Eksamen FY1004 Innføring i kvantemekanikk
Lørdag 1. desember 2007
Løsninger

1a) Vi skal vise at posisjonsoperatoren x er Hermitesk, dvs. at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \psi^* \, (x\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; (x\psi)^* \, \phi$$

for to vilkårlige bølgefunksjoner ψ og ϕ. I disse integralene har vi forkortet skrivemåten og utelatt argumentet x til funksjonene ψ og ϕ under integraltegnet. Ligningen kan også skrives mer utførlig slik:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; (\psi(x))^* \, (x\,\phi(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; (x\,\psi(x))^* \, \phi(x) \; .$$

Den følger av at tallet x innenfor integralet er en reell størrelse (riktignok benevnt), slik at $x^* = x$, og

$$(\psi(x))^* \, (x\,\phi(x)) = x^* \, (\psi(x))^* \, \phi(x) = (x\,\psi(x))^* \, \phi(x) \; .$$

Vi skal dernest vise at impulsoperatoren p er Hermitesk, dvs. at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \psi^* \, (p\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; (p\psi)^* \, \phi$$

for to vilkårlige bølgefunksjoner ψ og ϕ. Siden

$$p\phi = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \phi = -\mathrm{i}\hbar\phi' \; ,$$

og tilsvarende $p\psi = -\mathrm{i}\hbar\psi'$, har vi at

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \psi^* \, (p\phi) &= -\mathrm{i}\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; (\psi(x))^* \, \phi'(x) \\
&= -\mathrm{i}\hbar \left((\psi(x))^* \, \phi(x) \Big|_{x=-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; (\psi'(x))^* \, \phi(x) \right) \\
&= \mathrm{i}\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; (\psi'(x))^* \, \phi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; (-\mathrm{i}\hbar\psi'(x))^* \, \phi(x) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; (p\psi)^* \, \phi \; .
\end{aligned}$$

Vi bruker delvis integrasjon, og vi antar at bølgefunksjonene $\psi(x)$ og $\phi(x)$ går mot null når $x \to \pm\infty$.

Hvordan kan vi rettferdiggjøre antagelsen om at en bølgefunksjon $\psi(x)$ skal gå mot null når $x \to \pm\infty$? Det kan kanskje begrunnes enklere ut fra fysikken enn ut fra matematikken. Fra et matematisk synspunkt er det lett nok å konstruere en bølgefunksjon $\psi(x)$ som ikke går mot null når $x \to \pm\infty$, men som likevel er kvadratisk integrerbar, altså oppfyller betingelsen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; |\psi|^2 < \infty \; .$$

Men slike bølgefunksjoner gir liten mening rent fysisk sett, for hvis vi eksperimenterer med en partikkel i et laboratorium her, kan vi trygt se bort fra enhver teoretisk mulighet for at den skulle befinne seg i en annen galakse langt borte.

1b) For en vilkårlig bølgefunksjon $\psi(x)$ er

$$\begin{aligned}[x,p]\,\psi(x) &= (xp-px)\,\psi(x) = \left(x\,\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,x\right)\psi(x)\\ &= -\mathrm{i}\hbar x\,\psi'(x) + \mathrm{i}\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,(x\,\psi(x)) = -\mathrm{i}\hbar\,x\,\psi'(x) + \mathrm{i}\hbar\,(\psi(x) + x\,\psi'(x))\\ &= \mathrm{i}\hbar\,\psi(x)\ .\end{aligned}$$

1c) Leibniz-reglene for kommutering, tilsvarende til Leibniz-regelen for derivasjon av et produkt, sier at

$$\begin{aligned}[AB,C] &= ABC - CAB = ACB - CAB + ABC - ACB = [A,C]\,B + A\,[B,C]\ ,\\ [A,BC] &= ABC - BCA = ABC - BAC + BAC - BCA = [A,B]\,C + B\,[A,C]\ .\end{aligned}$$

Når vi bruker dem, og dessuten bruker at $[p,x] = -[x,p] = -\mathrm{i}\hbar$, får vi at

$$\begin{aligned}[p^2,x] &= [p,x]\,p + p\,[p,x] = -2\mathrm{i}\hbar p\ ,\\ [x^2,p] &= [x,p]\,x + x\,[x,p] = \quad 2\mathrm{i}\hbar x\ .\end{aligned}$$

