2)/(m_1 + m_2)$ på följande sätt. Om vi med α betecknar den andel av sträckan $|\mathbf{r}|$ som ligger mellan punkten $\mathbf{R}$ och $\mathbf{r}_1$ ger momentjämvikt kring punkten $\mathbf{R}$

$$m_1 \alpha |\mathbf{r}| = m_2 (1 - \alpha) |\mathbf{r}| \;\Rightarrow\; \alpha = \frac{m_2}{m_1 + m_2}.$$

Vi får då den i problemtexten givna vektorlikheten för tyngdpunkten

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}_1 - \alpha\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \frac{m_2}{m_1 + m_2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}.$$

Vi introducerar nu några fler beteckningar, totala massan

$$M = m_1 + m_2,$$

samt koordinaterna för de i figur 3 förekommande vektorerna m.a.p. samma Cartesiska bas

$$\begin{cases} \mathbf{r}_j = (x_j, y_j, z_j) \;\; j = 1, 2 \\ \mathbf{r} = (x, y, z) \\ \mathbf{R} = (X, Y, Z) \end{cases}.$$

Enligt Newton gäller nu för varje partikel

$$\begin{cases} m_1\mathbf{a}_1 = m_1\ddot{\mathbf{r}}_1 = \mathbf{F}_1 \\ m_2\mathbf{a}_2 = m_2\ddot{\mathbf{r}}_2 = \mathbf{F}_2 \end{cases}.$$

Då det för den relativa koordinaten och tyngdpunktens koordinat gäller att

$$\begin{cases} \ddot{\mathbf{r}} = \ddot{\mathbf{r}}_1 - \ddot{\mathbf{r}}_2 \\ \ddot{\mathbf{R}} = \frac{m_1\ddot{\mathbf{r}}_1 + m_2\ddot{\mathbf{r}}_2}{M} \end{cases},$$

följer det direkt att

$$\begin{cases} m_1\ddot{\mathbf{r}}_1 = m_{red}\ddot{\mathbf{r}} + m_1\ddot{\mathbf{R}} \\ m_2\ddot{\mathbf{r}}_2 = -m_{red}\ddot{\mathbf{r}} + m_2\ddot{\mathbf{R}} \end{cases}, \tag{16}$$

där vi i enlighet med problemtexten definierat den reducerade massan $m_{red} = m_1m_2/M$. Genom att addera respektive subtrahera de två ekvationerna i (16) får vi

$$\begin{cases} M\ddot{\mathbf{R}} = \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2 \\ m_{red}\ddot{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_2}{2} \end{cases}. \tag{17}$$

Den övre rörelselagen (17) för tyngdpunkten kan generaliseras till ett godtyckligt antal partiklar $\sum_j m_j\ddot{\mathbf{R}} = \sum_j \mathbf{F}_j$. Den undre ekvationen i (17) är den sökta rörelselagen för den relativa rörelsen, betraktad som en partikel med massan m_{red}.

Låt oss nu studera tvåkropparsproblemet kvantmekaniskt. Vi börjar med att studera enpartikelrörelsemängdsmomentoperatorn för en testfunktion $f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = f(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ vid basövergången som vi illustrerar i figur 3. För varje komponent, t.ex. x-komponenten av partikel 1 gäller

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \frac{\partial f}{\partial X}\underbrace{\frac{\partial X}{\partial x_1}}_{m_1/M} + \frac{\partial f}{\partial x}\underbrace{\frac{\partial x}{\partial x_1}}_{1} = \left(\frac{m_1}{M}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x}\right) f.$$

