FYS2140 Kvantefysikk - Vår 2021
Løsningsforslag for Oblig 10

(Versjon 30. april 2021)

Her er løsninger på A Diskusjonsoppgaver, B Regneoppgaver og C Tilleggsoppgaver (ikke obligatorisk).

A Diskusjonsoppgaver

Først en liten introduksjon om kvantisering i hydrogenatomet:

Kvantetallene n, l og m_l forteller oss hvilket nivå den kvantiserte

- energien (kvantetall n)
- lengden av angulærmomentet (kvantetall l)
- z-komponenten av angulærmomentet (kvantetall m_l)

er på. Kvantetallene n, l og m_l inngår således i egenverdiene for hhv. energien, lengden av angulærmomentet og z-komponenten av angulærmomentet, slik at vi kan regne ut størrelsen på den kvantiserte

- energien på nivå n
- lengden av angulærmomentet på nivå l
- z-komponenten av angulærmomentet på nivå m_l

Elektronet i hydrogenatomet kan ha degenererte tilstander, dvs. at ulike tilstander har samme energi. Degenerasjon i hydrogenatomet skjer for eksempel ved at kvantetallet n er det samme for flere tilstander, men de har ulik kombinasjon av kvantetallene l og m_l. Tilstandene kan ha samme energi, men ulikt angulærmoment. Tidsutviklingen til en bølgefunksjon i en stasjonær tilstand avhenger av energien ved $\exp(-iEt/\hbar)$. I en superposisjon av tilstander med ulik energi E_n, må hvert ledd i superposisjonen ha hver sin tidsutvikling beskrevet ved $\exp(-iE_nt/\hbar)$. I en superposisjon av tilstander med samme energi, kan alle leddene ha samme tidsutvikling.

Oppgave 1 Superponering og egenverdier

Gitt bølgefunksjon $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{200}+\psi_{300})$ for et elektron i hydrogenatomet.

a) Hva er sannsynligheten for å måle z-komponenten av angulærmomentet til å være $L_z = 3\hbar$?

A: $\frac{1}{2}$

B: $1/\sqrt{2}$

C: 0

Svar: C er riktig. Sannsynligheten for å måle $L_z = 3\hbar$ er 0 fordi begge egenfunksjonene i lineærkombinasjonen har kvantetall $m = 0$. Dermed måler man bare verdien $L_z = m\hbar = 0$.

b) Tenk nå at ψ er en initiell tilstandsfunksjon slik at $\Psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{200} + \psi_{300})$. Kan den tidsavhengige bølgefunksjonen da skrives som $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{200} + \psi_{300}) \exp(-iEt/\hbar)$? Hvis ikke, hvordan kan tidsutviklingen da uttrykkes?

Svar: Nei, tidsutviklingen $\exp(-iEt/\hbar)$ til de to egenfunksjonene i superposisjonen $\Psi(\vec{r}, 0)$ kan ikke være den samme, siden de to har ulik energi E, nemlig E_2 og E_3. Dette ser vi fra at kvantetallet n er 2 for den første og 3 for den andre funksjonen i lineærkombinasjonen. Tidsutviklingen er gitt ved $\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{200} \exp(-iE_2 t/\hbar) + \psi_{300} \exp(-iE_3 t/\hbar))$.

c) Vi har nå en annen initiell tilstand der $\Psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{210} + \psi_{200})$. Kan den tidsavhengige bølgefunksjonen nå skrives som $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{210} + \psi_{200}) \exp(-iEt/\hbar)$? Hvis ikke, hvordan kan tidsutviklingen da uttrykkes?

Svar: Ja, nå er tidsutviklingen den samme for de to egenfunksjonene i superposisjonen $\Psi(\vec{r}, 0)$, siden de begge har kvantetall $n = 2$ og dermed samme energi E, nemlig $E = E_2$.

Oppgave 2 Operator, observabel og måling

Egenfunksjonene ψ_{nlm_l} for elektronet i hydrogenatomet tilfredsstiller egenverdiligningen $\hat{H}\psi_{nlm_l} = E\psi_{nlm_l}$.

a) Forklar med egne ord hva alle delene av ligningen over representerer.