Vi får også at $[p^2,p] = 0$ og $[x^2,x] = 0$. Dermed er

$$\begin{aligned}[p^2,a] &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\ell}\,[p^2,x] + \mathrm{i}\,\frac{\ell}{\hbar}\,[p^2,p]\right) = \frac{1}{\sqrt{2}\,\ell}\,(-2\mathrm{i}\hbar p) = -\mathrm{i}\,\sqrt{2\hbar m\omega}\,p\ ,\\ [x^2,a] &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\ell}\,[x^2,x] + \mathrm{i}\,\frac{\ell}{\hbar}\,[x^2,p]\right) = \mathrm{i}\,\frac{\ell}{\sqrt{2}\,\hbar}\,2\mathrm{i}\hbar x = -\sqrt{2}\,\ell x = -\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,x\ ,\end{aligned}$$

og

$$\begin{aligned}[H,a] &= \frac{1}{2m}\,[p^2,a] + \frac{1}{2}\,m\omega^2\,[x^2,a] = -\mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2m}}\,p - \sqrt{\frac{\hbar m\omega^3}{2}}\,x\\ &= -\hbar\omega\left(\mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}\,p + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x\right) = -\hbar\omega a\ .\end{aligned}$$

Vi kan regne ut på samme måte at $[H,a^\dagger] = \hbar\omega a^\dagger$.

Eller vi kan gå ut fra relasjonen $[H,a] = -\hbar\omega a$, som vi nettopp beviste, og Hermitesk konjugere den. Husk at H er Hermitesk, $H^\dagger = H$. Det gir at

$$\begin{aligned}\hbar\omega a^\dagger &= (\hbar\omega a)^\dagger = (-[H,a])^\dagger = (-Ha + aH)^\dagger = -(Ha)^\dagger + (aH)^\dagger\\ &= -a^\dagger H^\dagger + H^\dagger a^\dagger = -a^\dagger H + Ha^\dagger = [H,a^\dagger]\ .\end{aligned}$$

Nå antar vi at $H\psi = E\psi$, og definerer $\psi_a = a\psi$ og $\psi_b = a^\dagger\psi$. Da er

$$\begin{aligned}H\psi_a &= Ha\psi = (Ha - aH + aH)\psi = [H,a]\psi + aH\psi = -\hbar\omega a\psi + aE\psi\\ &= (E-\hbar\omega)a\psi = (E-\hbar\omega)\psi_a\ .\end{aligned}$$

På samme måte er

$$\begin{aligned}H\psi_b &= Ha^\dagger\psi = (Ha^\dagger - a^\dagger H + a^\dagger H)\psi = [H,a^\dagger]\psi + a^\dagger H\psi = \hbar\omega a^\dagger\psi + a^\dagger E\psi\\ &= (E+\hbar\omega)a^\dagger\psi = (E+\hbar\omega)\psi_b\ .\end{aligned}$$

1d) At den harmoniske oscillatoren har en grunntilstand, følger av at Hamilton-operatoren er en sum av kvadratiske ledd (med p^2 og x^2), slik at det finnes en nedre grense (for eksempel lik 0) for energien.

Grunntilstanden ψ_0 har en energi E_0 som er så lav som mulig. Da må $a\psi_0 = 0$, for ellers ville $a\psi_0$ være en tilstand med lavere energi, $E_0 - \hbar\omega$.

Ligningen $a\psi_0 = 0$ er en førsteordens differensialligning,

$$\left(\frac{x}{\ell} + \ell\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_0(x) = 0 \quad\Longleftrightarrow\quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\psi_0(x) = -\frac{x}{\ell^2}\,\psi_0(x)\ .$$

For den oppgitte løsningen $\psi_0(x) = C\mathrm{e}^{-\alpha x^2}$ er

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\psi_0(x) = -2\alpha x\psi_0(x)\ .$$

Altså er dette en løsning av ligningen $a\psi_0 = 0$ dersom

$$\alpha = \frac{1}{2\ell^2} = \frac{m\omega}{2\hbar}\ .$$

Fordi den inneholder en vilkårlig konstant C, er dette den mest generelle løsningen av den førsteordens differensialligningen $a\psi_0 = 0$. Vi har at

