

**TFY4215 Innføring i kvantefysikk. Institutt for fysikk, NTNU.**  
**Løsningsforslag til Øving 9.**

**Oppgave 1**

Vendepunkter  $\tilde{r}$  der elektronets energi  $E$  er lik det effektive potensialet

$$V_{\text{eff}}^{(l)}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2}.$$

Med  $l = 1$  og  $E = -\alpha^2 m_e c^2 / (2 \cdot 2^2)$ :

$$-\alpha^2 m_e c^2 / 8 = -e^2 / 4\pi\epsilon_0 \tilde{r} + 2\hbar^2 / 2m\tilde{r}^2.$$

Denne ligningen kan omskrives til

$$\tilde{r}^2 - 8a_0\tilde{r} + 8a_0^2 = 0,$$

med løsningene

$$\tilde{r}_1 = (4 - 2\sqrt{2})a_0 \simeq 1.17a_0$$

og

$$\tilde{r}_2 = (4 + 2\sqrt{2})a_0 \simeq 6.83a_0,$$

hhv indre og ytre venderadius. Riktig svar: E.

**Oppgave 2**

Siden  $Y_{11} \sim \sin\theta \exp(i\phi)$ , er  $\rho_{211}$  maksimal for  $\theta = \pi/2$ , dvs i  $xy$ -planet. Maksimal  $R_{21}$  for  $r$  som oppfyller  $\frac{d}{dr}(r \exp(-r/2a_0)) = 0$ , dvs  $r = 2a_0$ . Dermed maksimal  $\rho_{211}$  på en sirkel med radius  $2a_0$  i  $xy$ -planet. Riktig svar: D.

**Oppgave 3**

Funksjonene  $R_{21}(r)$  og  $\sin\theta$  forblir uendret ved speiling gjennom origo, dvs  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ . Men  $\exp(i\phi) \rightarrow \exp(i\phi) \cdot \exp(i\pi) = -\exp(i\phi)$ , slik at funksjonen  $\psi_{211}$  har odde paritet, med egenverdi  $-1$  for paritetsoperatoren. Riktig svar: B.

**Oppgave 4**

Samnsynlighetstettheten  $\rho_{211}$  er proporsjonal med  $\sin^2\theta$  og er dermed null på  $z$ -aksen. Riktig svar: A.

**Oppgave 5**

$(R_{21}r)^2 \sim r^4 \exp(-r/a_0)$ , som er maksimal i  $r = 4a_0$ . Riktig svar: D.

**Oppgave 6**

For å oppfylle utvalgsreglene  $\Delta l = \pm 1$  og  $\Delta m = 0, \pm 1$  for overganger fra tilstander  $\psi_{3lm}$  til  $\psi_{211}$  har vi 4 muligheter:  $\psi_{300}$ ,  $\psi_{320}$ ,  $\psi_{321}$  og  $\psi_{322}$ . Riktig svar: D.

## Løsning OPPGAVE 20 Grunntilstanden i hydrogenlignende atom

**a.** Vi merker oss først at vinkelderivasjonene i Laplace-operatoren gir null bidrag til  $\nabla^2\psi$ , siden  $\psi(r)$  ikke avhenger av vinklene  $\theta$  og  $\phi$ . Vi har at

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

slik at  $\widehat{H}\psi$  blir

$$\widehat{H}\psi = Ce^{-r/a} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{1}{a^2} - \frac{2}{ra} \right) - \frac{\hbar^2}{m_e a_0 r} \right] = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e a^2} + \frac{1}{r} \left( \frac{\hbar^2}{m_e a} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \right] \psi.$$

Her ser vi at faktoren foran  $\psi$  på høyresiden kommer ut som en konstant bare dersom vi sørger for at  $1/r$ -leddet forsvinner, dvs dersom vi setter

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2 Z} = \frac{a_0}{Z}.$$

Med denne verdien for  $a$  er  $\psi$  altså en egenfunksjon til Hamilton-operatoren  $\widehat{H}$  med egenverdien

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_e a^2} = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \cdot Z^2 = -\frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 \cdot Z^2 = E_1 \cdot Z^2.$$

Her har vi understreket de to praktiske uttrykkene for Rydberg-energien, som er ca 13.6 eV. Som vi har sett tidligere (i Tillegg 1) og som vi også skal se nedenfor, kan vi bruke  $a$  som et mål for utstrekningen av denne orbitalen. Her ser vi at denne “skaleres” omvendt proporsjonal med  $Z$ , mens energien er proporsjonal med  $Z^2$ .