Svar: ψ_{nlm_l} er egenfunksjonen for en bestemt tilstand av elektronet i hydrogenatomet. Kvantetallene n, l og m_l representerer hhv. energien, lengden av angulærmomentet og z-komponenten av angulærmomentet. Hamilton-operatoren $\hat{H}$ representerer totalenergien, som også er en observabel. Størrelsen E er energi-egenverdien (som bare avhenger av n).

b) Forklar hva en operator gjør matematisk sett. Hva tilsvarer anvendelsen av en operatoren fysisk sett?

Svar: En operator er en matematisk konstruksjon som gjør noe med et objekt. Operasjonen kan rett å slett være å derivere en funksjon eller det kan være en matrise som virker på en vektor. Her virker operatoren på elementer i et vektorrom slik at den lager nye elementer i det samme vektorrommet. I kvantefysikken er disse elementene ofte en bølgefunksjon som beskriver et kvantefysisk system og operatorene er ofte lineære transformasjoner som for eksempel første og andre grads derivasjoner. Når en operator virker på en bølgefunksjon, vil den derfor noen ganger endre tilstanden til systemet (bølgefunksjonen), mens andre ganger forblir bølgefunksjonen den samme, men med en faktor i tillegg.

Mange (men ikke alle) operatorer i kvantefysikken representerer en målbar størrelse i systemet, en observabel. Når vi lar den virke på bølgefunksjonen, altså systemet vårt, kan vi tenke på det litt som å gjøre en måling. Målingen kan endre systemet eller ikke. Hvis systemet ikke endres, har vi en egentilstand med skarpe verdier for størrelsen vi måler. (Strengt tatt representerer ikke operatoren alene en måling, det må også en kollaps av bølgefunksjonen til. Det er ikke vektlagt i dette emnet, men kommer sterkere senere.)

c) Hva er forskjellen på en operator og en observabel i kvantefysikk?

Svar: Operatoren gjør en matematisk operasjon på en funksjon (for eksempel en derivasjon, en integrasjon, en faktor som skal ganges på). Observabelen er en fysisk målbar størrelse som er beskrevet av bølgefunksjonen. Målinger av observabelen kan simuleres ved å anvende den matematiske operatoren på systemets bølgefunksjon.

d) Under står fire påstander om en energimåling på en tilstand. To og to av dem betyr det samme, men der én av dem uttrykker en sammenheng matematisk og den andre uttrykker den fysiske betydningen. Diskuter hvilke som hører sammen og forklar hvorfor. Forklar også hvilke to som er riktige.

A: Målingen endrer systemets tilstand

B: Når $\hat{H}$ virker på ψ, får vi en ny $\psi \neq a\psi$ (der a er en reell konstant)

C: Målingen endrer ikke systemets tilstand

D: Når $\hat{H}$ virker på ψ, forblir ψ den samme

Svar: A og B hører sammen, det samme gjør C og D. A og B: Når en måling fysisk sett endrer systemets tilstand, innebærer det at operatoren som representerer observabelen som måles (her Hamilton-operatoren som representerer energi-måling), virker på bølgefunksjonen slik at den endres til en annen bølgefunksjon som er lineært uavhengig av den initielle bølgefunksjonen. Da er tilstanden endret, og fysisk kan vi si at målingen endret den tilstand systemet befant seg i. C og D: Hvis en måling fysisk sett ikke endrer tilstanden, må bølgefunksjonen før og etter at operatoren har virket på den være den samme (eventuelt ganget med en reell konstant). Det er C og D som er riktige her, siden vi gjør en energimåling på en egentilstand for energioperatoren $\hat{H}$.

B Regneoppgaver

Oppgave 3 Hydrogenatomet

I denne oppgaven ser vi bort fra elektronets egenspinn. H-atomet kan da beskrives ved tilstandsfunksjonene $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$ som har følgende egenskaper:

$$\hat{H}_0\psi_{nlm_l}(\vec{r}) = E_n\psi_{nlm_l}(\vec{r}), \tag{1}$$

$$\hat{L}^2\psi_{nlm_l}(\vec{r}) = \hbar^2 l(l+1)\psi_{nlm_l}(\vec{r}), \tag{2}$$

$$\hat{L}_z\psi_{nlm_l}(\vec{r}) = \hbar m_l\psi_{nlm_l}(\vec{r}), \tag{3}$$

$$\int \psi^*_{nlm_l}(\vec{r})\psi_{n'l'm'_l}(\vec{r})\, d^3\vec{r} = \delta_{n,n'}\delta_{l,l'}\delta_{m_l,m'_l}, \tag{4}$$

hvor

$$\delta_{k,k'} = \begin{cases} 1 & \text{for } k = k' \\ 0 & \text{ellers.} \end{cases} \tag{5}$$

a) Hva kaller vi disse (to) typene ligninger?

