

Eksamen FY1004 Innføring i kvantemekanikk

Tirsdag 22. mai 2007

Løsninger

- 1a) Et hydrogenlikt atom har ett elektron med masse m og ladning $-e$ som er bundet til en atomkjerne med ladning Ze . Siden kjernen har mye større masse enn elektronet, antar vi at den ligger i ro i origo, og at bare elektronet beveger seg. Her ser vi bort fra egenspinnet til elektronet.

Den potensielle energien til elektronet i posisjonen \vec{r} er gitt ved Coulomb-potensialet

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (1)$$

der $r = |\vec{r}|$. Hamilton-operatoren for elektronet er

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r). \quad (2)$$

Vis at når $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, er

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r}, \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r}, \quad \frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r}.$$

Bruk det til å vise at for en vilkårlig funksjon $f = f(r)$ er

$$\nabla^2 f(r) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) f(r) = f''(r) + \frac{2}{r} f'(r).$$

Bevis nr. 1:

$$\frac{\partial}{\partial x} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \frac{2x}{2\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = \frac{x}{r},$$

og tilsvarende for de y - og z -deriverte.

Bevis nr. 2:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(r) = \frac{\partial}{\partial x} \left(f'(r) \frac{x}{r} \right) = f''(r) \frac{x^2}{r^2} + f'(r) \left(\frac{1}{r} - \frac{x}{r^2} \frac{x}{r} \right) = f''(r) \frac{x^2}{r^2} + f'(r) \left(\frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3} \right),$$

og tilsvarende for de y - og z -deriverte.

Når vi legger sammen bidragene for x , y og z , får vi at

$$\nabla^2 f(r) = f''(r) \frac{x^2 + y^2 + z^2}{r^2} + f'(r) \left(\frac{3}{r} - \frac{x^2 + y^2 + z^2}{r^3} \right) = f''(r) + \frac{2}{r} f'(r).$$

- 1b) Vis at for en bestemt verdi av konstanten β er bølgefunksjonen

$$\psi_0(\vec{r}) = N_0 e^{-\beta r},$$

med en normeringskonstant N_0 , en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen

$$H\psi_0 = E_0\psi_0.$$

Uttrykk den spesielle verdien av β ved Bohr-radien a_0 , definert som

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2m}.$$

Hva er energien E_0 for denne tilstanden?

Er pariteten positiv eller negativ?

Denne tilstanden er faktisk grunntilstanden til atomet. Hvilken egenskap (eller hvilke egenskaper) er det bølgefunksjonen ψ_0 har som kan tyde på at den er grunntilstanden?

Vi bruker resultatet fra 1a) og får at

$$\nabla^2 e^{-\beta r} = \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) e^{-\beta r} = \left(\beta^2 - \frac{2\beta}{r} \right) e^{-\beta r} .$$

Det gir at

$$H e^{-\beta r} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) e^{-\beta r} = \left(-\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \beta}{mr} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) e^{-\beta r} .$$

Her må vi velge β slik at innholdet i den store parentesen blir konstant (uavhengig av r), den konstanten er da E_0 . Vi må eliminere de to leddene i parentesen som inneholder $1/r$, og det gjør vi ved å velge

$$\beta = \frac{Ze^2 m}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} = \frac{Z}{a_0} .$$

Dermed finner vi energien

$$E_0 = -\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 Z^2}{2ma_0^2} = -\frac{1}{2} \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} = \frac{1}{2} V\left(\frac{a_0}{Z}\right) .$$

Energien E_0 kan skrives på mange andre måter også, for eksempel:

$$E_0 = -\frac{Z^2}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m}{\hbar^2} = -\frac{Z^2}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \right)^2 mc^2 = -\frac{Z^2 \alpha^2}{2} mc^2 ,$$

der $\alpha = 1/137,04$ er finstrukturkonstanten, og mc^2 er hvileenergien til elektronet.

Pariteten til denne tilstanden er positiv: fordi $|- \vec{r}| = |\vec{r}| = r$, er $\psi_0(-\vec{r}) = \psi_0(\vec{r})$

Den sterkeste indikasjonen på at dette er grunntilstanden til atomet, er det faktum at den er en energiegentilstand slik at bølgefunksjonen $\psi_0(\vec{r})$ er positiv overalt (om vi velger normeringskonstanten N_0 positiv), det betyr spesielt at bølgefunksjonen er helt uten nullpunkt.

