

## LØSNING ØVING 8

### Løsning oppgave 23 Vinkelfunksjoner, radialfunksjoner og orbitaler for hydrogenlignende system

**a. (a1):** Ved kontroll av egenverdiene kan vi se bort fra normeringsfaktorene. Vi finner da at

$$\begin{aligned}\widehat{\mathbf{L}}^2 \cos \theta &= -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \cos \theta \\ &= -\hbar^2 \left( -\cos \theta + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \cdot (-\sin \theta) + 0 \right) = 2\hbar^2 \cos \theta.\end{aligned}$$

Konklusjonen er at  $\cos \theta$  (og dermed  $Y_{10}$ ) er en egenfunksjon til  $\widehat{\mathbf{L}}^2$  med egenverdi  $2\hbar^2$ . Dette stemmer med fasiten, som sier at egenverdien skal være  $\hbar^2 l(l+1) = \hbar^2 \cdot 1 \cdot (1+1) = 2\hbar^2$ . Tilsvarende finner vi at

$$\widehat{L}_z \cos \theta = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \cos \theta = 0;$$

egenverdien er altså lik null, som stemmer med fasiten  $m\hbar$  for  $m = 0$ .

For  $Y_{1\pm 1}$  finner vi tilsvarende

$$\widehat{L}_z \sin \theta e^{\pm i\phi} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \sin \theta e^{\pm i\phi} = \pm \hbar \cdot \sin \theta e^{\pm i\phi},$$

som stemmer med fasiten  $m\hbar$  for  $m = \pm 1$ . Videre finner vi

$$\begin{aligned}\widehat{\mathbf{L}}^2 \sin \theta e^{\pm i\phi} &= -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \sin \theta e^{\pm i\phi} \\ &= -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot (-1) \right) \sin \theta e^{\pm i\phi} \\ &= -\hbar^2 \left( -\sin \theta + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \cos \theta - \frac{1}{\sin \theta} \right) e^{\pm i\phi} \\ &= -\hbar^2 \left( -\sin \theta + \frac{-\sin^2 \theta}{\sin \theta} \right) e^{\pm i\phi} = 2\hbar^2 \cdot \sin \theta e^{\pm i\phi}.\end{aligned}$$

Altså er  $\sin \theta e^{\pm i\phi}$  (og dermed  $Y_{1\pm 1}$ ) egenfunksjoner til  $\widehat{\mathbf{L}}^2$  med egenverdi lik  $2\hbar^2$ , slik fasiten sier.

**(a2):** Kontroll av normeringen:

$$\begin{aligned}\int |Y_{10}|^2 d\Omega &= \frac{3}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \cos^2 \theta \cdot \sin \theta d\theta \quad [\sin \theta d\theta = -d(\cos \theta)] \\ &= \frac{3}{2} \int_{-1}^1 \cos^2 \theta \cdot d(\cos \theta) = 1.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\int |Y_{1\pm 1}|^2 d\Omega &= \frac{3}{8\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin^2 \theta \cdot \sin \theta d\theta \\ &= \frac{3}{4} \int_{-1}^1 (1 - \cos^2 \theta) d(\cos \theta) = 1.\end{aligned}$$

**(a3):** Ortogonaliteten følger av at de tre funksjonene er egenfunksjoner til  $\widehat{L}_z$  med forskjellige egenverdier; jf regel (2.26) side 28 i boka.

**b.** **(b1):** Erfaringen fra endimensjonale energieigenverdi-problemer er at krumningen og dermed energien øker med antall noder. Siden radiallygningen for  $u(r)$  for en gitt  $l$  har endimensjonal form, er det da helt naturlig at energiene for en gitt  $l$  er strengt stigende med stigende radiallykvantetall (nodetall)  $n_r$ .

**(b2):** Med  $u = Cr^2e^{-r/2a}$  finner vi at

$$u' = Ce^{-r/2a} \left( -\frac{r^2}{2a} + 2r \right) \quad \text{og} \quad u'' = Ce^{-r/2a} \left( \frac{r^2}{4a^2} - \frac{2r}{a} + 2 \right).$$

Innsatt i radiallygningen for  $u$  gir dette

$$\begin{aligned} 0 &= Ce^{-r/2a} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{r^2}{4a^2} - \frac{2r}{a} + 2 \right) + r^2 \left( -\frac{\hbar^2}{m_e a r} + \frac{2\hbar^2}{2m_e r^2} \right) - Er^2 \right] \\ &= Ce^{r/2a} \left[ r^2 \left( -\frac{\hbar^2}{8m_e a^2} - E \right) \right]. \end{aligned}$$

Konklusjonen er at  $u$  er en løsning av radiallygningen, med energieigenverdien

$$E = -\frac{\hbar^2}{8m_e a^2},$$

som er en firedel av energien i grunntilstanden, og som svarer til hovedkvantetallet  $n = 2$ .