Svar: Ligning (1)–(3) er egenverdiligninger for operatorene $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$. Ligning (1) kalles også den tids-uavhengige Schrödingerligningen (TUSL). Ligning (4) er ortonormaliseringsbetingelsen for settet av bølgefunksjoner $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$.

Operatoren $\hat{H}_0$ er tidsuavhengig. Kvantetallet n kan anta verdiene $1, 2, \ldots$. For en gitt verdi av n kan l anta verdiene $0, 1, \ldots, n-1$, og m_l kan for en gitt verdi av l anta verdiene $-l, -l+1, \ldots, l-1, l$.

I denne oppgaven trengs ingen andre opplysninger enn de som er gitt ovenfor. Det er ikke nødvendig å kjenne de eksplisitte uttrykkene for operatorene $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$. Det skal ikke tas hensyn til elektronets egenspinn.

b) Hvilke fysiske størrelser er representert ved operatorene $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$?

Svar: Operatorene representerer henholdsvis (total)energien til elektronet, kvadratet av angulærmomentet og komponenten av angulærmomentet i z-retningen.

c) Hvilke fysiske størrelser har skarpe verdier i tilstanden $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$?

Svar: Om vi ser bort fra elektronets egenspinn kommuterer operatorene $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$ innbyrdes. Det vil si at de har samtidige egenfunksjoner $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$, og derfor skarpe verdier av de observable tilhørende $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$. Dette er energien til elektronet, kvadratet av angulærmomentet og komponenten av angulærmomentet i z-retningen. Disse skarpe verdiene er egenverdiene E_n, $\hbar^2 l(l+1)$ og $\hbar m_l$.

Vi har bare såvidt nevnt det i kurset, men dette er faktisk alle operatorene som kommuterer. Bortsett fra lineærkombinasjoner av $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$ såfinnes det ikke flere observable med skarpe verdier. Disse operatorene kalles da gjerne **Casimiroperatorene** til hydrogenatomet.

Ved tiden $t = 0$ er H-atomets tilstand beskrevet ved tilstandsfunksjonen $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$. Tidsutviklingen av tilstandsfunksjonen er bestemt av den tidsavhengige Schrödingerligningen

$$\hat{H}_0 \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t). \tag{6}$$

d) Bestem tilstandsfunksjonen som beskriver H-atomets tilstand ved tiden t.

Svar: En kan komme frem til svaret med litt arbeid ved å ta utgangspunkt i det generelle uttrykket for løsning av TASL:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{l'=0}^{n'-1} \sum_{m_l'=-l'}^{l'} c_{n'l'm_l'} \psi_{n'l'm_l'}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n'} t}, \tag{7}$$

hvor $\psi_{n'l'm_l'}$ er et komplett sett av stasjonære tilstander, og hvor $c_{n'l'm_l'}$ bestemmes fra initialbetingelsen

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \psi_{nlm_l}(\vec{r}), \tag{8}$$

som gir $c_{n'l'm_l'} = 1$ for $n' = n$, $l' = l$ og $m_l' = m_l$ og $c_{n'l'm_l'} = 0$ ellers.

Et enklere (og mindre matematisk) argument er at om vi begynner i en stasjonær tilstand (separable løsning) $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$ så er tidsutviklingen bare tidsutviklingen til en stasjonær tilstand, altså $e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$, slik at

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi_{nlm_l}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \tag{9}$$

La H-atomets tilstand ved tiden $t = 0$ nå være gitt ved tilstandsfunksjonen

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \sum_{m_l=-l}^{l} \psi_{nlm_l}(\vec{r}). \tag{10}$$

e) Vis at $\Phi(\vec{r})$ er normert.

