Løsning, eksamen TFY4205 Kvantemekanikk II
Mandag 13. august 2012

1a) Kravene at både ψ og ψ' er kontinuerlige der potensialet er diskontinuerlig, følger av Schrödingerligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)\ .$$

Ligningen krever at den dobbeltderiverte $\psi''(x)$ eksisterer overalt, unntatt (kanskje) i punktene $x = \ldots, -a, 0, b, a+b, \ldots$ der $V(x)$ er diskontinuerlig. $\psi''(x)$ vil være begrenset (ikke gå mot uendelig noe sted) så lenge $\psi(x)$ er begrenset (og det kan vi trygt anta). Men $\psi''(x)$ vil være diskontinuerlig i et punkt der $V(x)$ er diskontinuerlig og $\psi(x)$ ikke er null. Når den dobbeltderiverte har disse egenskaene, så følger det at den førstederiverte

$$\psi'(x) = \int \mathrm{d}x\ \psi''(x)$$

er veldefinert og kontinuerlig overalt. Når den deriverte av ψ eksisterer overalt, så må ψ være kontinuerlig overalt.

En annen metode for å overbevise seg om kontiniuiteten er å starte med et kontinuerlig potensial som vi gjør mer og mer diskontinuerlig. Se på intervallet $-a < x < b$ og la f.eks.

$$V(x) = \frac{V_0\,(x+\epsilon)}{2\epsilon} \qquad \text{for} \qquad -\epsilon \le x \le \epsilon\ ,$$

mens $V(x) = 0$ for $-a \le x \le -\epsilon < 0$ og $V(x) = V_0$ for $0 < \epsilon \le x \le b$. I følge Schrödingerligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

eksisterer ψ'' overalt i dette intervallet, og derfor må ψ' og ψ begger være kontinuerlige der så lenge $\epsilon > 0$. Integrasjon av Schrödingerligningen fra $-\epsilon$ til ϵ gir at

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,(\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)) = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \mathrm{d}x\ (E - V(x))\psi(x)\ .$$

Innenfor integrasjonsintervallet er $E - V(x)$ mellom $E - V_0$ og E, og $\psi(x)$ må også være begrenset der. Følgelig må integralet gå mot null når $\epsilon \to 0$, og $\psi'(x)$ må fortsatt være kontinuerlig i $x = 0$ etter grenseovergangen $\epsilon \to 0$. Siden $\psi'(0)$ eksisterer, må $\psi(x)$ være kontinuerlig i $x = 0$.

1b) Innsetting i Schrödingerligningen for $-a < x < 0$, $0 < x < b$ og $b < x < a+b$ gir at

$$E = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} = \frac{\hbar^2(\beta^2+\gamma^2)}{2m}\ .$$

Vi ser direkte at

$$E \ge \frac{\hbar^2\gamma^2}{2m} = V_0\ .$$

Poenget her er at

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\cos(\beta x) = -\beta^2\cos(\beta x)\;, \qquad \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\sin(\beta x) = -\beta^2\sin(\beta x)\;.$$

For å få $0 \leq E \leq V_0$ må vi erstatte cos med cosh og sin med sinh, da får vi at

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\cosh(\beta x) = \beta^2\cosh(\beta x)\;, \qquad \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\sinh(\beta x) = \beta^2\sinh(\beta x)\;,$$

og

$$E = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} = \frac{\hbar^2(-\beta^2+\gamma^2)}{2m}\;.$$

1c) Vi må bruke kontinuitetskravene til $\psi(x)$ og $\psi'(x)$ for $x = 0$ og $x = b$. For $x = 0$ får vi ligningene

$$A_1 = A_2\;, \qquad \alpha B_1 = \beta B_2\;.$$

For $x = b$ får vi ligningene

$$\begin{aligned} A_2\cos(\beta b) + B_2\sin(\beta b) &= A_3\cos(\alpha a) - B_3\sin(\alpha a)\;, \\ \beta\left(-A_2\sin(\beta b) + B_2\cos(\beta b)\right) &= \alpha\left(A_3\sin(\alpha a) + B_3\cos(\alpha a)\right)\;. \end{aligned}$$

Eliminasjon av B_3 gir at

$$\begin{aligned} A_3 &= A_2\left(\cos(\alpha a)\cos(\beta b) - \frac{\beta}{\alpha}\sin(\alpha a)\sin(\beta b)\right) \\ &\quad + B_2\left(\cos(\alpha a)\sin(\beta b) + \frac{\beta}{\alpha}\sin(\alpha a)\cos(\beta b)\right)\;. \end{aligned}$$