Logikken er kort fortalt slik. I hydrogenatomet (og i det hydrogenlike atomet) er den potensielle energien $V(r)$ alltid negativ, mens den kinetiske energien alltid er positiv. Skal vi minimalisere den totale energien, som er kinetisk pluss potensiell energi, må vi gjøre den potensielle energien mest mulig negativ, ved å holde elektronet nærmest mulig atomkjernen. Men jo mer vi skviser elektronet innenfor et volum nært kjernen, jo mer øker vi den kinetiske energien (intuitivt sett kan vi skylde på Heisenbergs usikkerhetsrelasjon). Kompromisset som gir grunntilstanden, er en bølgefunksjon som er konsentrert nær atomkjernen, samtidig som den varierer i rommet så lite som mulig for å minimalisere den kinetiske energien. Hvert nullpunkt i bølgefunksjonen krever at den varierer raskere, og det øker den kinetiske energien.

Et annet typisk kjennetegn for grunntilstanden i et potensial som er refleksjonssymmetrisk, er at bølgefunksjonen har positiv paritet, igjen for at den skal ha færrest mulig nullpunkt.

Et tredje typisk kjennetegn for grunntilstanden i et potensial som er rotasjonssymmetrisk, er at bølgefunksjonen er rotasjonssymmetrisk, det vil si at den ikke har noen vinkelavhengighet, og følgelig er en egentilstand for \vec{L}^2 med kvantetall $\ell = 0$.

1c) Vis at for en bestemt verdi av konstanten γ er bølgefunksjonen

$$\psi_1(\vec{r}) = N_1 x e^{-\gamma r} ,$$

med en normeringskonstant N_1 , en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen

$$H\psi_1 = E_1\psi_1 .$$

Uttrykk γ ved Bohr-radien a_0 .

Hva er energien E_1 for denne tilstanden, og hva er pariteten?

For det første er

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} (x e^{-\gamma r}) = \frac{\partial}{\partial x} \left(e^{-\gamma r} + x \frac{\partial}{\partial x} e^{-\gamma r} \right) = 2 \frac{\partial}{\partial x} e^{-\gamma r} + x \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\gamma r} .$$

For det andre og tredje er

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} (x e^{-\gamma r}) = x \frac{\partial^2}{\partial y^2} e^{-\gamma r} , \quad \frac{\partial^2}{\partial z^2} (x e^{-\gamma r}) = x \frac{\partial^2}{\partial z^2} e^{-\gamma r} .$$

Vi legger sammen og får at

$$\begin{aligned} \nabla^2 (x e^{-\gamma r}) &= 2 \frac{\partial}{\partial x} e^{-\gamma r} + x \nabla^2 e^{-\gamma r} = -\frac{2\gamma x}{r} e^{-\gamma r} + x \left(\gamma^2 - \frac{2\gamma}{r} \right) e^{-\gamma r} \\ &= \left(\gamma^2 - \frac{4\gamma}{r} \right) x e^{-\gamma r} . \end{aligned}$$

Følgelig er

$$H(x e^{-\beta r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) (x e^{-\beta r}) = \left(-\frac{\hbar^2 \gamma^2}{2m} + \frac{2\hbar^2 \gamma}{mr} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) x e^{-\beta r} .$$

Her igjen må vi velge γ slik at vi står igjen med en konstant innenfor parentesen, den konstanten blir energien E_1 . Vi må velge

$$\gamma = \frac{1}{2} \frac{Ze^2 m}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} = \frac{Z}{2a_0} = \frac{\beta}{2} ,$$

og det gir energien

$$E_1 = -\frac{\hbar^2 \gamma^2}{2m} = \frac{E_0}{4} .$$

Når E_0 er energien i grunntilstanden, er E_1 det første eksiterte energinivået.

Denne tilstanden har negativ paritet, idet

$$\psi_1(-\vec{r}) = N_1 (-x) e^{-\gamma r} = -\psi_1(\vec{r}) .$$

- 1d) To andre løsninger av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen med den samme energien E_1 er

$$\psi_2(\vec{r}) = N_1 y e^{-\gamma r}, \quad \psi_3(\vec{r}) = N_1 z e^{-\gamma r}.$$

Vis at de tre tilstandene ψ_1 , ψ_2 og ψ_3 er ortogonale, at for eksempel

$$\int d^3\vec{r} (\psi_1(\vec{r}))^* \psi_2(\vec{r}) = 0.$$

En naturlig fysisk tolkning av de tre tilstandene er at de er orientert henholdsvis langs x -aksen, y -aksen og z -aksen. Hvorfor?

(Tenk for eksempel på hvor det er størst og minst sannsynlighet for å finne elektronet.)