Svar:

$$\begin{aligned} \int |\Phi(\vec{r})|^2 \, d^3\vec{r} &= \frac{1}{2l+1} \sum_{m_l=-l}^{l} \sum_{m_l'=-l}^{l} \int \psi^*_{nlm_l}(\vec{r}) \psi_{nlm_l'}(\vec{r}) \, d^3\vec{r} \\ &= \frac{1}{2l+1} \sum_{m_l=-l}^{l} \sum_{m_l'=-l}^{l} \delta_{n,n} \delta_{l,l} \delta_{m_l,m_l'} \\ &= \frac{1}{2l+1} \sum_{m_l=-l}^{l} \delta_{m_l,m_l} \\ &= \frac{1}{2l+1} \cdot (2l+1) = 1. \end{aligned} \tag{11}$$

hvor vi har brukt (4) og (5).

f) Vis at tilstandsfunksjonen ved tiden t er

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right). \tag{12}$$

Svar: Den generelle løsningen av TASL er igjen

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{l'=0}^{n'-1} \sum_{m_l'=-l'}^{l'} c_{n'l'm_l'} \psi_{n'l'm_l'}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n'} t}, \tag{13}$$

med initialbetingelse

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \Phi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \sum_{m_l=-l}^{l} \psi_{nlm_l}(\vec{r}). \tag{14}$$

Dette gir $c_{n'l'm_l'} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}$ når $n' = n$ og $l' = l$, og $c_{n'l'm_l'} = 0$ ellers, og

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, t) &= \sum_{m_l'=-l}^{l} \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \psi_{nlm_l'}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2l+1}} \sum_{m_l'=-l}^{l} \psi_{nlm_l'}(\vec{r}) \right) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \\ &= \Phi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}, \end{aligned} \tag{15}$$

hvor vi har brukt at det tidsavhengige leddet er uavhengig av summe-indeksen m_l' slik at det kan trekkes utenfor summen.

Et enklere argument er at fordi begynnelsestilstanden er en superposisjon av stasjonære tilstander med samme energi (degenererte), så har de alle samme tidsutvikling som kan trekkes utenfor summen av stasjonære tilstander. Vi kan altså direkte skrive TASL løsningen som $\Psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$.

g) Bestem forventningsverdien for operatorene $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$ i tilstanden som er beskrevet ved tilstandsfunksjonen $\Psi(\vec{r}, t)$ i ligning (12).

Svar: Nå er naturligvis

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 \Psi(\vec{r}, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\Phi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \right) \\ &= i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar} E_n \right) \Phi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} = E_n \Psi(\vec{r}, t), \end{aligned} \tag{16}$$

hvor vi har brukt (6). Dette gir forventningsverdien

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}_0 \rangle &= \int \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{H}_0 \Psi(\vec{r}, t)\, d^3\vec{r} = \int \Psi^*(\vec{r}, t) E_n \Psi(\vec{r}, t)\, d^3\vec{r} \\ &= E_n \int |\Psi(\vec{r}, t)|^2\, d^3\vec{r} = E_n, \end{aligned} \tag{17}$$

fordi $\Phi(\vec{r})$ og dermed $\Psi(\vec{r}, t)$ er nomert (tilstanden forblir normert om den er normert ved $t = 0$). Vi kan også skrive dette med Diracnotasjon:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}_0 \rangle &= \langle \Psi(\vec{r}, t) | \hat{H}_0 \Psi(\vec{r}, t) \rangle = \langle \Psi(\vec{r}, t) | E_n \Psi(\vec{r}, t) \rangle \\ &= E_n \langle \Psi(\vec{r}, t) | \Psi(\vec{r}, t) \rangle = E_n. \end{aligned} \tag{18}$$

Eller vi kunne ha argumentert med at alle de stasjonære tilstandene i summen som gir $\Psi(\vec{r}, t)$ har samme skarpt bestemte energi E_n slik at hele tilstanden også må ha det.

Videre er

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 \Psi(\vec{r}, t) &= \hat{L}^2 \left(\Phi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \sum_{m_l=-l}^{l} \hat{L}^2 \psi_{nlm_l}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \sum_{m_l=-l}^{l} \hbar^2 l(l+1) \psi_{nlm_l}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \\ &= \hbar^2 l(l+1) \Psi(\vec{r}, t), \end{aligned} \tag{19}$$

slik at

$$\begin{aligned}
\langle \hat{L}^2 \rangle &= \langle \Psi(\vec{r},t) | \hat{L}^2 \Psi(\vec{r},t) \rangle = \langle \Psi(\vec{r},t) | \hbar^2 l(l+1) \Psi(\vec{r},t) \rangle \\
&= \hbar^2 l(l+1) \langle \Psi(\vec{r},t) | \Psi(\vec{r},t) \rangle = \hbar^2 l(l+1). \qquad (20)
\end{aligned}$$

Igjen kunne vi argumentert med at alle de deltagende stasjonære tilstandene i summen som gir $\Psi(\vec{r},t)$ har samme størrelse på angulærmomentet.