Eliminasjon av A_3 gir at

$$\begin{aligned} B_3 &= A_2\left(-\sin(\alpha a)\cos(\beta b) - \frac{\beta}{\alpha}\cos(\alpha a)\sin(\beta b)\right) \\ &\quad + B_2\left(-\sin(\alpha a)\sin(\beta b) + \frac{\beta}{\alpha}\cos(\alpha a)\cos(\beta b)\right)\;. \end{aligned}$$

Når vi setter inn $A_2 = A_1$ og $B_2 = \alpha B_1/\beta$ får vi at

$$A_3 = T_{11}A_1 + T_{12}B_1\;, \qquad B_3 = T_{21}A_1 + T_{22}B_1\;,$$

med de oppgitte formlene for $T_{11}, T_{12}, T_{21}, T_{22}$.

1d) Det er faktisk slik, selv om det ikke er trivielt å se det, at høyresidene av ligningene (1) og (2) i oppgaveteksten beskriver den samme funksjonen av E/V_0 i hvert sitt område, enten $E \geq V_0$ eller $E \leq V_0$. Betingelsen for løsning av ligning (1) eller (2) med hensyn på k er at høyresiden er mellom -1 og 1. Figuren viser at denne betingelsen er oppfylt i visse energiintervall, og ikke oppfylt mellom disse tillatte intervallene.

I følge figurene 1, 2 og 3 er det et tillatt energiintervall for E/V_0 mellom 0,3 og 0,4 (svært omtrentlig), et bånd nr. 2 (like omtrentlig) mellom 1 og 1,7, bånd nr. 3 mellom 2 og 3,4, bånd nr. 4 mellom 3,6 og 5,8, bånd nr. 5 mellom 5,9 og 8,89, bånd nr. 6 mellom 8,91 og 12,81, og et bånd nr. 7 fra 12,82 og oppover.

Gapene mellom hvert enrgibånd er svært små, og blir mindre og mindre oppover, når energien E blir mye større enn V_0. Som rimelig er, siden partiklene da vil bevege seg mer og mer som frie partikler.

1e) I følge teorien for elektriske ledere, halvledere og isolatorer kan vi beskrive elektronene i t slikt stoff som om de beveger seg i et periodisk potensial uten å vekselvirke med hverandre. I et endelig gitter er det et endelig antall tilstander i hvert enegibånd, like mange tilstander i ett bånd som det er atomer i gitteret.

Elektronene er fermioner og fyller opp energiegentilstandene nedenfra. Fordi elektronene har spinn 1/2 (og energien i en tilstand er stort sett uavhengig av elektronspinnet), er det plass til to elektroner i en energiegentilstand.

Hvis hvert atom i krystallgitteret har et like antall, si $2n$, elektroner, så fyller disse elektronene fullstendig n energibånd. For at de skal kunne bevege seg og lede elektrisk strøm, må de eksiteres opp i høyere energitilstander. Hvis da gapet opp til neste energibånd er stort (la oss si 5 eV eller mer), så koster det for mye energi å eksitere elektronene, og vi har en isolator. Hvis gapet opp til neste energibånd er mindre, vil noen få elektroner være eksiterte, og vi har en halvleder.

Hvis hvert atom i krystallgitteret har et odde antall elektroner, så vil energibåndene være fullstendig fylt, opp til et energibånd som er halvfullt. Da koster det ubetydelig energi å eksitere et elektron i det halvfylte båndet, og vi har en elektrisk leder (et metall).

2a) Hvis topartikkelbølgefunksjonen er $\psi(x_1, x_2)$, og $\psi(x_1, x_2) = 0$ for $|x_1| \geq a/2$ eller $|x_2| \geq a/2$, så er forventningsverdien av $(x_1 - x_2)^2$ definert som

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_1 \int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_2 \, (x_1 - x_2)^2 \, |\psi(x_1, x_2)|^2 \, .$$

Vi ekspanderer

$$(x_1 - x_2)^2 = x_1^2 - 2x_1 x_2 + x_2^2 \, .$$

I tilfelle 1, når partiklene er ulike, er bølgefunksjonen

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_1(x_1) \, \psi_2(x_2) \, .$$