Bevis for at ψ_1 og ψ_2 er ortogonale:

$$\begin{aligned} \int d^3\vec{r} (\psi_1(\vec{r}))^* \psi_2(\vec{r}) &= |N_1|^2 \int d^3\vec{r} xy e^{-2\gamma r} \\ &= |N_1|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dx x \int_{-\infty}^{\infty} dy y e^{-2\gamma r} = 0. \end{aligned}$$

Integralet over y gir null fordi integranden er antisymmetrisk om $y = 0$. At ψ_1 og ψ_3 er ortogonale, og likeså ψ_2 og ψ_3 , bevises på tilsvarende måte.

Hvis elektronet er i tilstanden som beskrives av bølgefunksjonen ψ_1 , er sannsynligheten for at det er å finne innenfor det infinitesimale volumelementet $d^3\vec{r}$ omkring \vec{r} , lik $\rho_1(\vec{r}) d^3\vec{r}$, der ρ_1 er sannsynlighetstettheten,

$$\rho_1(\vec{r}) = |\psi_1(\vec{r})|^2 = |N_1|^2 x^2 e^{-2\gamma r}.$$

I en gitt avstand r fra origo er sannsynlighetstettheten minst, nemlig null, i yz -planet (der $x = 0$), og størst på x -aksen (der $x = \pm r$, $y = z = 0$). Det tolker vi slik at tilstanden ψ_1 er orientert langs x -aksen. Tilsvarende er tilstandene ψ_2 og ψ_3 er orientert henholdsvis langs y -aksen og z -aksen.

Siden x -aksen, y -aksen og z -aksen er ortogonale i det fysiske tredimensjonale rommet, er det vel ganske naturlig at bølgefunksjonene ψ_1 , ψ_2 og ψ_3 er ortogonale i Hilbert-rommet?

- 1e) Det er mer vanlig å klassifisere tilstandene til hydrogenatomet ved hjelp av hovedkvantetallet n og dreieimpuls-kvantetallene ℓ og m_ℓ . En bølgefunksjon karakterisert ved disse kvantetallene kan faktoriseres i en radialfunksjon R og en vinkelfunksjon Y , slik:

$$\psi_{n\ell m_\ell}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi).$$

Polarkoordinatene (r, θ, φ) er definert ved at

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta.$$

De sfæriske harmoniske funksjonene $Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi)$ er egenfunksjoner for \vec{L}^2 og L_z med egenverdier henholdsvis $\ell(\ell + 1)\hbar^2$ og $m_\ell\hbar$, der $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ er banedreieimpulsen til elektronet. De normeres slik at vinkelintegralet av $|Y_{\ell m_\ell}|^2$ er lik 1:

$$\int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi |Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi)|^2 = 1.$$

Bølgefunksjonene for $n = 2$ og $\ell = 1$ har formen

$$\psi_{21m_\ell}(r, \theta, \varphi) = N_2 r e^{-\gamma r} Y_{1m_\ell}(\theta, \varphi),$$

der N_2 er en normeringskonstant. De sfæriske harmoniske funksjonene med $\ell = 1$ er

$$\begin{aligned} Y_{11}(\theta, \varphi) &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}, \\ Y_{10}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \\ Y_{1,-1}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}. \end{aligned}$$

Skriv ψ_{211} , ψ_{210} og $\psi_{21,-1}$ som lineærkombinasjoner av bølgefunksjonene ψ_1 , ψ_2 og ψ_3 definert ovenfor under punktene c) og d).

Vi velger normeringskonstantene N_1 og N_2 som positive reelle tall, og normeringskravet til en bølgefunksjon $\psi(\vec{r})$ er at

$$\int d^3\vec{r} |\psi(\vec{r})|^2 = 1.$$

Det er ikke nødvendig å regne ut eksplisitte uttrykk for konstantene N_1 og N_2 .

Ta først bølgefunksjonen

$$\psi_{210}(r, \theta, \varphi) = N_2 r e^{-\gamma r} Y_{10}(\theta, \varphi) = N_2 r e^{-\gamma r} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = N_2 \sqrt{\frac{3}{4\pi}} z e^{-\gamma r}.$$

Vi ser uten videre at

$$\psi_{210} = \psi_3 \quad \text{og} \quad N_1 = N_2 \sqrt{\frac{3}{4\pi}}.$$

Da ser vi også at

$$\begin{aligned} \psi_{211} &= N_2 r e^{-\gamma r} Y_{11}(\theta, \varphi) = -N_2 r e^{-\gamma r} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta (\cos \varphi + i \sin \varphi) \\ &= -N_2 \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (x + iy) e^{-\gamma r} = -\frac{N_1}{\sqrt{2}} (x + iy) e^{-\gamma r} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 + i\psi_2). \end{aligned}$$

Og til slutt,

$$\begin{aligned} \psi_{21,-1} &= N_2 r e^{-\gamma r} Y_{1,-1}(\theta, \varphi) = N_2 r e^{-\gamma r} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta (\cos \varphi - i \sin \varphi) \\ &= N_2 \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (x - iy) e^{-\gamma r} = \frac{N_1}{\sqrt{2}} (x - iy) e^{-\gamma r} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 - i\psi_2). \end{aligned}$$

- 2a) Også i denne oppgaven ser vi på bevegelsen til et elektron i et hydrogenlikt atom, beskrevet av Hamiltonoperatoren H gitt i ligningene (1) og (2) i forrige oppgave.