Og til sist

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z \Psi(\vec{r},t) &= \hat{L}_z \left(\Phi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \sum_{m_l=-l}^{l} \hat{L}_z \psi_{nlm_l}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \sum_{m_l=-l}^{l} \hbar m_l \psi_{nlm_l}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \qquad (21)
\end{aligned}$$

Her må vi til med hele integrasjonsmaskineriet

$$\begin{aligned}
\langle \hat{L}_z \rangle &= \int \Psi^*(\vec{r},t) \hat{L}_z \Psi(\vec{r},t)\, d^3\vec{r} \\
&= \int \Phi^*(\vec{r}) e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \hat{L}_z \Phi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}\, d^3\vec{r} \\
&= \int \Phi^*(\vec{r}) \hat{L}_z \Phi(\vec{r})\, d^3\vec{r} \\
&= \frac{1}{2l+1} \sum_{m_l'=-l}^{l} \sum_{m_l=-l}^{l} \int \psi^*_{nlm_l'}(\vec{r}) \hbar m_l \psi_{nlm_l}(\vec{r})\, d^3\vec{r} \\
&= \frac{1}{2l+1} \sum_{m_l'=-l}^{l} \sum_{m_l=-l}^{l} \hbar m_l \int \psi^*_{nlm_l'}(\vec{r}) \psi_{nlm_l}(\vec{r})\, d^3\vec{r} \\
&= \frac{1}{2l+1} \sum_{m_l'=-l}^{l} \sum_{m_l=-l}^{l} \hbar m_l \delta_{n,n} \delta_{l,l} \delta_{m_l,m_l'} \\
&= \frac{1}{2l+1} \sum_{m_l=-l}^{l} \hbar m_l \\
&= 0, \qquad (22)
\end{aligned}$$

hvor vi har brukt (4) og (5) for å finne integralet, og hvor den siste summen blir null fordi ledd med positiv og negativ m_l kanselerer hverandre.

En mulig utvei for å slippe all regningen for $\hat{L}_z$ er å argumentere for at det å ta med alle dekomponeringer av et bestemt angulærmoment på like fot i en tilstand slik som i (10) må gi et totalbidrag på null.

En størrelse A er representert ved operatoren $\hat{A}$. Spredningen σ_A i tilstanden Ψ er definert slik:

$$\sigma_A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}. \tag{23}$$

h) Finn spredningen av størrelsene representert ved operatorene $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$ i tilstanden som er beskrevet ved tilstandsfunksjonen $\Psi(\vec{r}, t)$ i ligning (12).

Svar: Siden $\Psi(\vec{r}, t)$ i ligning (12) er en egenfunksjon for $\hat{H}_0$ og $\hat{L}^2$, se (16) og (19), så må de tilsvarende observable være skarpe, altså er $\sigma_E = 0$ og $\sigma_{L^2} = 0$. For L_z må vi først finne $\langle \hat{L}_z^2 \rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{L}_z^2 \rangle &= \int \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{L}_z^2 \Psi(\vec{r}, t)\, d^3\vec{r} \\
&= \int \Phi^*(\vec{r}) e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \hat{L}_z^2 \Phi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}\, d^3\vec{r} \\
&= \int \Phi^*(\vec{r}) \hat{L}_z^2 \Phi(\vec{r})\, d^3\vec{r} \\
&= \frac{1}{2l+1} \sum_{m_l'=-l}^{l} \sum_{m_l=-l}^{l} \int \psi_{nlm_l'}(\vec{r}) \hbar^2 m_l^2 \psi_{nlm_l}(\vec{r})\, d^3\vec{r} \\
&= \frac{1}{2l+1} \sum_{m_l'=-l}^{l} \sum_{m_l=-l}^{l} \hbar^2 m_l^2 \int \psi_{nlm_l'}(\vec{r}) \psi_{nlm_l}(\vec{r})\, d^3\vec{r} \\
&= \frac{1}{2l+1} \sum_{m_l'=-l}^{l} \sum_{m_l=-l}^{l} \hbar^2 m_l^2 \delta_{n,n} \delta_{l,l} \delta_{m_l, m_l'} \\
&= \frac{1}{2l+1} \sum_{m_l=-l}^{l} \hbar^2 m_l^2 \\
&= \frac{1}{2l+1} \cdot 2\hbar^2 \sum_{m_l=1}^{l} m_l^2 \\
&= \frac{1}{2l+1} \cdot 2\hbar^2 \frac{l(l+1)(2l+1)}{6} \\
&= \frac{l(l+1)}{3} \hbar^2,
\end{aligned} \tag{24}$$

hvor vi igjen har brukt (4) og (5) for å finne integralet, og hvor summen kan finnes fra Rottmann:

$$\sum_{x=1}^{n} x^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}. \tag{25}$$