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\,\psi_0(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,(-2\alpha x\psi_0(x)) = \left(-2\alpha + 4\alpha^2x^2\right)\psi_0(x)\ ,$$

og videre,

$$\begin{aligned}
H\psi_0 &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}\,m\omega^2x^2\right)\psi_0(x)\\
&= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-2\alpha + 4\alpha^2x^2\right) + \frac{1}{2}\,m\omega^2x^2\right)\psi_0(x)\\
&= \left(\frac{\hbar^2\alpha}{m} + \left(-\frac{2\hbar^2\alpha^2}{m} + \frac{1}{2}\,m\omega^2\right)x^2\right)\psi_0(x)\\
&= \frac{\hbar^2\alpha}{m}\,\psi_0(x) = \frac{\hbar\omega}{2}\,\psi_0(x)\ .
\end{aligned}$$

Det viser at grunntilstandsenergien er $E_0 = \hbar\omega/2$.

1e) Vi neglisjerer normaliseringen, og setter $\psi_0(x) = \mathrm{e}^{-\alpha x^2}$, med samme α som før. Da er

$$\begin{aligned}
\psi_1(x) &= a^\dagger\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\ell} - \ell\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\ell} + 2\ell\alpha x\right)\psi_0(x)\\
&= \frac{\sqrt{2}}{\ell}\,x\psi_0(x) = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\,x\mathrm{e}^{-\alpha x^2}\ .
\end{aligned}$$

Igjen neglisjerer vi normaliseringen, og redefinerer $\psi_1(x) = x\psi_0(x) = x\mathrm{e}^{-\alpha x^2}$. Da er

$$
\begin{aligned}
\psi_2(x) &= a^\dagger \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\ell} - \ell \, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \right) x\psi_0(x) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x^2}{\ell} \, \psi_0(x) - \ell\psi_0(x) + 2\ell\alpha x^2 \psi_0(x) \right) \\
&= \frac{\ell}{\sqrt{2}} \left(\frac{x^2}{\ell^2} - 1 + 2\alpha x^2 \right) \psi_0(x) \\
&= \frac{\ell}{\sqrt{2}} \left(\frac{2x^2}{\ell^2} - 1 \right) \psi_0(x) \; .
\end{aligned}
$$

Vi kan da redefinere, for eksempel,

$$
\psi_2(x) = \left(\frac{2x^2}{\ell^2} - 1 \right) \psi_0(x) = \left(\frac{2x^2}{\ell^2} - 1 \right) \mathrm{e}^{-\alpha x^2} \; .
$$

I følge punkt c) har tilstandene ψ_1 og ψ_2 energiene $E_1 = E_0 + \hbar\omega = 3\hbar\omega/2$ og $E_2 = E_1 + \hbar\omega = E_0 + 2\hbar\omega = 5\hbar\omega/2$.

1f) Vi må ha $\eta^2 = 1$, det vil si at $\eta = +1$ eller $\eta = -1$.

Hvis nemlig $\psi(-x) = \eta\psi(x)$, underforstått: for alle verdier av x, så må

$$
\psi(x) = \psi(-(-x)) = \eta\psi(-x) = \eta^2\psi(x) \; ,
$$

igjen underforstått: for alle verdier av x. Det må finnes minst en verdi av x der $\psi(x) \neq 0$ (en bølgefunksjon som er null overalt, har ingen mening), og siden $\psi(x) = \eta^2\psi(x)$ også der $\psi(x) \neq 0$, så må $\eta^2 = 1$.

1g) Vi ser at

$$
\psi_0(-x) = \mathrm{e}^{-\alpha(-x)^2} = \mathrm{e}^{-\alpha x^2} = \psi_0(x) \; ,
$$

det vil si at grunntilstanden ψ_0 har positiv paritet, $\eta = +1$. Det er forøvrig typisk for grunntilstanden til et system der Hamilton-operatoren er refleksjonssymmetrisk.

For de nest laveste energiegentilstandene gjelder at

$$
\psi_1(-x) = (-x)\mathrm{e}^{-\alpha(-x)^2} = -x\mathrm{e}^{-\alpha x^2} = -\psi_1(x) \; ,
$$

og

$$
\psi_2(-x) = \left(\frac{2(-x)^2}{\ell^2} - 1 \right) \mathrm{e}^{-\alpha(-x)^2} = \left(\frac{2x^2}{\ell^2} - 1 \right) \mathrm{e}^{-\alpha x^2} = \psi_2(x) \; .
$$

ψ_1 har altså negativ paritet, $\eta = -1$. mens ψ_2 igjen har positiv paritet, $\eta = +1$.