**b.** Sannsynlighetstettheten

$$|\psi(r)|^2 = (\pi a^3)^{-1} e^{-2r/a}$$

er maksimal i origo, og avtar som vi ser eksponensielt med økende  $r$ .

Vi ser også at både bølgefunksjonen  $\psi(r)$  og sannsynlighetstettheten  $|\psi(r)|^2$  bare avhenger av  $r$ , ikke av vinklene. Da må det være korrekt å si at orbitalen  $\psi(r)$  er kulesymmetrisk (ingen vinkelavhengighet). Siden operatoren  $\widehat{\mathbf{L}}$  bare inneholder derivasjoner mhp vinklene, finner vi at  $\widehat{\mathbf{L}}\psi(r) = 0$ . Tilstanden  $\psi(r)$  er altså en egentilstand til  $\widehat{\mathbf{L}}$  med egenverdi lik null ( $\widehat{\mathbf{L}}\psi(r) = 0 \cdot \psi(r)$ ). Dreieimpulsen er altså lik null i denne tilstanden. (Husk at i Bohr-modellen var dreieimpulsen lik  $\hbar$  i grunntilstanden.)<sup>1</sup>

Forventningsverdien av posisjonen,  $\langle \mathbf{r} \rangle = \hat{\mathbf{e}}_x \langle x \rangle + \hat{\mathbf{e}}_y \langle y \rangle + \hat{\mathbf{e}}_z \langle z \rangle$ , dvs “tyngdepunktet” av den tredimensjonale sannsynlighetsfordelingen er ganske enkelt lik  $\mathbf{0}$  når sannsynlighetsfordelingen er kulesymmetrisk.

**c.** Normeringsbetingelsen er lett å bruke når sannsynlighetstettheten er kulesymmetrisk som her. Sannsynlighetstettheten er da den samme over alt i et kuleskall med infinitesimal tykkelse  $dr$  og overflate  $4\pi r^2$ , slik at sannsynligheten for å finne elektronet i kuleskallet med volum  $4\pi r^2 dr$  er

$$P_{\text{rad}}(r)dr = 4\pi r^2 |\psi(r)|^2 dr = 4\pi r^2 |C|^2 e^{-2r/a} dr.$$

<sup>1</sup>Den kulesymmetriske sannsynlighetstettheten innebærer at elektronet er “snart her og snart der”. Klassisk er dette vanskelig å forestille seg når vi vet at dreieimpulsen er lik null. Moralen er at de klassiske forestillingene våre kommer til kort, her som så ofte ellers.

Normeringsintegralet kan vi da skrive slik:

$$1 = \int |\psi(r)|^2 d^3r = \int_0^\infty \underbrace{4\pi r^2 |C|^2 e^{-2r/a}}_{P_{\text{rad}}(r)} dr = |C|^2 4\pi (a/2)^3 \int_0^\infty x^2 e^{-x} dx = |C|^2 \pi a^3.$$

Med et praktisk fasevalg har vi da  $C = (\pi a^3)^{-1/2}$ , slik at radialtettheten er

$$P_{\text{rad}}(r) = 4\pi r^2 |\psi(r)|^2 = \frac{4r^2}{a^3} e^{-2r/a}.$$

Merk at radialtettheten  $P_{\text{rad}}(r)$  er sannsynligheten pr "radius-enhet". Legg også merke til at faktoren  $r^2$  i denne formelen kommer av at volumet av kuleskallet er proporsjonalt med  $r^2$ . Dette er grunnen til at radialtettheten har sitt maksimum for  $r > 0$  (i motsetning til sannsynligheten pr volumenhet, som jo er maksimal i origo for denne orbitalen). Ved derivasjon finner vi at radialtettheten er maksimal når

$$\frac{dP_{\text{rad}}(r)}{dr} \propto e^{-2r/a} [2r + r^2(-2/a)] = 0,$$

dvs for  $r = a$ . (For  $r = 0$  er  $P_{\text{rad}} = 0$ .) Ut fra dette kan vi si at den mest sannsynlige avstanden mellom elektronet og "kjernen" for denne orbitalen er  $r = a = a_0/Z$ , der  $a_0$  er Bohr-radien.