Dette gir en spredning på

$$\sigma_{L_z} = \sqrt{\langle \hat{L}_z^2 \rangle - \langle \hat{L}_z \rangle^2} = \sqrt{\frac{l(l+1)}{3} \hbar^2} = \sqrt{\frac{l(l+1)}{3}} \hbar. \tag{26}$$

En kan legge merke til at for $l = 0$ er $\sigma_{L_z} = 0$. I dette tilfellet er L_z skarp, og $\Psi(\vec{r}, t)$ en egenfunksjon til $\hat{L}_z$.

La H-atomets tilstand ved tiden $t = 0$ være gitt ved tilstandsfunksjonen $\Phi(\vec{r})$ i ligning (10) og la oss tenke oss at vi foretar en idéell måling av L_z.

i) Hvor stor er sannsynligheten for å observere den bestemte verdien $\hbar m_l$ for L_z ved tiden $t = 0$?

Svar: Sannsynligheten P_{m_l} er gitt som absoluttverdikvadratet av koeffisienten c_{nlm_l} til egentilstanden (den stasjonære tilstanden) $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$ i summen som gir $\Psi(\vec{r}, t)$, altså

$$P_{m_l} = |c_{nlm_l}|^2 = \frac{1}{2l + 1}. \tag{27}$$

j) Vil denne sannsynligheten være avhengig av ved hvilken tid $t > 0$ målingen utføres?

Svar: Nei, sannsynligheten for å måle $\hbar m_l$ er alltid absoluttverdikvadratet av koeffisienten til egentilstanden.[1]

Vi lar nå H-atomet befinne seg i et homogent magnetfelt B og velger z-aksen langs magnetfeltet. Hamiltonoperatoren for systemet er da

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e}{2m} B \hat{L}_z, \tag{28}$$

der $-e$ er elektronets ladning og m er elektronets masse.

k) Bestem H-atomets energi i tilstanden $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$.

Svar: Energien er egenverdien til Hamiltonoperatoren:

$$\hat{H}\psi_{nlm_l}(\vec{r}) = (\hat{H}_0 + \frac{e}{2m} B \hat{L}_z)\psi_{nlm_l}(\vec{r}) = (E_n + \frac{e}{2m} B\hbar m_l)\psi_{nlm_l}(\vec{r}), \tag{29}$$

hvor vi har brukt (1) og (3). Dette gir en energi på

$$E_{nm_l} = E_n + \frac{e}{2m} B\hbar m_l, \tag{30}$$

hvor $m_l = -l, -l + 1, \ldots, l - 1, l$.

[1] Unntak vil ikke forekomme før vi ser på tidsavhengige potensial.

l) Er tilstanden $\Phi(\vec{r})$ i ligning (10) en energi-egentilstand for $\hat{H}$? Begrunn svaret.

Svar: Nei. Når vi lar operatoren $\hat{L}_z$ i (28) virke på tilstanden i (10) vil de forskjellige stasjonære tilstandene i summen gi forskjellige bidrag fordi de har ulike egenverdier for $\hat{L}_z$. Den nye tilstanden er ikke proporsjonal med (10).

Her kan man jo lurer på hvorfor dette er tilfelle når (10) er en egenfunksjon til $\hat{H}_0$, og $\hat{H}_0$ og $\hat{H}$ kommuterer, burde ikke kommuterende operatorer alltid ha samtidige egenfunksjoner? Jo, men det vi egentlig vet er at dersom to operatorer kommuterer så *finnes* det et sett med samtidige egenfunksjoner, det er imidlertid ikke slik at en egenfunksjon til den ene operatoren *nødvendigvis* er det for den andre. Dette unntaket vi her observerer opptrer imidlertid bare dersom vi har degenerasjon, som vi har for $\hat{H}$. Uten degenerasjon er det slik at en egenfunksjon til den ener operatoren er en egenfunksjon til den kommuterende partneren.

m) Bestem forventningsverdien til $\hat{H}$ i tilstanden $\Phi(\vec{r})$.

