

Faglig kontakt under eksamen: Ingjald Øverbø, tel. 73 59 18 67

EKSAMEN I: MNFFY245 – INNFØRING I KVANTEMEKANIKK

DATO: Onsdag 12. juni 2002 TID: 9.00 – 15.00

Antall vekttall: 4 Tillatte hjelpemidler: Kalkulator,
Antall sider: 2 Rottmanns matematiske formelsamling.

Noen uttrykk og formler er samlet i et vedlegg.

Sensurdato: 3. juli 2002.

Oppgave 1

En partikkel med masse m beveger seg i én dimensjon, i et tidsuavhengig potensial $V(x)$ som foreløpig er uspesifisert.

a. Angi operatorene p_x^{op} og H som svarer til observablene p_x (impulsen) og E (energien) for dette systemet. Vis at *energien er en bevegelseskonstant* for dette systemet, i den forstand at forventningsverdien av energien ved tiden t , $\langle E \rangle_t$, er uavhengig av t . Hvilken betingelse må $V(x)$ oppfylle for at også partikkelens *impuls* p_x skal være en bevegelseskonstant?

Fremdeles uten å spesifisere potensialet $V(x)$ kan vi anta at dette systemet ved $t = 0$ prepareres i en begynnelsestilstand beskrevet ved bølgefunksjonen

$$\Psi(x, 0) = C e^{-\beta x^2} e^{ip_0 x / \hbar} \quad (\beta > 0).$$

b. Bestem C slik at $\Psi(x, 0)$ er normert, og finn (helst uten regning) forventningsverdien $\langle x \rangle_0$ ved $t = 0$.

c. Regn ut $p_x^{op} \Psi(x, 0)$ og vis at $\Psi(x, 0)$ *ikke* er en egenfunksjon til p_x^{op} . Finn forventningsverdien $\langle p_x \rangle_0$.

d. Beregn $\langle x^2 \rangle_0$ og usikkerheten $(\Delta x)_0$ for begynnelsestilstanden $\Psi(x, 0)$.

e. Vis at

$$\langle p_x^2 \rangle_\Psi = \int_{-\infty}^{\infty} |p_x^{op} \Psi|^2 dx$$

for en vilkårlig kvadratisk integrerbar tilstand $\Psi(x, t)$.

Beregn $\langle p_x^2 \rangle_0$ og usikkerheten $(\Delta p_x)_0$ for begynnelsestilstanden $\Psi(x, 0)$. Er resultatet fornuftig i grensen $\beta \rightarrow 0$? Kontrollér at $(\Delta x)_0 (\Delta p_x)_0$ kommer ut i overensstemmelse med Heisenbergs usikkerhetsrelasjon.

La oss nå spesifisere potensialet. Anta først at partikkelen er fri [$V(x) = 0$].

f. Argumentér for (eller vis) at usikkerheten i impulsen, $(\Delta p_x)_t$, er uavhengig av t i dette tilfellet.

Angi uten bevis hva som vil skje med usikkerheten $(\Delta x)_t$ for $t > 0$.

Finn den forventede posisjonen $\langle x \rangle_t$ som funksjon av t for $t > 0$.

Anta så at partikkelen beveger seg i potensialet $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$.

g. Finn forventningsverdiene $\langle x \rangle_t$, $\langle p_x \rangle_t$ og $\langle E \rangle_t$ i dette tilfellet.

h. For $p_0 = 0$ viser resultatene fra pkt. **g** at $\langle x \rangle_t = \langle p_x \rangle_t = 0$. Betyr dette at tilstanden $\Psi(x, t)$ er stasjonær for $p_0 = 0$?

Oppgave 2

Et elektron med masse m_e beveger seg i potensialet

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{\hbar^2}{m_e a_B r}.$$

Ved $t = 0$ prepareres dette systemet i den normerte tilstanden $\psi_a(r) = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-r/a}$, der (den positive) parameteren a foreløpig er ubestemt.

a. Beregn $H\psi_a(r)$, der H er systemets Hamilton-operator, og vis at $\psi_a(r)$ er en egenfunksjon til H bare for én bestemt verdi av a , heretter kalt a_1 . Finn den tilhørende energieigenverdien (heretter kalt E_1).

b. Egentilstanden $\psi_{a_1}(r)$ er i realiteten grunntilstanden for dette systemet. Hvordan vil du sannsynliggjøre dette for en som *ikke* kjenner formlene for energiene E_n og de tilhørende egenfunksjonene $\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ for de bundne tilstandene for hydrogenlignende systemer?