Det er da nærliggende å gjette at annenhver eksitert tilstand har positiv paritet, og annenhver har negativ paritet. Tilstanden ψ_n, med energi $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, skal altså ha paritet $\eta = (-1)^n$.

Det kan bevises ved induksjon. Vi vet at ψ_0 har paritet $\eta = +1 = (-1)^0$. Anta at ψ_k har paritet $\eta = (-1)^k$, da har $\psi_{k+1} = a^\dagger\psi_k$ motsatt paritet $\eta = -(-1)^k = (-1)^{k+1}$, fordi operatoren

$$
a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\ell} - \ell \, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \right)
$$

snur om pariteten til den tilstanden den opererer på. Anta nemlig at $\psi(-x) = \eta\psi(x)$, at $\phi(x) = x\psi(x)$, og at $\chi(x) = (\mathrm{d}/\mathrm{d}x)\psi(x) = \psi'(x)$. Da er

$$\phi(-x) = (-x)\psi(-x) = -\eta x\psi(x) = -\eta\phi(x) \; ,$$

og

$$\chi(-x) = \psi'(-x) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\psi(-x) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,(\eta\psi(x)) = -\eta\psi'(x) = -\eta\chi(x) \; .$$

1h) Det finnes rikelig av bølgefunksjoner som ikke har noen bestemt paritet (og som heller ikke løser noen Schrödingerligning!). En vilkårlig bølgefunksjon $\psi(x)$ kan skrives som en sum $\psi(x) = \psi_+(x) + \psi_-(x)$, dersom vi definerer

$$\begin{aligned} \psi_+(x) &= \frac{1}{2}\,(\psi(x) + \psi(-x)) \; , \\ \psi_-(x) &= \frac{1}{2}\,(\psi(x) - \psi(-x)) \; . \end{aligned}$$

Det gir at

$$\begin{aligned} \psi_+(-x) &= \frac{1}{2}\,(\psi(-x) + \psi(x)) = \psi_+(x) \; , \\ \psi_-(-x) &= \frac{1}{2}\,(\psi(-x) - \psi(x)) = -\psi_-(x) \; . \end{aligned}$$

Med andre ord: ψ_+ er den delen av ψ som har positiv paritet, og ψ_- er den delen som har negativ paritet. Hvis det skulle slumpe til at ψ har positiv paritet, at $\psi(-x) = \psi(x)$, så er $\psi_+(x) = \psi(x)$ og $\psi_-(x) = 0$. Hvis derimot ψ har negativ paritet, $\psi(-x) = -\psi(x)$, så er $\psi_+(x) = 0$ og $\psi_-(x) = \psi(x)$. Hvis ψ ikke har noen bestemt paritet, så er ψ_+ og ψ_- to forskjellige bølgefunksjoner, ingen av dem identisk lik null.

Derimot finnes det ingen energiegentilstander til den endimensjonale harmoniske oscillatoren som ikke har bestemt paritet. Det har vi allerede sett. Det kan dessuten bevises, som følger.

For det første er energispektret til den harmoniske oscillatoren uten degenerasjon, med andre ord, det finnes bare en energiegentilstand for hver energiegenverdi. Grunnen er at den tidsuavhengige Schrödingerligningen $H\psi = E\psi$ er en andreordens ordinær differensialligning med randbetingelsene $\psi(x) \to 0$ for $x \to \pm\infty$. En slik ligning med slike randbetingelser har maksimalt en løsning (opp til en proporsjonalitetskonstant).

For det andre gjelder det at hvis ψ er en energiegentilstand, dvs. at $H\psi = E\psi$, og vi definerer bølgefunksjonene ψ_+ og ψ_- som ovenfor, så finner vi ved innsetting at $H\psi_+ = E\psi_+$ og $H\psi_- = E\psi_-$. Men vi kan ikke ha at ψ_+ og ψ_- er to forskjellige energiegenfunksjoner med samme energi E. Da står det igjen bare to muligheter. Enten har ψ positiv paritet, slik at $\psi = \psi_+$ og $\psi_- = 0$, eller så har ψ negativ paritet, slik at $\psi = \psi_-$ og $\psi_+ = 0$.