Da får vi at

$$\begin{aligned}
\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \, (x_1 - x_2)^2 \, |\psi(x_1) \, \psi_2(x_2)|^2 \\
&= \left(\int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_1 \, x_1^2 \, |\psi_1(x_1)|^2 \right) \left(\int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_2 \, |\psi_2(x_2)|^2 \right) \\
&\quad -2 \left(\int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_1 \, x_1 \, |\psi_1(x_1)|^2 \right) \left(\int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_2 \, x_2 \, |\psi_2(x_2)|^2 \right) \\
&\quad + \left(\int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_1 \, |\psi_1(x_1)|^2 \right) \left(\int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_2 \, x_2^2 \, |\psi_2(x_2)|^2 \right) .
\end{aligned}$$

Enpartikkelbølgefunksjonene er normerte slik at

$$\int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_1 \, |\psi_1(x_1)|^2 = \int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_2 \, |\psi_2(x_2)|^2 = 1 \, .$$

Videre har vi at

$$\int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_1 \, x_1 \, |\psi_1(x_1)|^2 = \int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_2 \, x_2 \, |\psi_2(x_2)|^2 = 0 \, ,$$

fordi integrandene er antisymmetriske når vi skifter fortegn på x_1 og x_2.
Vi substituerer $x_1 = au/\pi$ og får at

$$\begin{aligned} \int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_1 \, x_1^2 \, |\psi_1(x_1)|^2 \; &= \left(\frac{a}{\pi}\right)^3 \frac{2}{a} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \mathrm{d}u \, u^2 \, \cos^2 u = \frac{2a^2}{\pi^3} \left(\frac{\pi^3}{24} - \frac{\pi}{4}\right) \\ &= a^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}\right) . \end{aligned}$$

Vi substituerer $x_2 = au/(2\pi)$ og får at

$$\begin{aligned} \int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_2 \, x_2^2 \, |\psi_2(x_2)|^2 \; &= \left(\frac{a}{2\pi}\right)^3 \frac{2}{a} \int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}u \, u^2 \, \sin^2 u = \frac{a^2}{4\pi^3} \left(\frac{\pi^3}{3} - \frac{\pi}{2}\right) \\ &= a^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{8\pi^2}\right) . \end{aligned}$$

I tilfelle 1 får vi alt i alt at

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = a^2 \left(\frac{1}{6} - \frac{5}{8\pi^2}\right) . \tag{1}$$

I tilfelle 2, når partiklene er identiske fermioner (glem spinn-statistikk-teoremet, som sier at spinnløse partikler er bosoner), er bølgefunksjonen

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1(x_1) \, \psi_2(x_2) - \psi_1(x_2) \, \psi_2(x_1)\right) .$$

Siden bølgefunksjonene ψ_1 og ψ_2 begge er reelle, er

$$|\psi(x_1, x_2)|^2 = \frac{1}{2} \left(|\psi_1(x_1) \, \psi_2(x_2)|^2 - 2\psi_1(x_1) \, \psi_2(x_1) \psi_1(x_2) \, \psi_2(x_2) + |\psi_1(x_2) \, \psi_2(x_1)|^2\right) .$$

Når vi ikke skriver opp integral som er 0 på grunn av antisymmetri, eller 1 på grunn av normering, får vi at

$$\begin{aligned} \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle \; &= \frac{1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_1 \, x_1^2 \, |\psi_1(x_1)|^2 + \frac{1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_1 \, x_1^2 \, |\psi_2(x_1)|^2 \\ &+2 \left(\int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_1 \, x_1 \, \psi_1(x_1) \psi_2(x_1)\right) \left(\int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_2 \, x_2 \, \psi_1(x_2) \psi_2(x_2)\right) \\ &+\frac{1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_2 \, x_2^2 \, |\psi_2(x_2)|^2 + \frac{1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x_2 \, x_2^2 \, |\psi_1(x_2)|^2 \, . \end{aligned}$$

Fire av bidragene her summerer opp til resultatet i ligning (1) for ikke-identiske partikler. Det eneste nye integralet er det såkalte utvekslingsintegralet

$$\int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x\, x\, \psi_1(x)\psi_2(x) \;=\; \left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \frac{2}{a} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \mathrm{d}u\; u\, \cos u\, \sin(2u) = \frac{16a}{9\pi^2}\;,$$

der vi substituerer $x = au/\pi$.