[Hint: Funksjonene $u_{nl}(r) \equiv rR_{nl}(r)$ oppfyller en radially ligning på éndimensjonal form, med et effektivt potensial $V_{\text{eff}}^l(r) = V(r) + \hbar^2 l(l+1)/(2m_e r^2)$. Hvilken verdi for l vil du ut fra dette vente å finne for grunntilstanden?]

c. Tilbake til den generelle begynnelsestilstanden $\psi_a(r)$ (der a har en vilkårlig verdi): Anta at det foretas en måling av observablene \mathbf{L}^2 og E .

Hva er sannsynligheten for å måle en \mathbf{L}^2 som svarer til $l > 0$?

Finn sannsynligheten (P_1) for å måle energien E lik grunntilstandsenergien E_1 (som ble beregnet i pkt. **a**). (Kontrollér at formelen gir det korrekte resultatet for spesialtilfellet $a = a_1$.)

Hva blir systemets tilstand etter en måling som gir $E = E_1$?

d. Beregn forventningsverdien $\langle E \rangle_a$ for begynnelsestilstanden $\psi_a(r)$, og vis at $\langle E \rangle_a - E_1$ er større enn null unntatt for $a = a_1$. Kan du forklare dette siste resultatet?

e. Sett $a = \frac{1}{2}a_1$ i formlene som er funnet for P_1 og $\langle E \rangle_a$. Hvordan vil du tolke resultatet for $\langle E \rangle_{a_1/2}$?

Formler og uttrykk

Vedlegg

Noe av dette kan du få bruk for.

Tidsutvikling av forventningsverdier

$$\frac{d}{dt}\langle F \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, F^{op}] \rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} F^{op} \right\rangle.$$

Ehrenfests teorem

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{r} \rangle = \frac{1}{m}\langle \mathbf{p} \rangle; \quad \frac{d}{dt}\langle \mathbf{p} \rangle = \langle -\nabla V(\mathbf{r}) \rangle.$$

Noen integraler

$$\begin{aligned} I_0(\alpha) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = (\pi/\alpha)^{1/2}, \\ I_{2n}(\alpha) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx = \left(-\frac{d}{d\alpha}\right)^n I_0(\alpha), \\ &\int_0^{\infty} x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}. \end{aligned}$$

Hermiteske operatører

For en hermitesk operator F^{op} er

$$\int (F^{op}\Psi_1)^*\Psi_2 d\tau = \int \Psi_1^* F^{op}\Psi_2 d\tau$$

for vilkårlige, kvadratisk integrerbare funksjoner Ψ_1 og Ψ_2 .

Sfæriske harmoniske

$$\left\{ \begin{array}{c} \hat{\mathbf{L}}^2 \\ \hat{L}_z \end{array} \right\} Y_{lm} = \left\{ \begin{array}{c} \hbar^2 l(l+1) \\ \hbar m \end{array} \right\} Y_{lm}, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l;$$

$$\int Y_{l'm'}^* Y_{lm} d\Omega = \delta_{l'l} \delta_{m'm};$$

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}.$$

--- * ---

Oppgave 1

a. Impulsoperatoren er $p_x^{op} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ og Hamilton-operatoren er

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x).$$

Siden H er tidsuavhengig ($\partial H/\partial t = 0$) følger det fra formelen for tidsutviklingen av forventningsverdier at

$$\frac{d}{dt} \langle E \rangle_t = \frac{i}{\hbar} \langle [H, H] \rangle + \langle \partial H/\partial t \rangle = 0, \quad \text{q.e.d.}$$

Fra Ehrenfests teorem følger det at impulsen p_x er en bevegelseskonstant,

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle_t = \langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle = 0,$$

bare dersom V er uavhengig av x .

b. Normering krever at

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\beta x^2} dx = |C|^2 \sqrt{\pi/2\beta} = 1,$$

som er oppfylt for

$$C = (2\beta/\pi)^{1/4}.$$

Da $|\Psi(x, 0)|^2 = \sqrt{2\beta/\pi} \exp(-2\beta x^2)$ er symmetrisk med hensyn på origo, er forventningsverdien av x åpenbart $\langle x \rangle_0 = 0$.

c. Vi regner ut

$$p_x^{op} \Psi(x, 0) = (2\beta/\pi)^{1/4} e^{-\beta x^2 + ip_0/\hbar} \frac{\hbar}{i} (-2\beta x + ip_0/\hbar) = (p_0 + 2i\beta\hbar x) \Psi(x, 0).$$