Svar:

$$\begin{aligned}\langle\hat{H}\rangle &= \int \Phi^*(\vec{r})(\hat{H}_0 + \frac{e}{2m}B\hat{L}_z)\Phi(\vec{r})\, d^3\vec{r} \\ &= \int \Phi^*(\vec{r})(E_n + \frac{e}{2m}B\hat{L}_z)\Phi(\vec{r})\, d^3\vec{r} \\ &= E_n + \frac{e}{2m}B\int \Phi^*(\vec{r})\hat{L}_z\Phi(\vec{r})\, d^3\vec{r}. \end{aligned} \tag{31}$$

Forventningsverdien for L_z som vi behøver har vi bestemt i (22), som ga

$$\int \Phi^*(\vec{r})\hat{L}_z\Phi(\vec{r})\, d^3\vec{r} = 0. \tag{32}$$

Altså er forventningsverdien til energien $\langle\hat{H}\rangle = E_n$. Forventningsverdien er altså den samme som uten magnetfeltet, hvor energien var skarp, men enkeltmålinger med magnetfeltet vil flukturer fordi tilstanden ikke er en egentilstand. Enkeltmålingene er imidlertid alltid en av egenverdiene i (30).

C Tilleggsoppgave (ikke obligatorisk)

Oppgave 4 Jord–sol systemet (fra Griffiths Kap.4)

Betrakt jord–sol systemet som en gravitasjonsanalog til hydrogenatomet.

a) Hva er funksjonen for den potensielle energien? (La m være jordmassen og M solmassen.)

Svar: Den potensielle energien i et gravitasjonsfelt er

$$V(r) = -\frac{G_N m M}{r}, \tag{33}$$

hvor $G_N = 6.67 \times 10^{-11}\ \mathrm{N\,m^2\,kg^{-2}}$ er gravitasjonskonstanten. Det betyr at fra Coulombpotensialet

$$V(r) = -\frac{ke^2}{r}, \tag{34}$$

så vil byttet

$$ke^2 \to G_N m M \tag{35}$$

gi gravitasjonsanalogien til hydrogenresultatene.

b) Hva er den gravitasjonelle "Bohrradiusen", a_g, for dette systemet? Finn det spesifikke tallet.

Svar: Bohrradiusen er

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e k e^2}, \tag{36}$$

hvor m_e er elektronmassen. I gravitasjonanalogien (35), og når vi bruker at det som er bundet i systemet er jorden slik at $m_e = m$, så er

$$\begin{aligned} a_g &= \frac{\hbar^2}{G_N m^2 M} \\ &= \frac{(1.055 \times 10^{-34}\ \mathrm{Js})^2}{6.67 \times 10^{-11}\ \mathrm{N\,m^2\,kg^{-2}} \cdot (5.9722 \times 10^{24}\ \mathrm{kg})^2 \cdot 1.988 \times 10^{30}\ \mathrm{kg}} \\ &= 2.35 \times 10^{-138}\ \mathrm{m}. \end{aligned} \tag{37}$$

Merk at det her (endelig?) er OK å regne med SI enheter da jorden og solens masse er makroskopiske størrelser, men med slike store tall må man sjekke nøye at svaret blir meningsfylt.

c) Skriv ned den gravitasjonelle "Bohrformelen" for energien, og vis, ved å sette E_n lik den klassiske energien til en planet i sirkelbane med radius r_o, at $n = \sqrt{r_o/a_g}$. Estimer fra dette kvantetallet n for jorden.

Svar: Energien for hydrogenatomet er gitt ved

$$E_n = -\frac{m_e (ke^2)^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}. \tag{38}$$

Fra gravitasjonsanalogien er den gravitasjonelle Bohrformelen

$$E_n = -\frac{m(G_N mM)^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{G_N^2 m^3 M^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}. \tag{39}$$

Energien til jordbanen er summen av den kinetiske og potensielle energien

$$E_o = K_o + V(r_o) = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{G_N mM}{r_o}. \tag{40}$$