Anta at den tidsuavhengige bølgefunksjonen $\psi = \psi(\vec{r})$ er en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen, $H\psi = E\psi$, der E er energien.

Anta videre at tilstanden til elektronet ved tiden $t = 0$ er $\Psi(\vec{r}, 0) = \psi(\vec{r})$.

Vis at da er tilstanden til elektronet ved en vilkårlig tid t gitt ved den tidsavhengige bølgefunksjonen

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \psi(\vec{r}).$$

Selv om bølgefunksjonen $\Psi(\vec{r}, t)$ er tidsavhengig, kaller vi dette en stasjonær tilstand. Hvorfor?

Bølgefunksjonen $\Psi = \Psi(\vec{r}, t)$ er en løsning av den tidsavhengige Schrödinger-ligningen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi.$$

Er den også en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen $H\Psi = E\Psi$?

Begrunn svaret.

Den naturlige svarrekkefølgen er litt forskjellig fra spørsmålsrekkefølgen. Vi opererer med Hamilton-operatoren på den tidsavhengige bølgefunksjonen $\Psi = \Psi(\vec{r}, t)$, og får:

$$H \Psi = H \left(e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \psi(\vec{r}) \right) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et} H \psi(\vec{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et} E \psi(\vec{r}) = E \Psi .$$

Det viser at Ψ er en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen $H\Psi = E\Psi$.

Derav følger at Ψ er en løsning av den tidsavhengige Schrödinger-ligningen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H \Psi .$$

Høyresiden av denne ligningen er jo $E\Psi$, og det samme er venstresiden:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \psi(\vec{r}) \right) = E e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \psi(\vec{r}) = E \Psi .$$

Den tidsavhengige Schrödinger-ligningen bestemmer hvordan en bølgefunksjon forandrer seg med tiden. Den er førsteordens i den tidsderiverte, og derfor er løsningen entydig gitt når bølgefunksjonen ved ett tidspunkt, for eksempel $t = 0$, er kjent.

Å finne bølgefunksjonen ved en vilkårlig tid t , gitt at bølgefunksjonen ved tiden $t = 0$ er $\psi(\vec{r})$, er derfor det samme som å finne en tidsavhengig bølgefunksjon $\Psi(\vec{r}, t)$ som er en løsning av den tidsavhengige Schrödinger-ligningen, og som dessuten har den egenskapen at $\Psi(\vec{r}, 0) = \psi(\vec{r})$. Det har vi allerede gjort.

Den oppgitte tidsavhengige bølgefunksjonen $\Psi(\vec{r}, t)$ kalles en stasjonær tilstand fordi at hvis vi bruker den til å beregne forventningsverdien av en hvilken som helst observabel A som ikke i seg selv er eksplisitt tidsavhengig, så får vi et resultat som ikke avhenger av tiden t :

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \int d^3\vec{r} (\Psi(\vec{r}, t))^* (A\Psi(\vec{r}, t)) = \int d^3\vec{r} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \psi(\vec{r}) \right)^* \left(A \left(e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \psi(\vec{r}) \right) \right) \\ &= \int d^3\vec{r} e^{\frac{i}{\hbar} Et} (\psi(\vec{r}))^* e^{-\frac{i}{\hbar} Et} (A \psi(\vec{r})) = \int d^3\vec{r} (\psi(\vec{r}))^* (A \psi(\vec{r})) . \end{aligned}$$

2b) Anta at $\Psi_a(\vec{r}, t)$ og $\Psi_b(\vec{r}, t)$ er to forskjellige stasjonære tilstander med to forskjellige energier $E_a < E_b$,

$$\Psi_a(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_a t} \psi_a(\vec{r}) , \quad \Psi_b(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_b t} \psi_b(\vec{r}) .$$

La $\Phi = \Phi(\vec{r}, t)$ være en superposisjon av disse to stasjonære tilstandene,

$$\Phi(\vec{r}, t) = c_a \Psi_a(\vec{r}, t) + c_b \Psi_b(\vec{r}, t) ,$$

med konstante komplekse koeffisienter $c_a \neq 0$ og $c_b \neq 0$.