Då detta gäller för alla komponenter (x_1, y_1, z_1) får vi

$$\nabla_1 = \frac{m_1}{M}\nabla_{\mathbf{R}} + \nabla_{\mathbf{r}}, \tag{18}$$

motsvarande räkning för partikel 2 ger

$$\nabla_2 = \frac{m_2}{M}\nabla_{\mathbf{R}} - \nabla_{\mathbf{r}}. \tag{19}$$

Om vi nu inför rörelsemängdsoperatorer för tyngdpunkten $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{R}}$ och den relativa rörelsen $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}$ får vi enligt ekvation (18) och (19)

$$\hat{\mathbf{p}}_1 = \frac{m_1}{M}\hat{\mathbf{P}} + \hat{\mathbf{p}}$$

och

$$\hat{\mathbf{p}}_2 = \frac{m_2}{M}\hat{\mathbf{P}} - \hat{\mathbf{p}}.$$

Den totala kinetiska energin kan då skrivas ($\left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{p}}\right] = 0$)

$$\hat{\mathbf{T}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} = \frac{1}{2m_1}\left(\frac{m_1}{M}\hat{\mathbf{P}} + \hat{\mathbf{p}}\right)^2 + \frac{1}{2m_2}\left(\frac{m_2}{M}\hat{\mathbf{P}} - \hat{\mathbf{p}}\right)^2$$

$$= \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{1}{2}\left(\underbrace{\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}}_{m_{red}^{-1}}\right)\hat{\mathbf{p}}^2$$

där

$$m_{red} = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)^{-1} = \frac{m_1 m_2}{M}$$

åter igen är den reducerade massan.

För två partiklar vars enda växelverkan beror på deras inbördes avstånd r, $\hat{V} = V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = V(r)$, får vi då Hamiltonoperatorn

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_{red}} + V(r)\,. \tag{20}$$

Vi ansätter nu en vågfunktion där vi separerat koordinaterna för tyngdpunkten och den relativa rörelsen

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \varphi(\mathbf{R}, t)\,\phi(\mathbf{r}, t)\,. \tag{21}$$

Insättning i (mångpartikel-) Schrödinger ekvationen med högerledet definierat av (20) ger

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \;\Rightarrow\; i\hbar\left(\frac{\frac{\partial\varphi}{\partial t}}{\varphi} + \frac{\frac{\partial\phi}{\partial t}}{\phi}\right) = \frac{\frac{\hat{\mathbf{P}}^2\varphi}{2M}}{\varphi} + \frac{\frac{\hat{\mathbf{p}}^2\phi}{2m_{red}}}{\phi} + V(r)\,. \tag{22}$$

Den första termen i vänsterledet respektive högerledet i (22) beror ej av $\mathbf{r}$ och de övriga termerna beror ej av $\mathbf{R}$. Vi kan alltså separera (22) i två Schrödingerekvationer, en för tyngdpunkten som kan betraktas som en fri partikel med massan M

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2\varphi}{2M},$$

samt en för den relativa rörelsen som kan betraktas som en partikel med massan m_{red} i potentialen $V(r)$

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t}=\frac{\hat{\mathbf{p}}^2\phi}{2m_{red}}+V(r)\,\phi. \tag{23}$$

Med $m_{red}\to m_e$ och $V(r)=-e_0^2/r$ är ekvation (23) precis den som lösts för väteatomen i läroboken sidorna 163-167, där man fann energispektrumet

$$E_n=-\frac{m_e e_0^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}=-\frac{13.60570}{n^2}\text{ eV},\ n=1,\ 2,\ 3,\ \ldots. \tag{24}$$

Att vi tidigare tillät approximationen $m_{red}\to m_e$ beror på att protonens massa är så mycket större än elektronens

$$m_p\simeq 1836.1527\cdot m_e\ \Rightarrow\ m_{red}=\frac{m_e m_p}{m_e+m_p}=0.99945568\cdot m_e. \tag{25}$$

Använder vi istället den reducerade massan (25) ser vi att energispektrummet (24) skall multipliceras med en faktor 0.99945568. För t.ex. grundtillståndet i väte får vi då

$$E_1=13.59829\,\text{eV}.$$

9.2. Bestäm degenerationsgraden för skalen med godtyckligt värde på N. Det vill säga ange på hur många olika sätt tre ickenegativa tal kan kombineras så att deras summa blir N.