Da størrelsen i parenteser avhenger av x , ser vi at $\Psi(x, 0)$ *ikke* er en egenfunksjon til impulsoperatoren. [Men for små β er det ikke langt ifra.] Det er nå enkelt å finne forventningsverdien for impulsen:

$$\langle p_x \rangle_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, 0) p_x^{op} \Psi(x, 0) dx = p_0 \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx + 2i\beta\hbar \langle x \rangle_0 = p_0.$$

d. Vi regner ut

$$\langle x^2 \rangle_0 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\Psi(x, 0)|^2 dx = (2\beta/\pi)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\beta x^2} dx = (2\beta/\pi)^{1/2} \cdot \frac{1}{2} \pi^{1/2} (2\beta)^{-3/2} = \frac{1}{4\beta}.$$

Usikkerheten i posisjonen ved $t = 0$ blir dermed

$$(\Delta x)_0 = \sqrt{\langle x^2 \rangle_0 - \langle x \rangle_0^2} = \frac{1}{2\sqrt{\beta}}.$$

e. Fordi impulsoperatoren er hermitesk, har vi at

$$\langle p_x^2 \rangle_\Psi = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* p_x^{op} p_x^{op} \Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} (p_x^{op} \Psi)^* (p_x^{op} \Psi) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |p_x^{op} \Psi|^2 dx, \quad \text{q.e.d.}$$

Vha dette uttrykket og verdien for $\langle x^2 \rangle_0$ finner vi at

$$\begin{aligned} \langle p_x^2 \rangle_0 &= \int_{-\infty}^{\infty} (p_x^{op} \Psi(x, 0))^* (p_x^{op} \Psi(x, 0)) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (p_0^2 + 4\beta^2 \hbar^2 x^2) |\Psi(x, 0)|^2 dx \\ &= p_0^2 + 4\beta^2 \hbar^2 \langle x^2 \rangle_0 = p_0^2 + \hbar^2 \beta. \end{aligned}$$

Usikkerheten i impulsen ved $t = 0$ blir dermed

$$(\Delta p_x)_0 = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle_0 - \langle p_x \rangle_0^2} = \hbar \sqrt{\beta}.$$

Når $\beta \rightarrow 0$ ser vi at usikkerheten $(\Delta p_x)_0$ går mot null, dvs p_x tenderer mot å være skarpt definert lik p_0 . Dette er rimelig og fornuftig, fordi begynnelsestilstanden $\Psi(x, 0)$ ligner mer og mer på en ren planbølge $\exp(ip_0 x / \hbar)$ jo mindre β blir.

Usikkerhetsproduktet blir

$$(\Delta x)_0 \cdot (\Delta p_x)_0 = \frac{1}{2} \hbar,$$

som er det minste vi kan ha ifølge Heisenbergs usikkerhetsrelasjon.

f. Det enkleste her er kanskje å bruke formelen for tidsutviklingen av forventningsverdier til å vise at både $\langle p_x \rangle_t$ og $\langle p_x^2 \rangle_t$ er uavhengige av t . (Det samme vil da gjelde for usikkerheten $(\Delta p_x)_t = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle_t - \langle p_x \rangle_t^2}$):

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle_t = \frac{i}{\hbar} \langle [H, p_x^{op}] \rangle = \frac{i}{2m\hbar} \langle [(p_x^{op})^2, p_x^{op}] \rangle = 0,$$

og tilsvarende for p_x^2 , q.e.d. Et annet argument er at sannsynlighetsfordelingen for impuls, $|\Phi(p_x, t)|^2$, vil være konstant for den frie partikkelen.

For en fri-partikkel-pakett har vi dispersjon. Vi må derfor regne med at usikkerheten i posisjonen, $(\Delta x)_t$, vil endre seg. I og med at usikkerheten i impulsen holder seg konstant, og usikkerhetsproduktet er minimalt i utgangspunktet, må vi da regne med at usikkerheten i posisjonen vil øke med tiden.