I tilfelle 2 får vi da alt i alt at

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = a^2 \left(\frac{1}{6} - \frac{5}{8\pi^2} + \frac{512}{81\pi^4} \right) . \tag{2}$$

I tilfelle 3, når partiklene er identiske bosoner, er bølgefunksjonen

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1(x_1)\, \psi_2(x_2) + \psi_1(x_2)\, \psi_2(x_1) \right) .$$

Det eneste som forandres, sammenlignet med tilfelle 2, er fortegnet på bidraget fra utvekslingsintegralene, og vi får at

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = a^2 \left(\frac{1}{6} - \frac{5}{8\pi^2} - \frac{512}{81\pi^4} \right) . \tag{3}$$

Vi ser at den midlere avstanden mellom partiklene er minst for identiske bosoner og størst for identiske fermioner, mens ikke-identiske partikler faller mellom de to ytterlighetene. Virkningen av partikkelstatistikken er omtrent som om identiske bosoner tiltrekker hverandre, mens identiske fermioner frastøter hverandre.

2b) Hvert elektron har spinn 1/2. To elektroner kan ha totalt spinn enten $S = 0$ eller $S = 1$. Hvis $S = 0$, så må $S_z = 0$. Hvis $S = 1$, så må enten $S_z = 0$ eller $S_z = \pm\hbar$.

Topartikkel spinnegenfunksjonen med $S = 1$, $S_z = \hbar$ er

$$\chi_{1+}(1, 2) = \chi_+(1)\, \chi_+(2)\; .$$

Topartikkel spinnegenfunksjonen med $S = 1$, $S_z = -\hbar$ er

$$\chi_{1-}(1, 2) = \chi_-(1)\, \chi_-(2)\; .$$

Den normerte topartikkel spinnegenfunksjonen med $S = 1$, $S_z = 0$ er

$$\chi_{10}(1, 2) = \frac{1}{2} \left(\chi_+(1)\, \chi_-(2) + \chi_-(1)\, \chi_+(2) \right) .$$

Den er symmetrisk under ombytte $1 \leftrightarrow 2$, altså $\chi_{10}(2, 1) = \chi_{10}(1, 2)$. Det må den være fordi spinnbølgefunksjonen χ_{1+} er symmetrisk, og vi får χ_{10} av χ_{1+} ved å operere med senkeoperatoren

$$S_- = S_x - \mathrm{i}S_y = S_{1x} + S_{2x} - \mathrm{i}\left(S_{1y} + S_{2y} \right) ,$$

som også er symmetrisk under ombytte $1 \leftrightarrow 2$.

Den normerte topartikkel spinnegenfunksjonen med $S = 0$, $S_z = 0$ er

$$\chi_{00}(1, 2) = \frac{1}{2} \left(\chi_+(1)\, \chi_-(2) - \chi_-(1)\, \chi_+(2) \right) .$$

Den er antisymmetrisk under ombytte $1 \leftrightarrow 2$, altså $\chi_{10}(2, 1) = -\chi_{10}(1, 2)$. Den må være antisymmetrisk fordi den må være ortogonal til χ_{10}, som er symmetrisk.

2c) Elektroner er fermioner, det vil si at den totale bølgefunksjonen

$$\Psi(x_1, m_1; x_2, m_2) = \chi(m_1, m_2)\,\psi(x_1, x_2)$$

må være antisymmetrisk under ombytte $1 \leftrightarrow 2$:

$$\Psi(x_2, m_2; x_1, m_1) = -\Psi(x_1, m_1; x_2, m_2) \; .$$

Her er $m_1, m_2 = 0, \pm 1$ spinnkomponentene langs z-aksen.

Hvis det totale spinnet er $S = 1$, så er spinnbølgefunksjonen symmetrisk,

$$\chi(m_2, m_1) = \chi(m_1, m_2) \; ,$$

og følgelig rombølgefunksjonen antisymmetrisk,

$$\psi(x_2, x_1) = -\psi(x_1, x_2) \; .$$

Da er den midlere avstanden, som vi har regnet ut ovenfor,

$$\sqrt{\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle} = a\sqrt{\frac{1}{6} - \frac{5}{8\pi^2} + \frac{512}{81\pi^4}} \; .$$

Hvis det totale spinnet er $S = 0$, så er spinnbølgefunksjonen antisymmetrisk,

$$\chi(m_2, m_1) = -\chi(m_1, m_2) \; ,$$

og følgelig rombølgefunksjonen symmetrisk,

$$\psi(x_2, x_1) = \psi(x_1, x_2) \; .$$

Da er den midlere avstanden

$$\sqrt{\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle} = a\sqrt{\frac{1}{6} - \frac{5}{8\pi^2} - \frac{512}{81\pi^4}} \; .$$

3a) Et kort og fullgodt svar er at en stasjonær tilstand $|\psi\rangle$ er en løsning av den tidsuavhengige Schrödingerligningen

$$H\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle \; , \tag{4}$$

der H er Hamilton-operatoren (som ikke kan være eksplisitt tidsavhengig). Tilstandsvektoren $|\psi\rangle$ er en egenvektor til H med egenverdi E, og den fysiske tolkningen er at E er energien.