**(b3):** Normeringskravet er

$$1 = \int |\psi_{21m}|^2 d^3r = \int |Y_{1m}|^2 d\Omega \cdot \int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr.$$

Da vinkelfunksjonene er normerte til 1, blir normeringskravet til radialfunksjonene

$$1 = \int_0^\infty r^2 |R|^2 dr = \int_0^\infty |u|^2 dr = |C|^2 \int_0^\infty r^4 e^{-r/a} dr = |C|^2 a^5 \cdot 4!.$$

Vi oppnår en normert radialfunksjon ved å velge

$$C = \frac{1}{\sqrt{24a^5}}.$$

Ved sammenligning vil du se at dette stemmer med formlene side 107 i boka (og med tabellen i oppgaveteksten).

**(b4):** For  $R_{53}$  er antall noder  $n_r = n - l - 1 = 5 - 3 - 1 = 1$ , så denne gir opphav til én kuleformet nodeflate (jf eksemplet i pkt. **h**).  $R_{21}$  er fri for noder, og gir derfor ingen kuleformet nodeflate. For  $R_{54}$  er radiallykvantetallet tilsvarende  $n_r = 0$ , så denne radialfunksjonen gir ikke opphav til noen (kuleformet) nodeflate (jf eksemplet i pkt. **i**).

**(b5):** Fra formelen  $n = l + 1 + n_r$  følger det at den største  $l$ -verdien for et gitt hovedkvantetall er  $l_{\max} = n - 1$ . Den minste  $l$ -verdien er lik null. Følgelig kan radiallykvantetallet  $n_r$  maksimalt være lik  $n - 1$ . (Jf tabellen med radialfunksjoner.)

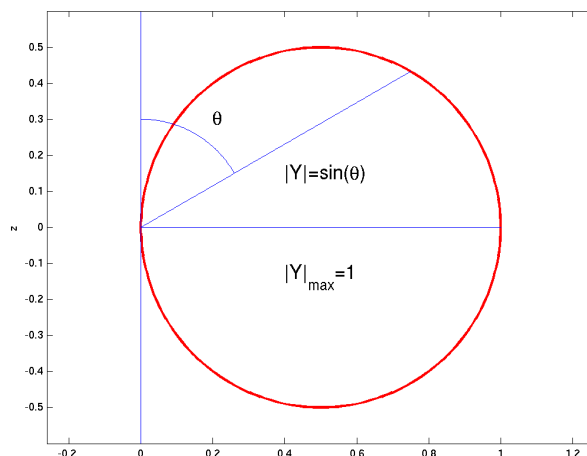
**c.** **(c1):**  $\phi$ -avhengigheten til de sfæriske harmoniske  $Y_{lm}$  er generelt gitt av faktoren  $e^{im\phi}$ .

**(c2):** For  $m = 0$  er altså funksjonene  $Y_{l0}$  uavhengige av  $\phi$ , dvs rotasjonssymmetriske mhp  $z$ -aksen. **(c3):** Det samme gjelder åpenbart for tallverdiene  $|Y_{lm}|$  av de sfæriske harmoniske, og dermed også for  $|\psi_{nlm}|$  og sannsynlighetstetthetene  $|\psi_{nlm}|^2$ .

(c4): Vinkelfunksjonen i polardiagrammet er forskjellig fra null for  $\theta = 0$ , og må følgelig ha  $m = 0$  (siden  $Y_{lm}$  er proporsjonal med  $\sin^{|m|} \theta$ ). Da den er lik null bare for  $\theta = \pi/2$ , må det være  $\cos \theta$ ; altså mangler bare faktoren  $\sqrt{3/4\pi}$  på at det er  $Y_{10}$ . (Alle de øvrige funksjonene  $Y_{l0}$  inneholder polynomer av høyere grad i  $\cos \theta$ , og er derfor lik null for flere vinkler  $\theta$ .)

(c5): Funksjonen  $\sqrt{4\pi/3} Y_{10} = \cos \theta$  er positiv (negativ) for positive (negative)  $z$ .