Den forventede posisjonen finner vi vha Ehrenfests teorem:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle_t = \frac{1}{m} \langle p_x \rangle_t = \frac{p_0}{m} \quad \implies \quad \langle x \rangle_t = \langle x \rangle_0 + \frac{p_0 t}{m} = \frac{p_0 t}{m}.$$

g. Igjen bruker vi Ehrenfest:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle x \rangle_t &= \frac{1}{m} \langle p_x \rangle_t, & \frac{d}{dt} \langle p_x \rangle_t &= \langle -\frac{dV}{dx} \rangle_t = -m\omega^2 \langle x \rangle_t, \\ \implies & & \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle_t &= \frac{1}{m} \frac{d}{dt} \langle p_x \rangle_t = -\omega^2 \langle x \rangle_t. \end{aligned}$$

Den generelle løsningen er

$$\langle x \rangle_t = A \cos \omega t + B \sin \omega t, \quad \langle p_x \rangle_t = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle_t = m\omega (-A \sin \omega t + B \cos \omega t).$$

For $t = 0$ har vi da

$$\langle x \rangle_0 = A \cdot 1 + B \cdot 0 = 0 \quad \implies \quad A = 0,$$

$$\langle p_x \rangle_0 = -m\omega A \cdot 0 + m\omega B \cdot 1 = p_0 \quad \implies \quad B = \frac{p_0}{m\omega}.$$

Løsningen er altså

$$\langle x \rangle_t = \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t, \quad \langle p_x \rangle_t = p_0 \cos \omega t.$$

Siden energien er en bevegelseskonstant, kan vi regne den ut for $t = 0$:

$$\langle E \rangle_t = \langle E \rangle_0 = \frac{1}{2m} \langle p_x^2 \rangle_0 + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle_0 = \frac{p_0^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \beta}{2m} + \frac{m\omega^2}{8\beta}.$$

h. For $p_0 = 0$ ser vi av formelen i pkt. **g** at

$$\langle x \rangle_t = \langle p_x \rangle_t = 0, \quad \text{mens} \quad \langle E \rangle_t = \frac{\hbar^2 \beta}{2m} + \frac{m\omega^2}{8\beta}.$$

For alle de *stasjonære* løsningene til oscillatoren vet vi at forventningsverdiene av posisjon og impuls er lik null, men det motsatte gjelder *ikke*. Oscillatoren har nemlig som kjent bare én energiegentilstand på formen $\exp(-\beta x^2)$, for en ganske bestemt verdi av β . Følgelig kan ikke $\Psi(x, 0)_{p_0=0}$ være en energiegenfunksjon (og $\Psi(x, t)$ en stasjonær løsning) for alle β . Dette gjenspeiler seg også ved at $\langle E \rangle_t = \langle E \rangle_0$ er en kontinuerlig funksjon av parameteren β , mens energiegenverdiene som kjent er kvantiserte. Det kommer også fram når vi beregner

$$\frac{d}{dx} \Psi(x, 0) = \frac{d}{dx} C e^{-\beta x^2} = C e^{-\beta x^2} (-2\beta x)$$

og

$$\begin{aligned} H\Psi(x, 0) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) C e^{-\beta x^2} \\ &= C e^{-\beta x^2} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} [-2\beta + 4\beta^2 x^2] + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right\} \\ &= C e^{-\beta x^2} \left\{ \frac{\beta \hbar^2}{m} + x^2 \left[\frac{1}{2} m \omega^2 - 2\hbar^2 \beta^2 / m \right] \right\}. \end{aligned}$$

Dette viser at vi har en akseptabel løsning (egenfunksjon) bare for den spesielle verdien

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

som svarer til energiegenverdien

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

Dette er som kjent energien til grunntilstanden for oscillatoren. Det ligger da i kortene at denne verdien av β må svare til et minimum i $\langle E \rangle$, noe som lett kan kontrolleres.

Oppgave 2

a. Med

$$\frac{\partial \psi_a}{\partial r} = \psi_a \cdot \left(-\frac{1}{a}\right) \quad \text{og} \quad \frac{\partial^2 \psi_a}{\partial r^2} = \psi_a \cdot \left(\frac{1}{a}\right)^2$$

finner vi

$$H\psi_a(r) = \psi_a \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{a^2} - \frac{2}{ra} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e a^2} + \frac{\hbar^2}{m_e r} \left(\frac{1}{a} - \frac{e^2 m_e}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right) \right] \psi_a(r).$$

Dette viser at ψ_a er en egenfunksjon til H bare dersom a har den spesielle verdien

$$a_1 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e} \equiv a_B \quad (\text{Bohr-radien}).$$

Den tilsvarende energieigenverdien er

$$E_1 = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_B^2}.$$

b. Siden sentrifugalbarrieren $\hbar^2 l(l+1)/(2m_e r^2)$ er frastøtende, og vokser med økende l , har vi det “dypeste” effektive potensialet for $l=0$. Tilstanden $\psi_{a_1}(r)$ er uavhengig av vinkler og dermed ganske riktig en s -tilstand med $l=0$. For det effektive potensialet $V_{\text{eff}}^0 = V(r)$ vil vi finne flere s -tilstander, som svarer til radialfunksjoner $u_{n0}(r)$ med et varierende antall nullpunkter (n_r) for $r > 0$. Erfaring og argumentasjon basert på krumningsegenskaper tilsier at energiene til disse tilstandene vokser med økende antall nullpunkter. Da ψ_{a_1} er fri for slike nullpunkter, må vi vente at det er denne som representerer grunntilstanden.

c. Siden begynnelsestilstanden er en s -tilstand, er sannsynligheten for å måle $l > 0$ lik null.