At forventningsverdien av kommutatoren $[A, H]$ er null i en stasjonær tilstand, følger direkte av ligning (4), slik:

$$\langle [A, H] \rangle = \langle \psi | (AH - HA) | \psi \rangle = \langle \psi | (AE - EA) | \psi \rangle = 0 \; .$$

For å regne ut $\langle \psi | AH | \psi \rangle$ lar vi H virke mot høyre, og for å regne ut $\langle \psi | HA | \psi \rangle$ lar vi H virke mot venstre.

Her er et langt svar, som går tilbake til definisjonen. En stasjonær tilstand er pr. definisjon stasjonær, altså tidsuavhengig. I kvantemekanikken betyr det at enhver forventningsverdi

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \tag{5}$$

er konstant i tiden når A er en observabel som ikke har en eksplisitt tidsavhengighet, og tilstandsvektoren $|\psi\rangle$ har en tidsavhengighet som følger av den tidsavhengige Schrödingerligningen

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle \; .$$

Med dette som utgangspunkt kan vi resonnere videre på to måter.

Resonnement 1: Hermitisk konjugering av Schrödingerligningen gir at

$$-\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle\psi| = \langle\psi| H \; .$$

Tidsderivasjon av ligning (5), med A tidsuavhengig og $|\psi\rangle$ en stasjonær tilstand, gir at

$$\begin{aligned} 0 &= \mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle A \rangle = \mathrm{i}\hbar \left(\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle\psi| \right) A|\psi\rangle + \langle\psi|A \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi\rangle \right) \right) \\ &= -\langle\psi|HA|\psi\rangle + \langle\psi|AH|\psi\rangle = \langle\psi| \, [A,H] \, |\psi\rangle \; . \end{aligned}$$

Dette resonnementet sier ikke hva som skjer dersom A er eksplisitt tidsavhengig.

Resonnement 2, som leder fram til ligning (4): Hvis to tilstandsvektorer $|\psi_1\rangle$ og $|\psi_2\rangle$ har den egenskapen at $\langle\psi_1|A|\psi_1\rangle = \langle\psi_2|A|\psi_2\rangle$ for enhver hermitisk operator A, så må de være like opp til en fasefaktor, altså

$$|\psi_2\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} \, |\psi_1\rangle \; ,$$

med en reell fase α. En tidsavhengig tilstandsvektor $|\psi, t\rangle$ beskriver altså en stasjonær tilstand dersom hele tidsavhengigheten sitter i en fasefaktor, slik at

$$|\psi, t\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(t)} \, |\psi, 0\rangle \; .$$

For at dette skal være en løsning av den tidsavhengige Schrödingerligningen, så må $|\psi, 0\rangle$ være en løsning av den tidsuavhengige Schrödingerligningen, med en energi E, og vi må ha at

$$\alpha(t) = -\frac{Et}{\hbar} \; .$$

Av den tidsuavhengige Schrödingerligningen følger at forventningsverdien av $[A,H]$ er null, som vist ovenfor.

Kommentar: En kunne tro at beviset vårt her, at $\langle [A,H] \rangle = 0$ i en egentilstand for H, kan omformuleres og brukes til å bevise at den kanoniske kommutasjonsrelasjonen $[x, p_x] = \mathrm{i}\hbar$ er umulig. La for eksempel $|\psi\rangle$ være en egenvektor for x, i denne tilstanden må vi ha at

$$\mathrm{i}\hbar = \langle \mathrm{i}\hbar \rangle = \langle [x, p_x] \rangle = \langle\psi| \, [x, p_x] \, |\psi\rangle = 0 \; .$$

Feilen med dette forsøket på bevis er at en forventningsverdi $\langle A \rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$ er veldefinert bare dersom $|\psi\rangle$ er normerbar, altså $\langle\psi|\psi\rangle < \infty$. Vi forutsatte stilltiende at den egentilstanden til H som vi brukte, var normerbar, altså tilhørte den diskrete delen av energispektret. Denne forutsetningen burde kanskje ha vært nevnt eksplisitt. Hverken posisjonsoperatoren x eller impulsoperatoren p_x har en eneste normerbar egenvektor med en diskret egenverdi. Det kan de ikke ha på grunn av den kanoniske kommutasjonsrelasjonen, som dette argumentet viser.