Er Φ en løsning av den tidsavhengige Schrödinger-ligningen?

Er Φ en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen?

Er Φ en stasjonær tilstand? Begrunn svarene.

Den tidsavhengige Schrödinger-ligningen er en lineær ligning for bølgefunksjonen. Da har den Φ som løsning, fordi Φ er en superposisjon av de to løsningene Ψ_a og Ψ_b .

Φ er ikke en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen, og er heller ikke en stasjonær tilstand. Grunnen er den samme i begge tilfellene, nemlig at tidsavhengigheten ikke bare er en enkelt fasefaktor. At Φ ikke er en stasjonær tilstand, ser vi mer utførlig når vi undersøker tidsavhengigheten av en vilkårlig forventningsverdi, se neste punkt.

- 2c) La Φ være den samme superposisjonen av to stasjonære tilstander, og vis at hvis A er en hvilken som helst observabel (Hermitesk operator) som ikke avhenger eksplisitt av tiden t , så har forventningsverdien av A i tilstanden Φ , definert som

$$\langle A \rangle_t = \int d^3\vec{r} (\Phi(\vec{r}, t))^* (A\Phi(\vec{r}, t)) ,$$

en tidsavhengighet som er periodisk. Finn perioden T slik at

$$\langle A \rangle_{t+T} = \langle A \rangle_t .$$

Siden forventningsverdien $\langle A \rangle_t$ i tilstanden Φ er periodisk med periode T for enhver observabel A (som ikke er eksplisitt tidsavhengig), er det naturlig å si at tilstanden Φ er periodisk med periode T . At perioden er T , vil si at frekvensen er $f = 1/T$ og at vinkelfrekvensen er $\omega = 2\pi/T$.

I følge *klassisk* elektromagnetisk teori vil en elektrisk ladning, for eksempel et elektron, som beveger seg periodisk med periode T og frekvens $f = 1/T$, sende ut elektromagnetisk stråling med den samme frekvensen f .

Sammenlign med det *kvantemekaniske* uttrykket for frekvensen til den elektromagnetiske strålingen som elektronet sender ut når det hopper fra energinivået E_b til det lavere nivået E_a . Kommentar?

Forventningsverdien av A , som funksjon av tiden t , er

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_t &= \int d^3\vec{r} (\Phi(\vec{r}, t))^* (A\Phi(\vec{r}, t)) \\ &= \int d^3\vec{r} \left(c_a^* e^{\frac{i}{\hbar} E_a t} \psi_a^*(\vec{r}) + c_b^* e^{\frac{i}{\hbar} E_b t} \psi_b^*(\vec{r}) \right) \left(c_a e^{-\frac{i}{\hbar} E_a t} A\psi_a(\vec{r}) + c_b e^{-\frac{i}{\hbar} E_b t} A\psi_b(\vec{r}) \right) \\ &= |c_a|^2 \int d^3\vec{r} \psi_a^*(\vec{r}) A\psi_a(\vec{r}) + |c_b|^2 \int d^3\vec{r} \psi_b^*(\vec{r}) A\psi_b(\vec{r}) \\ &\quad + c_b^* c_a e^{\frac{i}{\hbar} (E_b - E_a)t} \int d^3\vec{r} \psi_b^*(\vec{r}) A\psi_a(\vec{r}) + c_a^* c_b e^{-\frac{i}{\hbar} (E_b - E_a)t} \int d^3\vec{r} \psi_a^*(\vec{r}) A\psi_b(\vec{r}) . \end{aligned}$$

Fordi A forutsettes å være Hermitesk, er

$$\int d^3\vec{r} \psi_a^*(\vec{r}) A\psi_b(\vec{r}) = \int d^3\vec{r} (A\psi_a(\vec{r}))^* \psi_b(\vec{r}) = \left(\int d^3\vec{r} \psi_b^*(\vec{r}) A\psi_a(\vec{r}) \right)^* .$$

Derfor kan vi skrive

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_t &= |c_a|^2 \int d^3\vec{r} \psi_a^*(\vec{r}) A\psi_a(\vec{r}) + |c_b|^2 \int d^3\vec{r} \psi_b^*(\vec{r}) A\psi_b(\vec{r}) \\ &\quad + 2 \operatorname{Re} \left(c_b^* c_a e^{\frac{i}{\hbar} (E_b - E_a)t} \int d^3\vec{r} \psi_b^*(\vec{r}) A\psi_a(\vec{r}) \right) . \end{aligned}$$

Hele tidsavhengigheten ligger i faktoren $e^{\frac{i}{\hbar} (E_b - E_a)t}$, som er periodisk med periode $T = 2\pi\hbar/(E_b - E_a) = h/(E_b - E_a)$, frekvens $f = 1/T = (E_b - E_a)/h$ og vinkelfrekvens $\omega = 2\pi f = (E_b - E_a)/\hbar$.