Den kinetiske energien til jordbanen kan omskrives ved åbruke sentripedalakselerasjonen $a_s = v^2/r_o$ som må komme fra gravitasjonskraften:

$$F = \frac{G_N mM}{r_o^2} = ma_s = m\frac{v^2}{r_o}, \tag{41}$$

noe som gir

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{G_N mM}{2r_o}, \tag{42}$$

slik at

$$E_o = \frac{G_N mM}{2r_o} - \frac{G_N mM}{r_o} = -\frac{G_N mM}{2r_o}. \tag{43}$$

Med $E_n = E_o$ er

$$n^2 = \frac{G_N m^2 M}{\hbar^2} r_o = \frac{r_o}{a_g}, \tag{44}$$

slik at $n = \sqrt{r_o/a_g}$. Kvantetallet til jorden er da

$$n = \sqrt{\frac{r_o}{a_g}} = \sqrt{\frac{1.496 \times 10^{11}}{2.35 \times 10^{-138}\ \mathrm{m}}} = 2.52 \times 10^{74}. \tag{45}$$

d) Anta at jorden gikk til en lavere tilstand med kvantetall $n-1$. Hvor mye energi (i Joules) ville blitt frigitt? Hva ville bølgelengden til det utsendte fotonet (eller, mere sannsynlig, gravitonet) være? (Uttrykk svaret i lysår.)

Svar: Forskjellen i energi er gitt ved

$$\begin{aligned}
\Delta E = E_n - E_{n-1} &= \frac{G_N^2 m^3 M^2}{2\hbar^2}\left(-\frac{1}{n^2} + \frac{1}{(n-1)^2}\right) \\
&= \frac{G_N^2 m^3 M^2}{2\hbar^2}\left(\frac{n^2-(n-1)^2}{n^2(n-1)^2}\right) \\
&= \frac{G_N^2 m^3 M^2}{2\hbar^2}\left(\frac{2n-1}{n^2(n-1)^2}\right) \\
&\simeq \frac{G_N^2 m^3 M^2}{2\hbar^2} \cdot \frac{2}{n^3}, \\
&= \frac{G_N^2 m^3 M^2}{\hbar^2 n^3},
\end{aligned} \tag{46}$$

hvor vi har brukt at n er stor. Dette gir en utsendt energi på

$$\begin{aligned}
& \Delta E \\
= & \frac{(6.67 \times 10^{-11}\ \mathrm{N\,m^2\,kg^{-2}})^2 \cdot (5.9722 \times 10^{24}\ \mathrm{kg})^3 \cdot (1.988 \times 10^{30}\ \mathrm{kg})^2}{(1.055 \times 10^{-34}\ \mathrm{Js})^2 \cdot (2.52 \times 10^{74})^3} \\
= & \ 2.10 \times 10^{-41}\ \mathrm{J}. \qquad (47)
\end{aligned}$$

Bølgelengden λ til den tilhørende strålingen er gitt fra

$$E_G = \Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}, \tag{48}$$

som gir

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{6.63 \times 10^{-34}\ \mathrm{Js} \cdot 3.00 \times 10^{8}\ \mathrm{m\,s^{-1}}}{2.10 \times 10^{-41}\ \mathrm{J}} = 9.44 \times 10^{15}\ \mathrm{m}. \tag{49}$$

Et lysår er $1\,\mathrm{ly} = 9.46 \times 10^{15}$ m, slik at bølgelengden til dette fotonet/gravitonet er ca. ett lysår!

Burde så dette overraske? Tja. Jorden bruker altså ett år i banen rundt solen, noe som i høyeste grad er et system som kan beskrives klassisk. Siden høye kvantetall tilsvarer klassiske systemer burde jordens omløpstid være tidsskalaen ting skjer på. Det er enkelt å vise at omløpstiden er gitt ved

$$T = 2\pi\sqrt{r_o^3/G_N M}, \tag{50}$$

og fra det vi har sett over så kan bølgelengden til fotonet/gravitonet skrives

$$\lambda = 2\pi\sqrt{r_o^3/G_N M}c, \tag{51}$$

slik at $\lambda = Tc$. På samme måte er bølgelenden til lys fra atomer i overganger mellom svært eksiterte tilstander omtrentlig like lang som den lengden lyset vil ha tilbakelagt på den tiden det tar elektronet i en klassisk banebeskrivelse ågåen gang rundt. For folk som har holdt på litt med antenner er ikke dette så overraskende, frekvensen til strålingen (fotonet) er lik frekvensen til strømmen (elektronet i bane).