**d.** Analogt med beregningen av normeringsintegralet ovenfor finner vi at forventningsverdien av elektronets avstand fra kjernen er

$$\langle r \rangle = \int r |\psi(r)|^2 d^3r = \int_0^\infty r |\psi(r)|^2 4\pi r^2 dr \equiv \int_0^\infty r P_{\text{rad}}(r) dr.$$

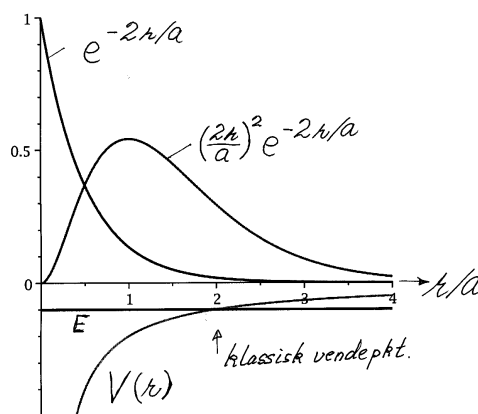
Innsetting av formelen for radialtettheten gir

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty r P_{\text{rad}}(r) dr = \frac{4}{a^3} \int_0^\infty r^3 e^{-2r/a} dr = \frac{4}{a^3} \left(\frac{a}{2}\right)^4 \int_0^\infty u^3 e^{-u} du = \frac{a}{4} \cdot 3! = \frac{3}{2}a,$$

som kan tas som *ett* mål for størrelsen av atomet når det er i grunntilstanden. (Vi skal se at det finnes flere slike mål for størrelsen.)

**e.** Det klassisk tillatte området er der hvor  $E > V(r)$ . For grunntilstanden er dette området altså bestemt av ulikheten

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e a^2} > -\frac{\hbar^2}{m_e a} \frac{1}{r} \implies r < 2a.$$



Figuren viser funksjonene  $\exp(-2r/a)$  og  $(2r/a)^2 \exp(-2r/a)$  (altså  $|\psi|^2$  og  $P_{\text{rad}}(r)$  i nokså vilkårlige enheter) som funksjoner av  $r/a$ . Vi har også tatt med potensialkurven og energilinja (i vilkårlige enheter). Skjæringspunktet mellom disse gir det klassiske vendepunktet (venderadien blir det her). Sannsynligheten for å finne elektronet utenfor det klassisk tillatte området er selvsagt arealet under kurven for  $P_{\text{rad}}(r)$ , utenfor  $r/a = 2$  (når hele arealet settes lik 1). På øyemål kan en vel anslå at arealet for  $r/a > 2$  er ca 25 % av hele arealet under kurven.

**f.** La oss regne ut sannsynligheten for å finne elektronet utenfor en radius  $r_0$ :

$$\begin{aligned} P_{r>r_0} &= \int_{r_0}^{\infty} P_{\text{rad}}(r) dr = \frac{4}{a^3} \int_{r_0}^{\infty} r^2 e^{-2r/a} dr = \frac{1}{2} \int_{2r_0/a}^{\infty} u^2 e^{-u} du \\ &= \frac{1}{2} [(-u^2 - 2u - 2)e^{-u}]_{2r_0/a}^{\infty} = (2\frac{r_0^2}{a^2} + 2\frac{r_0}{a} + 1)e^{-2r_0/a}. \end{aligned}$$

For  $r_0 = 2a$  fås  $P_{r>2a} = 13e^{-4} = 0.238$ . Så overslaget ovenfor var ikke så verst. (Men det må innrømmes at fasiten var kjent.)