3b) Vi bruker Leibniz-regelen

$$[AB, C] = ABC - CAB = ACB - CAB + ABC - ACB = [A, C]\, B + A\, [B, C]$$

og får at

$$[\vec{r}\cdot\vec{p} + \vec{p}\cdot\vec{r}\,,\, H] = ([\vec{r}\,,\, H])\cdot\vec{p} + \vec{r}\cdot([\vec{p}\,,\, H]) + ([\vec{p}\,,\, H])\cdot\vec{r} + \vec{p}\cdot([\vec{r}\,,\, H])\ . \tag{6}$$

Ta en komponent av $\vec{r}$, f.eks. x. Ved hjelp av Leibniz-regelen

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

får vi at

$$[x, H] = \frac{1}{2m_\mathrm{e}}\,[x, \vec{p}^{\,2}] = \frac{1}{2m_\mathrm{e}}\,[x, p_x^2] = \frac{1}{2m_\mathrm{e}}\,([x, p_x]\, p_x + p_x\, [x, p_x]) = \frac{\mathrm{i}\hbar}{m_\mathrm{e}}\, p_x\ .$$

Av dette konkluderer vi at

$$[\vec{r}, H] = \frac{\mathrm{i}\hbar}{m_\mathrm{e}}\,\vec{p}\ . \tag{7}$$

Tilsvarende har vi at

$$[p_x, H] = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left[p_x, \frac{1}{r}\right] = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\,\frac{x}{r^3}\,[p_x, x] = -\mathrm{i}\hbar\,\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\,\frac{x}{r^3}\ ,$$

og vi konkluderer at

$$[\vec{p}, H] = -\mathrm{i}\hbar\,\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\,\frac{\vec{r}}{r^3}\ . \tag{8}$$

Her trengs kanskje en nærmere forklaring. Husk at vi kan representere p_x som en derivasjonsoperator:

$$p_x = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\partial}{\partial x}\ .$$

Hvis $f = f(x, y, z) = 1/r = 1/\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, og vi skal beregne kommutatoren $[p_x, f]$, så kan vi la den operere på en vilkårlig bølgefunksjon $\psi = \psi(x, y, z)$. Vi har at

$$[p_x, f]\,\psi = p_x f\psi - f p_x \psi = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\partial}{\partial x}\,(f\psi) - f\,\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\partial}{\partial x}\,\psi = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\partial f}{\partial x}\,\psi\ .$$

Altså er

$$[p_x, f] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\partial f}{\partial x}\ .$$

Med $f = 1/r$ er

$$\frac{\partial f}{\partial x} = -\frac{1}{r^2}\,\frac{\partial r}{\partial x} = -\frac{x}{r^3}\ .$$

Ligningene (7) og (8) innsatt i (6) gir at

$$[\vec{r}\cdot\vec{p}+\vec{p}\cdot\vec{r}\,,\;H] = \mathrm{i}\hbar\left(\frac{2}{m_{\mathrm{e}}}\,\vec{p}^{\,2} - 2\,\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right) = \mathrm{i}\hbar\,(4T+2V)\ .$$

I en stasjonær tilstand er forventningsverdien av kommutatoren lik null, i følge punkt a) ovenfor, og det gir virialteoremet, at

$$2\,\langle T\rangle + \langle V\rangle = 0$$

i den stasjonære tilstanden. Hvis $H\,|\psi\rangle = (T+V)\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$, så er dessuten

$$\langle T\rangle + \langle V\rangle = \langle\psi|\,(T+V)\,|\psi\rangle = E\ .$$

Følgelig er

$$\langle T\rangle = -E\ , \qquad \langle V\rangle = 2E\ .$$

Kommentar: Dette viser at energien E må være negativ for at virialteoremet skal holde. Den potensielle energien V er jo alltid negativ, og den kinetiske energien T er alltid positiv. Bevis for at $\langle T\rangle > 0$: vi har at

$$\langle T\rangle = \frac{1}{2m_{\mathrm{e}}}\,(\langle p_x^{\,2}\rangle + \langle p_y^{\,2}\rangle + \langle p_z^{\,2}\rangle)\ ,$$

og forventningsverdien av $p_x^{\,2}$ er garantert ikke-negativ:

$$\langle p_x^{\,2}\rangle = \langle\psi|\,p_x^{\,2}\,|\psi\rangle = \langle\phi|\phi\rangle \geq 0\ , \qquad \text{der} \qquad |\phi\rangle = p_x\,|\psi\rangle\ .$$