I følge kvantemekanikken er dette nettopp frekvensen til den elektromagnetiske strålingen som elektronet sender ut når det hopper fra en tilstand med energi E_b til en tilstand med energi E_a .

Konklusjon: forskjellen mellom klassisk fysikk og kvantefysikk er mindre enn det kanskje kan synes som. Det faktum at en kvantemekanisk tilstand som er en superposisjon av to stasjonære tilstander med to forskjellige energier, kan ses på som en tilstand med periodisk tidsavhengighet, gir, om ikke annet, en intuitiv forklaring på hvorfor en overgang mellom de to tilstandene kan indusere elektromagnetisk stråling som oscillerer med samme frekvens som superposisjonstilstanden.

- 3a) Anta at vektorene $|j, k\rangle$ med $j = 0, 1, 2, \dots$ og $k = 0, 1, 2, \dots$ er ortonormale basisvektorer i et uendeligdimensjonalt Hilbert-rom. At de er ortonormale, betyr at for $j, k, m, n = 0, 1, 2, \dots$ er

$$\langle j, k | m, n \rangle = \delta_{j,m} \delta_{k,n} = \begin{cases} 1 & \text{for } j = m \text{ og } k = n, \\ 0 & \text{ellers.} \end{cases}$$

De fire operatorene a, a^\dagger, b og b^\dagger virker slik på basisvektorene:

$$\begin{aligned} a |j, k\rangle &= \sqrt{j} |j-1, k\rangle, & a^\dagger |j, k\rangle &= \sqrt{j+1} |j+1, k\rangle, \\ b |j, k\rangle &= \sqrt{k} |j, k-1\rangle, & b^\dagger |j, k\rangle &= \sqrt{k+1} |j, k+1\rangle. \end{aligned}$$

Vis at kvantetallene j og k som karakteriserer tilstandsvektoren $|j, k\rangle$, er egenverdier til operatorene $a^\dagger a$ og $b^\dagger b$, altså at

$$a^\dagger a |j, k\rangle = j |j, k\rangle, \quad b^\dagger b |j, k\rangle = k |j, k\rangle.$$

At Hilbert-rommet har en basis som består av felles egentilstander for operatorene $a^\dagger a$ og $b^\dagger b$, sier noe om kommutatoren $[a^\dagger a, b^\dagger b]$. Hva sier det?

Vis kommutasjonsrelasjonene $[a, a^\dagger] = 1$ og $[b, b^\dagger] = 1$.

Vis dem f.eks. ved å undersøke først hvordan kommutatoren $[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a$ virker på en vilkårlig basisvektor $|j, k\rangle$, og deretter hvordan den virker på en vilkårlig tilstandsvektor $|\psi\rangle$, som er en lineærkombinasjon av basisvektorene med komplekse koeffisienter:

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} c_{jk} |j, k\rangle.$$

Bevis for egenverdiene:

$$a^\dagger a |j, k\rangle = a^\dagger (\sqrt{j} |j-1, k\rangle) = \sqrt{j} a^\dagger |j-1, k\rangle = (\sqrt{j})^2 |j, k\rangle = j |j, k\rangle.$$

Beviset for $b^\dagger b$ er helt tilsvarende. Til senere bruk kan vi også regne ut

$$aa^\dagger |j, k\rangle = a(\sqrt{j+1} |j+1, k\rangle) = \sqrt{j+1} a |j+1, k\rangle = (\sqrt{j+1})^2 |j, k\rangle = (j+1) |j, k\rangle.$$

Når Hilbert-rommet har en basis av felles egentilstander for $a^\dagger a$ og $b^\dagger b$, følger det at $[a^\dagger a, b^\dagger b] = 0$. Her er et totrinnsbevis. For det første må kommutatoren gi null når den virker på en vilkårlig basisvektor:

$$[a^\dagger a, b^\dagger b] |j, k\rangle = (a^\dagger a b^\dagger b - b^\dagger b a^\dagger a) |j, k\rangle = (kj - jk) |j, k\rangle = 0.$$

For det andre må den gi null når den virker på en vilkårlig vektor $|\psi\rangle = \sum_j \sum_k c_{jk} |j, k\rangle$:

$$[a^\dagger a, b^\dagger b] |\psi\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} c_{jk} [a^\dagger a, b^\dagger b] |j, k\rangle = 0.$$

Kommutasjonsrelasjonen $[a, a^\dagger] = 1$ gjelder fordi den gjelder for en vilkårlig basisvektor,

$$[a, a^\dagger] |j, k\rangle = (aa^\dagger - a^\dagger a) |j, k\rangle = (j+1 - j) |j, k\rangle = |j, k\rangle.$$

og dermed for en vilkårlig vektor,

$$[a, a^\dagger] |\psi\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} c_{jk} [a, a^\dagger] |j, k\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} c_{jk} |j, k\rangle = |\psi\rangle.$$

Tilsvarende beviser vi at $[b, b^\dagger] = 1$.