2a) Sett inn $\psi(x,y,z) = f(x)\,g(y)\,h(z)$ i den tidsuavhengige Schrödingerligningen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 + \frac{1}{2}\,m\omega^2 r^2\right)\psi = E\psi \ ,$$

og divider hele ligningen med ψ. Det gir ligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{f''(x)}{f(x)} + \frac{g''(y)}{g(y)} + \frac{h''(z)}{h(z)}\right) + \frac{1}{2}\,m\omega^2(x^2+y^2+z^2) = E \ .$$

Denne ligningen skal gjelde for alle verdier av de tre uavhengige variablene x, y og z. Strengt tatt må vi ta forbehold for de punktene der enten $f(x) = 0$, $g(y) = 0$ eller $h(z) = 0$, men det ser vi på som uvesentlig. Den eneste måten for å få venstresiden av ligningen til å bli konstant lik E, er at de x-avhengige leddene gir et konstant bidrag E_x, samtidig som de y-avhengige leddene gir et konstant bidrag E_y og de z-avhengige leddene gir et konstant bidrag E_z. Altså må de tre funksjonene $f(x)$, $g(y)$ og $h(z)$ oppfylle de endimensjonale Schrödingerligningene

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\,f''(x) + \frac{1}{2}\,m\omega^2 x^2\,f(x) &= E_x\,f(x) \ , \\
-\frac{\hbar^2}{2m}\,g''(y) + \frac{1}{2}\,m\omega^2 y^2\,g(y) &= E_y\,g(y) \ , \\
-\frac{\hbar^2}{2m}\,h''(z) + \frac{1}{2}\,m\omega^2 z^2\,h(z) &= E_z\,h(z) \ .
\end{aligned}$$

Den totale energien E i tre dimensjoner kan da ses på som en sum av tre endimensjonale bidrag, $E = E_x + E_y + E_z$, der

$$E_x = \hbar\omega\left(n_x + \frac{1}{2}\right) \ , \qquad E_y = \hbar\omega\left(n_y + \frac{1}{2}\right) \ , \qquad E_z = \hbar\omega\left(n_z + \frac{1}{2}\right) \ ,$$

og der n_x, n_y og n_z er tre uavhengige kvantetall, $n_x = 0, 1, 2, \ldots$, $n_y = 0, 1, 2, \ldots$ og $n_z = 0, 1, 2, \ldots$. Vi har altså energinivåene

$$E = \hbar\omega\left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right) \ .$$

Vi kan skrive $n = n_x + n_y + n_z = 0, 1, 2, \ldots$, og

$$E = E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{3}{2}\right) \ .$$

2b) Den laveste energien er

$$E = E_0 = \frac{3}{2}\,\hbar\omega \ ,$$

som vi får med $n = n_x + n_y + n_z = 0$, det betyr at $n_x = n_y = n_z = 0$. Grunntilstanden er ikke degenerert, det finnes bare en slik tilstand.

Den nest laveste energien er

$$E = E_1 = \frac{5}{2}\,\hbar\omega \ ,$$

som vi får med $n = n_x + n_y + n_z = 1$. Her finnes det tre muligheter for kvantetallene n_x, n_y og n_z, idet ett av dem må være 1 og de to andre må være 0. Det første eksiterte energinivået er altså tre ganger degenerert: det finnes tre tilstander med samme energi.

2c) De mulige verdiene er $\ell = 0, 1, 2, \ldots$ og $m_\ell = -\ell, -\ell + 1, \ldots, \ell$.

2d) Vi må sette inn

$$R(r) = R_0(r) = \mathrm{e}^{-\beta r^2}$$

i ligningen

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{r} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \right) + \frac{1}{2}\, m\omega^2 r^2 \right\} R(r) = E\, R(r) \; .$$

Vi har at

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\, \mathrm{e}^{-\beta r^2} = -2\beta r\, \mathrm{e}^{-\beta r^2} \; ,$$

og

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\, \mathrm{e}^{-\beta r^2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \left(-2\beta r\, \mathrm{e}^{-\beta r^2} \right) = \left(-2\beta + 4\beta^2 r^2 \right) \mathrm{e}^{-\beta r^2} \; .$$

Innsatt gir det ligningen

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(-2\beta + 4\beta^2 r^2 - 4\beta \right) + \frac{1}{2}\, m\omega^2 r^2 \right\} \mathrm{e}^{-\beta r^2} = E\, \mathrm{e}^{-\beta r^2} \; .$$

Innholdet i den store parentesen her må ha den konstante verdien E, det kan ikke avhenge av r, derfor må

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\, 4\beta^2 + \frac{1}{2}\, m\omega^2 = 0 \; .$$