Sannsynligheten for å måle grunntilstandsenergien E_1 og etterlate systemet i grunntilstanden $\psi_{100} = \psi_{a_1}$ er kvadratet av projeksjonen av begynnelsestilstanden på grunntilstanden:

$$\begin{aligned} P_1 &= |\langle \psi_{a_1}, \psi_a \rangle|^2 = \left[\int_0^\infty (\pi a_1^3 \pi a^3)^{-1/2} e^{-r(1/a_1 + 1/a)} 4\pi r^2 dr \right]^2 \\ &= \left[4(a_1 a)^{-3/2} (1/a_1 + 1/a)^{-3} 2! \right]^2 = 64 \frac{(a_1 a)^3}{(a_1 + a)^6}. \end{aligned}$$

Som en kontroll merker vi oss at $a = a_1$ gir $P_1 = 1$, slik det skal være.

Etter en energimåling som gir $E = E_1$ vil systemet befinne seg i tilstanden ψ_{a_1} .

d. Med

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_a = \int \psi_a^*(r) \frac{1}{r} \psi_a(r) d^3r = 4\pi (\pi a^3)^{-1} \int_0^\infty e^{-2r/a} \frac{1}{r} r^2 dr = \frac{1}{a}$$

finner vi at forventningsverdien av energien i begynnelsestilstanden er

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_a &= \int \psi_a^* H \psi_a d^3r \\ &= \int \psi_a \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e a^2} + \frac{1}{r} \frac{\hbar^2}{m_e} \left(\frac{1}{a} - \frac{1}{a_B} \right) \right] \psi_a d^3r \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e a^2} + \frac{1}{a} \frac{\hbar^2}{m_e} \left(\frac{1}{a} - \frac{1}{a_B} \right) = \frac{\hbar^2}{2m_e a^2} - \frac{\hbar^2}{m_e a a_B}. \end{aligned}$$

Dermed er

$$\langle E \rangle_a - E_1 = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{a^2} - \frac{2}{aa_B} + \frac{1}{a_B^2} \right) = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{a} - \frac{1}{a_B} \right)^2.$$

Denne differensen er større enn null, unntatt for $a = a_1 = a_B$. I det siste tilfellet er den selvsagt lik null, siden $a = a_B$ svarer til grunntilstanden.

For $a \neq a_1 (= a_B)$ er ψ_a forskjellig fra grunntilstanden ψ_{a_B} , og en utvikling av ψ_a i det fullstendige settet av energiegentilstander vil inneholde bidrag for $E > E_1$. Da må nødvendigvis også forventningsverdien $\langle E \rangle_a$ bli større enn E_1 .

e. For spesialtilfellet $a = \frac{1}{2}a_1 = \frac{1}{2}a_B$ gir formlene ovenfor resultatene

$$P_1 = \frac{512}{729} \quad \text{og} \quad \langle E \rangle_{a_B/2} = \frac{\hbar^2}{2m_e(a_B/2)^2} - \frac{\hbar^2}{m_e a_B a_B/2} = 0.$$

Det siste resultatet viser at utviklingen av ψ_a i energiegentilstander også må inneholde bidrag for $E > 0$: Fordi $l = 0$ i begynnelsestilstanden, er det bare s -bølger som bidrar:

$$\psi_a = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_{n00} + \int_0^{\infty} C(E) \psi_{E00} dE.$$

Forventningsverdien av energien kan da skrives som

$$\langle E \rangle_a = \sum_n |c_n|^2 E_n + \int_0^{\infty} |C(E)|^2 E dE.$$

For $a = \frac{1}{2}a_B$ må de to leddene på høyresiden være motsatt like store. I det første leddet er alle energiene E_n negative, slik at dette leddet er negativt. Med begynnelsestilstanden $\psi_{a_B/2}$ er det altså en betydelig sannsynlighet for å finne elektronet i en ubundet tilstand, med $E > 0$.