(c6):

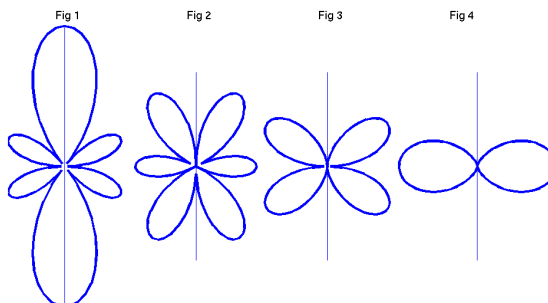


Figuren viser polardiagrammet for funksjonen

$$\sqrt{3/8\pi} |Y_{1,\pm 1}| = \sin \theta,$$

denne gangen bare for  $0 < \theta < \pi$ . Som du sikkert skjønner, er også dette en sirkel. Når denne roteres en runde rundt  $z$ -aksen, fås en torus.

**d.**



(d1): I figur 1 er  $m = 0$ , siden  $|Y|$  er forskjellig fra null for  $\theta = 0$ . (d2): Vi ser videre at  $|Y|$  er lik null for tre  $\theta$ -verdier i intervallet  $0 < \theta < \pi$ . Vi har altså  $l - |m| = 3$ , for

$\theta = \frac{1}{2}\pi$  og for to andre vinkler, i nærheten av 40–50 grader og  $\pi - 40-50$  grader. Følgelig er graden av polynomet i  $\cos \theta$  lik 3, slik at  $l - |m| = l = 3$ . Så polardiagrammet til venstre viser vinkelfordelingen  $|Y_{30}|$ . I tabellen ser vi at  $Y_{30}$  er proporsjonal med  $\cos \theta(5 \cos^2 \theta - 3)$ . Dette polynomet har nullpunkter for  $\theta = \frac{1}{2}\pi$  og for

$$\theta = \pm \arccos \sqrt{3/5} = \pm 39.23^\circ,$$

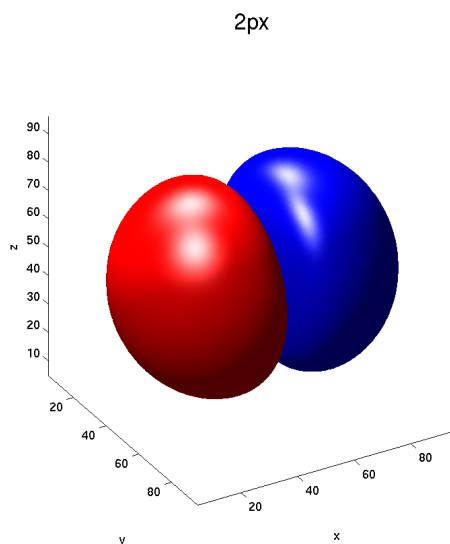
og vi ser at dette harmonerer med diagrammet. **(d3):** I figurene 2–4 er de tilsvarende antallene av nullpunkter (for  $0 < \theta < \pi$ ) henholdsvis 2, 1 og null. Så disse viser henholdsvis  $|Y_{3,\pm 1}|$ ,  $|Y_{3,\pm 2}|$  og  $|Y_{3,\pm 3}|$ .

**(d4):** Fig 1 ( $Y_{30}$ ) gir for det første et nodeplan i  $xy$ -planet, for det andre to kjegleformede nodeflater med toppvinkler bestemt av vinklene nevnt ovenfor. Fig 2 ( $Y_{3,\pm 1}$ ) gir to kjegleformede nodeflater. Fig 3 ( $Y_{3,\pm 2}$ ) gir har  $xy$ -planet som et nodeplan, og Fig 4 ( $Y_{3,\pm 3}$ ) gir ingen nodeflate (men har  $z$ -aksen som en nodelinje, om du vil).

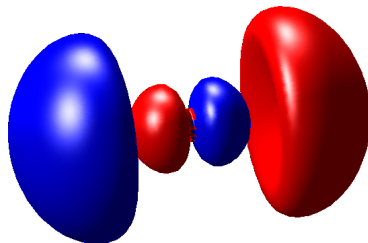
**e.** **(e1):** Orbitalen  $\psi_{2p_z} = \psi_{210}$  er antisymmetrisk med hensyn på origo (dvs mhp rominversjon), og slik skal det være. Pariteten bestemmes av vinkelfunksjonen, og pariteten til alle vinkelfunksjoner med  $l = 1$  er negativ (generelt  $(-1)^l$ ). **(e2):**  $xy$ -planet er nodeplan. **(e3):** På den øvre nodeflaten har  $2p_z$ -orbitalen  $\psi_{210}$  en konstant positiv verdi; på den nedre flaten like stor og motsatt verdi. Fordi bølgefunksjonen er kontinuerlig, kan de to flatene ikke være i kontakt. (Jf konturkurvene i pkt. **f.**)