Vi må ha $\beta > 0$, for at bølgefunksjonen skal gå mot null når $r \to \infty$. Løsningen er

$$\beta = \frac{m\omega}{2\hbar} \; ,$$

identisk med konstanten α fra den endimensjonale harmoniske oscillatoren i oppgave 1. Energien er

$$E = E_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\, 6\beta = \frac{3}{2}\, \hbar\omega \; .$$

Tilsvarende må vi sette inn

$$R(r) = R_1(r) = r\, \mathrm{e}^{-\gamma r^2}$$

i ligningen

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{r} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{2}{r^2} \right) + \frac{1}{2}\, m\omega^2 r^2 \right\} R(r) = E\, R(r) \; .$$

Vi har at

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \left(r\, \mathrm{e}^{-\gamma r^2} \right) = (1 - 2\gamma r^2)\, \mathrm{e}^{-\gamma r^2} = \frac{1 - 2\gamma r^2}{r}\, r\, \mathrm{e}^{-\gamma r^2} \; ,$$

og

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} \left(r\, \mathrm{e}^{-\gamma r^2} \right) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \left((1 - 2\gamma r^2)\, \mathrm{e}^{-\gamma r^2} \right) = \left(-4\gamma r + (1 - 2\gamma r^2)(-2\gamma r) \right) \mathrm{e}^{-\gamma r^2} \\ &= \left(-6\gamma + 4\gamma^2 r^2 \right) r\, \mathrm{e}^{-\gamma r^2} \; . \end{aligned}$$

Innsatt gir det ligningen

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-6\gamma+4\gamma^2r^2+\frac{2(1-2\gamma r^2)}{r^2}-\frac{2}{r^2}\right)+\frac{1}{2}\,m\omega^2r^2\right\}r\,\mathrm{e}^{-\gamma r^2}=E\,r\,\mathrm{e}^{-\gamma r^2}\ .$$

For at innholdet i den store parentesen ikke skal avhenge av r, må vi ha

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,4\gamma^2+\frac{1}{2}\,m\omega^2=0\ .$$

Det gir at

$$\gamma=\frac{m\omega}{2\hbar}\ ,$$

også identisk med konstanten α fra oppgave 1. Energien er

$$E=E_1=\frac{\hbar^2}{2m}\,10\gamma=\frac{5}{2}\,\hbar\omega\ .$$

2e) Faktoriseringsforsøk:

$$\psi_0=\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\,\mathrm{e}^{-\beta r^2}=\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\,\left(\mathrm{e}^{-\beta x^2}\right)\left(\mathrm{e}^{-\beta y^2}\right)\left(\mathrm{e}^{-\beta z^2}\right)\ .$$

$$\psi_1=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,r\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\,\mathrm{e}^{-\gamma r^2}=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,(x+\mathrm{i}y)\,\mathrm{e}^{-\gamma r^2}\ .$$

$$\psi_2=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,r\cos\theta\,\mathrm{e}^{-\gamma r^2}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\left(\mathrm{e}^{-\gamma x^2}\right)\left(\mathrm{e}^{-\gamma y^2}\right)\left(z\,\mathrm{e}^{-\gamma z^2}\right)\ .$$

$$\psi_3=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,r\sin\theta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\,\mathrm{e}^{-\gamma r^2}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,(x-\mathrm{i}y)\,\mathrm{e}^{-\gamma r^2}\ .$$

Vi ser at ψ_0 og ψ_2 kan faktoriseres uten videre. Lineærkombinasjoner som kan faktoriseres, er dessuten

$$\begin{aligned}-\psi_1+\psi_3\ &=\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\,\left(x\,\mathrm{e}^{-\gamma x^2}\right)\left(\mathrm{e}^{-\gamma y^2}\right)\left(\mathrm{e}^{-\gamma z^2}\right)\ ,\\ -\psi_1-\psi_3\ &=\mathrm{i}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\,\left(\mathrm{e}^{-\gamma x^2}\right)\left(y\,\mathrm{e}^{-\gamma y^2}\right)\left(\mathrm{e}^{-\gamma z^2}\right)\ .\end{aligned}$$

Husk at $\gamma=\beta=\alpha$, slik at de faktorene $f(x)$, $g(y)$ og $h(z)$ som vi finner her, kjenner vi igjen som energiegenfunksjoner for den endimensjonale harmoniske oscillatoren.