Lösning 9.2: Tänk dig att du har tre olika urnor, en för varje Cartesiskt kvanttal (n_x,n_y,n_z). Du har då N kulor att fördela mellan urnorna. På hur många sätt kan detta göras? Ordningen med vilken kulorna läggs i urnorna är naturligtvis oväsentlig. Man kan använda följande bild där de svarta kulorna anger de N kulorna och de vertikala strecken samt de vita kulorna utgör urnornas väggar.

$$|\ \bullet\bullet\ldots\ \bullet\ \circ\ \bullet\bullet\ldots\ \bullet\ \circ\ \bullet\bullet\ldots\ \bullet\ |$$

De två yttersta väggarna är givna, återstår att välja plats för de två inre väggarna, dvs de två vita kulorna. Detta är ekvivalent med att välja ut 2 positioner av totalt $N+2$. Vi påminner oss om en sats från kombinatoriken: *Dragning utan återläggning av p element ur q utan hänsyn till ordning kan göras på*

$$\frac{q\,(q-1)\ldots(q-p+1)}{p!}=\begin{pmatrix} q\\ p\end{pmatrix}$$

olika sätt. Så att välja ut 2 positioner av totalt $N+2$ kan göras på

$$\begin{pmatrix} N+2\\ 2\end{pmatrix}=\frac{(N+2)!}{2!N!}=\frac{(N+1)\,(N+2)}{2},\ \begin{pmatrix} a\\ b\end{pmatrix}=\frac{a!}{b!\,(a-b)!}$$

olika sätt.

Kommentar: T.ex. för $N = 3$ får du 10 olika tillstånd (utan hänsyn taget till ev. spinfrihetsgrader) i överensstämmelse med föregående uppgift **9.1**.

9.5 Inte alla kärnor är sfäriska. Många icke-sfäriska kärnor har formen av en ellipsoid. Generaliseringen av den sfäriska harmoniska oscillatorn blir

$$V\left(x, y, z\right) = \frac{1}{2} m \left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2\right).$$

Bestäm spektrum, med degeneration, för denna potential om $\omega_x = \omega_y \neq \omega_z$. Studera speciellt fallet $\omega_z = 2\omega_x = 2\omega_y$.

Lösning 9.5: Eftersom de olika Cartesiska komponenterna kan separeras (jämför sidan 180 i läroboken) får vi

$$E = \hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y \left(n_y + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_z \left(n_z + \frac{1}{2}\right) =$$

$$= \hbar\omega_x \left(n_x + n_y + 1\right) + \hbar\omega_z \left(n_z + \frac{1}{2}\right).$$

I allmänhet kan inte kvantat i z-led 'ersättas' med en summa av kvantan i x- och y-led. Endast n_x och n_y kan då ge degeneration, samma som för en tvådimensionell (isotrop) harmonisk oscillator, dvs $\hat{N} + 1$.

För fallet $\omega_z = 2\omega_x = 2\omega_y$ får vi

$$E = \hbar\omega_x \left(n_x + n_y + 1\right) + \hbar 2\omega_x \left(n_z + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega_x \left(n_x + n_y + 2n_z + 2\right).$$

Nu motsvarar 'ett kvanta i z-led två kvanta i x/y-led'. Vi förväntas därför ha en högre degeneration, men inte lika hög som för en isotrop tredimensionell harmonisk oscillator $\left(\left(N+1\right)\left(N+2\right)\right)/2$. Nedan följer de första tillstånden, betecknade enligt $\left(n_x, n_y, 2n_z\right)$, med ökande energi nedåt i uppställningen

$$\begin{array}{c}
(0,0,0) \\
(1,0,0)\ (0,1,0) \\
(1,1,0)\ (0,0,2)\ (0,2,0)\ (2,0,0) \\
(3,0,0)\ (0,3,0)\ (1,0,2)\ (0,1,2)\ (1,2,0)\ (2,1,0) \\
(4,0,0)\ (0,4,0)\ (0,0,4)\ (2,2,0)\ (2,0,2)\ (0,2,2)\ (1,1,2)\ (3,1,0)\ (1,3,0).
\end{array}$$