**f.** **(f1):** Smultringen har ingen nodeflate.

**(f2):** Vi ser at orbitalen  $\psi_{2p_x}$  er gitt ved samme formel som  $2p_z$ -orbitalen, bare med  $x$  istedenfor  $z$ . Formen til de to orbitalene er derfor nøyaktig den samme, bare med den forskjellen at  $2p_x$ -orbitalen er rotasjonssymmetrisk mhp  $x$ -aksen. Tilsvarende har  $2p_y$ -orbitalen samme form med  $y$ -aksen som symmetriakse. Figuren viser  $2p_x$ -orbitalen



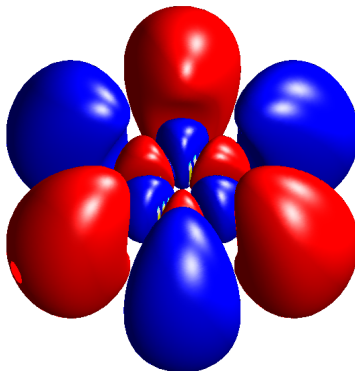
**g.**



**(g1):** Denne orbitalen er et produkt av vinkelfunksjonen  $\sqrt{3/4\pi} x/r \equiv p_x$  og en radialfunksjon som tydeligvis har et nullpunkt, og som derfor må gi en kuleformet nodeflate. Så radialkvantetallet er  $n_r = 1$ . Hovedkvantetallet blir da

$$n = l + 1 + n_r = 1 + 1 + 1 = 3.$$

**h.** **(h1):**

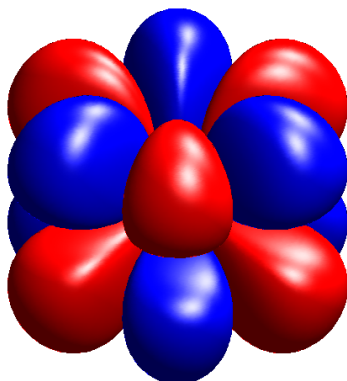


Siden  $Y_{l3}$  har  $m = 3$ , må dreieimpulskvantetallet  $l$  minst være lik 3. **(h2):** Siden denne vinkelfunksjonen  $Y_{l3}$  ikke har nullpunkter (unntatt ved "polene"), må den inneholde et polynom i  $\cos \theta$  av grad  $l - |m| = 0$ . Følgelig er  $l = 3$ . **(h3):** Fra figuren framgår det videre at radialfunksjonen har ett nullpunkt. Dermed må hovedkvantetallet være

$$n = l + 1 + n_r = 3 + 1 + 1 = 5.$$

**(h4):** Fra figuren (med farger) ser vi at orbitalen har negativ paritet, dvs skifter fortegn når vi beveger oss fra  $\mathbf{r}$  til  $-\mathbf{r}$ . Dette harmonerer med at pariteten til  $Y_{lm}$  generelt er  $(-1)^l$ .

i. (i1):



Faktoren  $\cos 3\phi$  forteller at  $Y_{l3}$  er inne i bildet. Følgelig kan ikke  $l$  være mindre enn 3. Samtidig er  $l \leq n - 1 = 4$ . Så  $l$  må være lik 3 eller 4. Fordi orbitalen tydeligvis har  $xy$ -planet som nodeplan, må den inneholde et polynom i  $\cos \theta$  av grad 1 (altså rett og slett en faktor  $\cos \theta$ ). Vi har altså  $l - |m| = 1$ , dvs  $l = 4$ . dette harmonerer med at pariteten er positiv.

### Løsning oppgave 24 Ehrenfests teorem

a. Da kraften  $\mathbf{F} = -\nabla V = -mg\hat{e}_z$  peker i negativ  $z$ -retning, følger det fra Ehrenfests teorem at

$$\frac{d\langle p_x \rangle}{dt} = \frac{d\langle p_y \rangle}{dt} = 0 \implies \langle p_x \rangle_t = \langle p_x \rangle_0 = 0 \quad \text{og} \quad \langle p_y \rangle_t = \langle p_y \rangle_0 = 0,$$

slik at

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{d\langle y \rangle}{dt} = 0 \implies \langle x \rangle_t = \langle x \rangle_0 = 0 \quad \text{og} \quad \langle y \rangle_t = \langle y \rangle_0 = 0.$$