- 3b) Vi kan la basisvektorene $|j, k\rangle$ representere energiegentilstander til en todimensjonal harmonisk oscillator som er isotrop, det vil si at den svinger med samme frekvens i alle retninger. Foucault-pendelen i Realfagbygget kan tjene som et konkret eksempel (bortsett fra at den har et drivverk for at den ikke skal stoppe på grunn av friksjonen, og at svingeplanet roterer i forhold til Realfagbygget, som er et roterende koordinatsystem).

Hamilton-operatoren for oscillatoren er

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2 + y^2) .$$

m er massen til partikkelen, (x, y) er posisjonen i planet, (p_x, p_y) er impulsen, og ω er vinkelfrekvensen til oscillatoren. En karakteristisk lengde for oscillatoren er

$$\ell = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} .$$

Sammenhengen mellom operatorene x, y, p_x, p_y og $a, a^\dagger, b, b^\dagger$ er at

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\ell} + i \frac{\ell}{\hbar} p_x \right), & a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\ell} - i \frac{\ell}{\hbar} p_x \right), \\ b &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{y}{\ell} + i \frac{\ell}{\hbar} p_y \right), & b^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{y}{\ell} - i \frac{\ell}{\hbar} p_y \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Hamilton-operatoren kan uttrykkes ved operatorene $a, a^\dagger, b, b^\dagger$ som

$$H = \hbar\omega (a^\dagger a + b^\dagger b + 1) .$$

Følgelig er tilstandsvektoren $|j, k\rangle$ en egentilstand til H ,

$$H |j, k\rangle = \hbar\omega (j + k + 1) |j, k\rangle .$$

Eigenverdiene til H , som er energinivåene til oscillatoren, er altså

$$E_n = \hbar\omega (n + 1) , \quad \text{med} \quad n = 0, 1, 2, \dots .$$

Hva er degenerasjonen (antallet tilstander) for energinivået E_n ?

Skriv opp et uttrykk for den mest generelle tilstanden som har energi E_n .

Vis at (de unormerte) tilstandsvektorene $a^\dagger b |j, k\rangle$ og $b^\dagger a |j, k\rangle$ har samme energi som tilstandsvektoren $|j, k\rangle$.

Hva forteller det om kommutatorene $[a^\dagger b, H]$ og $[b^\dagger a, H]$? Begrunn svaret.

(Kom eventuelt tilbake til dette spørsmålet etter at du har svart på neste punkt.)

Degenerasjonen for energinivået E_n er $n + 1$. Basisvektorene med energi E_n er alle $|j, k\rangle$ med $j + k = n$, og siden j og k er ikke-negative hele tall, kan vi ha $j = 0, 1, 2, \dots, n$ og $k = n - j = n, n - 1, n - 2, \dots, 0$.

Den mest generelle tilstanden med energi E_n er da

$$\sum_{j=0}^n d_j |j, n - k\rangle ,$$

med komplekse koeffisienter d_j .

Vi har at

$$a^\dagger b |j, k\rangle = \sqrt{(j + 1)k} |j + 1, k - 1\rangle \quad \text{og} \quad b^\dagger a |j, k\rangle = \sqrt{j(k + 1)} |j - 1, k + 1\rangle .$$

Begge disse tilstandsvektorene har samme energi som $|j, k\rangle$, siden $(j + 1) + (k - 1) = (j - 1) + (k + 1) = j + k$.