För att erhålla en allmän formel resonerar vi enligt följande. Det gäller att summan av de viktade kvanttalen skall vara konstant (huvudkvanttal)

$$n_x + n_y + 2n_z = N.$$

För varje fixt värde på n_z skall då n_x och n_y uppfylla

$$n_x + n_y = N - 2n_z = \hat{N}.$$

Detta delproblem är samma problem som den tvådimensionella (isotropa) harmoniska oscillatorn (se uppgift **9.4**) och vi har följande deldegeneration

$$\hat{N} + 1 = n_x + n_y + 1 = N - 2n_z + 1.$$

Vi skiljer nu på två fall

$$\hat{N}\ jämn\ \Rightarrow\ N - 2n_z\ jämn\ \Rightarrow\ n_z = 0,\ 1,\ 2,\ ...,\ N/2,$$

samt

$$\hat{N}\ udda\ \Rightarrow\ N - 2n_z + 1\ jämn\ \Rightarrow\ n_z = 0,\ 1,\ 2,\ ...,\ (N+1)/2.$$

Detta ger oss nu den totala degenerationen

$$N\ jämn\ \Rightarrow \sum_{n_z=0}^{N/2} N - 2n_z + 1 = \frac{N^2 + 4N + 4}{4},$$

samt

$$N\ udda\ \Rightarrow \sum_{n_z=0}^{(N+1)/2} N - 2n_z + 1 = \frac{N^2 + 4N + 3}{4}.$$

Detta ger följande degenerationer, från $N = 0$ till $N = 10$

$$1,\ 2,\ 4,\ 6,\ 9,\ 12,\ 16,\ 20,\ 25,\ 30,\ 36,$$

i överensstämmelse med uppräkningen av de första tillstånden ovan.

Kommentar 1: De magiska talen (med en spinfaktor 2) blir

$$2\sum_{N=0}^{M} \frac{N^2 + 4N + 7/2 + (-1)^N/2}{4} = \frac{M^3}{6} + \frac{5M^2}{4} + \frac{17M}{6} + \frac{15}{8} + \frac{(-1)^M}{8} =$$

$$= 2,\ 6,\ 14,\ 26,\ 44,\ \ldots,\ M = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ \ldots.$$

Kommentar 2: En allmän lärdom från övningen är att symmetrier ger ökad degeneration!

Kompletteringar till lärobokens facit (att införa i nästa upplaga).

5.6 Delsvar: $a = m\omega/(2\hbar)$. Svar: $E_0 = \hbar\omega/2$ (grundtillståndet) och $E_1 = 3\hbar\omega/2$ (1.a exciterade tillståndet).

5.7 (Komplettering till uppgiftstexten) Antag att brunnen har bredden a.

6.2 Delsvar: $\alpha_{min} = \left(\frac{mV_0}{a\sqrt{2\pi}\hbar^2}\right)^{2/3}$. Svar: $E_1 \leq \frac{3}{2}\left(\frac{V_0^2\hbar^2}{2\pi ma^2}\right)^{1/3} \approx 0.813\left(\frac{V_0^2\hbar^2}{ma^2}\right)^{1/3}$.

6.9 Svar: b) $\Delta E_n = -\frac{E_n^2}{2mc^2}$. Approximationen är god då $E_n \ll mc^2$.

9.3 Kommentar: Uppgiften skall lösas utan hänsyn till spinn. De magiska talen för kärnor som är uppräknade på sidan 183 överensstämmer bara med den harmoniska oscillatorns magiska tal (med två spinntillstånd) för de första tre, sedan behövs en förfinad modell som bla inkluderar en LS-term.