For  $z$ -retningen finner vi at

$$\frac{d\langle p_z \rangle}{dt} = -mg \implies \langle p_z \rangle_t = \langle p_z \rangle_0 - mgt = m(v_0 - gt),$$

slik at

$$\frac{d\langle z \rangle}{dt} = \frac{\langle p_z \rangle}{m} = v_0 - gt \quad \text{og} \quad \langle z \rangle_t = \langle z \rangle_0 + v_0 t - \frac{1}{2}gt^2 = z_0 + v_0 t - \frac{1}{2}gt^2.$$

**b.** Fra formelen for tidsutviklingen av forventningsverdier,

$$\frac{d}{dt} \langle F \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\widehat{H}, \widehat{F}] \rangle + \langle \partial \widehat{F} / \partial t \rangle.$$

ser vi straks at

$$\frac{d \langle E \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\widehat{H}, \widehat{H}] \rangle = 0,$$

idet Hamilton-operatoren for den isotrope harmoniske oscillatoren,

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\widehat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2,$$

er tidsuavhengig ( $\partial \widehat{H} / \partial t = 0$ ). Energien  $E$  er altså en kvantemekanisk bevegelseskonstant. Da Hamilton-operatoren for et kulesymmetrisk potensial kommuterer med alle komponentene av  $\widehat{\mathbf{L}}$ , er også  $\mathbf{L}$  en slik bevegelseskonstant, i den forstand at

$\langle \mathbf{L} \rangle = \hat{\mathbf{e}}_x \langle L_x \rangle + \hat{\mathbf{e}}_y \langle L_y \rangle + \hat{\mathbf{e}}_z \langle L_z \rangle$  er tidsuavhengig. Om  $\langle \mathbf{r} \rangle$  og  $\langle \mathbf{p} \rangle$  vet vi at disse oppfører seg klassisk for en harmonisk oscillator. Dette betyr at de oscillerer, og følgelig ikke er bevegelseskonstanter.

**c.** Fra Ehrenfests teorem finner vi at

$$\frac{d^2 \langle z \rangle}{dt^2} = \frac{1}{m} \frac{d \langle p_z \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \left\langle -\frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{2} m \omega^2 z^2 \right) \right\rangle = -\omega^2 \langle z \rangle.$$

Den generelle løsningen er

$$\langle z \rangle_t = A_z \sin \omega t + B_z \cos \omega t \quad \implies \quad \langle p_z \rangle_t = m \frac{d \langle z \rangle_t}{dt} = m \omega A_z \cos \omega t - m \omega B_z \sin \omega t.$$

Tilsvarende for de to andre retningene. Begynnelsesbetingelsene  $\langle z \rangle_0 = \langle p_z \rangle_0 = 0$  gir da

$$A_z = B_z = 0, \quad \text{slik at} \quad \langle z \rangle_t = \langle p_z \rangle_t = 0.$$

For  $x$ -retningen gir betingelsene  $\langle x \rangle_0 = x_0$  og  $\langle p_x \rangle_0 = 0$  at  $B_x = x_0$  og  $A_x = 0$ , slik at

$$\langle x \rangle_t = x_0 \cos \omega t \quad \text{og} \quad \langle p_x \rangle_t = -m \omega x_0 \sin \omega t.$$

For  $y$ -retningen gir betingelsene  $\langle y \rangle_0 = 0$  og  $\langle p_y \rangle_0 = p_0$  at  $B_y = 0$  og  $m \omega A_y = p_0$ , slik at

$$\langle y \rangle_t = \frac{p_0}{m \omega} \sin \omega t \quad \text{og} \quad \langle p_y \rangle_t = p_0 \cos \omega t.$$

Dette betyr at  $\langle \mathbf{r} \rangle_t$  beveger seg i en ellipsebane i  $xy$ -planet, med halvaksene  $x_0$  i  $x$ -retningen og  $p_0/m\omega$  i  $y$ -retningen. Dersom vi velger  $p_0 = m\omega x_0$ , blir de to halvaksene begge lik  $x_0$ , slik at  $\langle \mathbf{r} \rangle_t$  beskriver en sirkelbane med radius  $x_0$  og med vinkelfrekvens  $\omega$ .

**d.** Som før nevnt, er koordinater og impulser for en harmonisk oscillator *ikke* kvantemekaniske bevegelseskonstanter; forventningsverdiene av disse observablene vil generelt oscillere nøyaktig på samme måte som de klassiske størrelsene. At  $\langle z \rangle$  og  $\langle p_z \rangle$  her ble tidsuavhengige, skyldes at vi valgte dem lik null ved  $t = 0$ , og da blir det jo ingen oscillasjon.