At operatorene $a^\dagger b$ og $b^\dagger a$ bevarer egenverdiene til Hamilton-operatoren H , forteller at $[a^\dagger b, H] = 0$ og $[b^\dagger a, H] = 0$. Tilstrekkelig bevis er at begge kommutatorene gir null når de virker på en vilkårlig basisvektor. For eksempel er, med $E = \hbar\omega(j + k + 1)$,

$$[a^\dagger b, H] |j, k\rangle = a^\dagger b H |j, k\rangle - H a^\dagger b |j, k\rangle = a^\dagger b E |j, k\rangle - E a^\dagger b |j, k\rangle = 0 .$$

3c) Vis kommutasjonsrelasjonen

$$[a^\dagger b, b^\dagger a] = a^\dagger a - b^\dagger b.$$

En måte å gjøre det på, er å bruke «Leibniz-reglene» for å kommutere med et produkt:

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C], \quad [AB, C] = [A, C]B + A[B, C],$$

sammen med formlene $[a, a^\dagger] = [b, b^\dagger] = 1$, $[a, b^\dagger] = [b, a^\dagger] = [a, b] = [a^\dagger, b^\dagger] = 0$.

Følgende relasjoner kan vises på tilsvarende måte (men du behøver ikke vise dem her):

$$[a^\dagger b, a^\dagger a] = -a^\dagger b, \quad [a^\dagger b, b^\dagger b] = a^\dagger b, \quad [b^\dagger a, a^\dagger a] = b^\dagger a, \quad [b^\dagger a, b^\dagger b] = -b^\dagger a.$$

Bevis:

$$\begin{aligned} [a^\dagger b, b^\dagger a] &= [a^\dagger b, b^\dagger] a + b^\dagger [a^\dagger b, a] = [a^\dagger, b^\dagger] b a + a^\dagger [b, b^\dagger] a + b^\dagger [a^\dagger, a] b + b^\dagger a^\dagger [b, a] \\ &= 0 + a^\dagger a - b^\dagger b + 0 = a^\dagger a - b^\dagger b. \end{aligned}$$

3d) Ved hjelp av operatorene a , a^\dagger , b , b^\dagger definerer vi nå følgende tre Hermiteske operasjoner:

$$K_1 = \frac{\hbar}{2} (a^\dagger a - b^\dagger b), \quad K_2 = \frac{\hbar}{2} (a^\dagger b + b^\dagger a), \quad K_3 = -i \frac{\hbar}{2} (a^\dagger b - b^\dagger a).$$

Av kommutasjonsrelasjonene ovenfor følger det at K_1 , K_2 og K_3 alle kommuterer med Hamilton-operatoren H , og at de kommuterer innbyrdes på samme måte som dreieimpulsoperasjoner:

$$[K_1, K_2] = i\hbar K_3, \quad [K_2, K_3] = i\hbar K_1, \quad [K_3, K_1] = i\hbar K_2.$$

Bevis forlanges ikke her.

Vis (ved hjelp av ligning (3)) at

$$K_3 = \frac{1}{2} (xp_y - yp_x) = \frac{L_z}{2},$$

der L_z er z -komponenten av dreieimpulsen i tre dimensjoner (en rotasjon i xy -planet er en rotasjon om z -aksen hvis vi tenker på planet som et todimensjonalt underrom av det tredimensjonale rommet).

Hva kan du si om de mulige egenverdiene til K_3 og L_z , ut fra kommutasjonsrelasjonene mellom K_1 , K_2 og K_3 ?

Vi har at

$$\begin{aligned} K_3 &= -i \frac{\hbar}{2} (a^\dagger b - b^\dagger a) \\ &= -i \frac{\hbar}{4} \left(\left(\frac{x}{\ell} - i \frac{\ell}{\hbar} p_x \right) \left(\frac{y}{\ell} + i \frac{\ell}{\hbar} p_y \right) - \left(\frac{y}{\ell} - i \frac{\ell}{\hbar} p_y \right) \left(\frac{x}{\ell} + i \frac{\ell}{\hbar} p_x \right) \right) \\ &= \frac{1}{2} (xp_y - yp_x) = \frac{L_z}{2}. \end{aligned}$$

Her har vi brukt at $p_y x = x p_y$ og $p_x y = y p_x$.

Nå vet vi at kommutasjonsrelasjonene som gjelder for dreieimpulskomponentene, impliserer at den ene komponenten, for eksempel K_3 , bare kan ha egenverdier som er $0, \pm\hbar/2, \pm\hbar, \pm3\hbar/2, \pm2\hbar, \dots$. Men siden $L_z = 2K_3$, har vi dermed bevist at en komponent av bandedreieimpulsen, for eksempel L_z , bare kan ha de *heltallige* verdiene $0, \pm\hbar, \pm2\hbar, \pm3\hbar, \pm4\hbar, \dots$ som egenverdier.

Bandedreieimpulsen kan ikke være halvtallig, slik som egenspinnet til en partikkel kan være, selv om kommutasjonsrelasjonene er de samme for bandedreieimpuls som for egenspinnet. Det spesielle med bandedreieimpulsen er at den kan uttrykkes ved to andre operasjoner \vec{r} og \vec{p} som $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$.