**g.** Ut fra den kulesymmetriske sannsynlighetsfordelingen for posisjonen er det fristende å si at det hydrogenlignende atomet i grunntilstanden er kuleformet, eller i hvertfall "rundt", men uansett hvilken betegnelse vi bruker, får vi prøve å huske på at det vi egentlig kan uttale oss om er bølgefunksjonen og sannsynlighetstettheten, som begge er kulesymmetriske i dette tilfellet.

Men i motsetning til en kule har dette atomet åpenbart ingen "overflate", som danner et skille mellom atomets indre og omgivelsene. Så selv om *formen* er kulesymmetrisk, ser vi at det er vanskeligere å uttale seg presist om *størrelsen*, siden  $|\psi|^2$  jo i prinsippet er forskjellig fra null for alle  $r$  (for et isolert atom). Det enkleste er vel å si at "radien"  $a$  er et mål for *størrelsen* (og at  $a_0$  er et mål for størrelsen av et H-atom; jf betegnelsen Bohr-radius). Merk at for  $r = a$  er sannsynlighetstettheten redusert med en faktor  $e^2$ , altså ca 7.4 ganger mindre enn i origo. Et annet mål for størrelsen er den inverse av forventningsverdien  $\langle 1/r \rangle$ . Denne forventningsverdien viser seg å være  $1/a$  (noe du lett kan kontrollere ved å regne ut integralet  $\int_0^{\infty} (1/r) P_{\text{rad}} dr$ ), og antyder igjen at parameteren  $a$  er et fornuftig mål for størrelsen.

Zumdahl refererer til en kuleflate som omslutter 90 % av sannsynligheten. Dette svarer til en radius  $\approx 2.6a$ ; jf formelen i pkt. **e**, som gir  $P_{r>2.6a} = 0.11$ .

Ovenfor så vi at også  $\langle r \rangle = 3a/2$  kunne tas som et mål for størrelsen.

For hydrogen ( $Z = 1$ ) ville en mer empirisk definisjon være å ta utgangspunkt i massetettheten for flytende hydrogen, og regne seg fram til en radius knyttet til en antagelse om "tetteste kulepakning" (som i og for seg ikke er helt realistisk for væskefasen). Her, og ellers når H-atomet er "i kontakt med" (eventuelt bundet til) andre atomer, er det viktig å være klar over at "elektron-tettheten" vil avvike fra den vi har for et isolert atom.

**Kommentar til denne oppgaven:** For endimensjonale problemstillinger har vi lært at energiefunksjoner krummer *mot* akse i klassisk tillatte områder, rett og slett fordi den relative krumningen er negativ i disse områdene ifølge den tidsuavhengige Schrödingerligningen:  $\psi''/\psi = (2m/\hbar^2)[V(x) - E]$ . Da kan det kanskje virke forvirrende at bølgefunksjonen  $\psi(r) \propto \exp(-r/a)$  i denne oppgaven krummer bort fra  $r$ -aksen for alle  $r$ . Forklaringen er som følger: For et kulesymmetrisk potensial og for en kulesymmetrisk egenfunksjon (som her) tar den tidsuavhengige Schrödingerligningen en annen form enn ovenfor:

$$\nabla^2 \psi(r) = \frac{2m}{\hbar^2} [V(r) - E] \psi(r), \quad \text{med} \quad \nabla^2 \psi(r) = \left[ \frac{d^2 \psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi}{dr} \right].$$

Her ser vi at både  $\psi''$  og  $\psi'$  inngår, så vi kan ikke trekke de samme konklusjonene om krumning av  $\psi$  som i én dimensjon. Derimot skal vi se (i Tillegg 5) at funksjonen  $u(r) = r\psi(r)$  oppfyller ligningen

$$\frac{u''}{u} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(r) - E],$$

så *denne* vil krumme mot akse i klassisk tillatte områder. Du kan jo more deg med å sjekke at funksjonen  $r \exp(-r/a)$  har denne egenskapen.

## Løsning OPPGAVE 21 Litt mer om den hydrogenlignende grunntilstanden

**a.** Er vist i oppgaveteksten. Det eneste vi trenger er relasjonen  $\int (\hat{F}\Psi_1)^* \Psi_2 d\tau = \int \Psi_1^* \hat{F}\Psi_2 d\tau$  for en hermiteske operator  $\hat{F}$ , som gir

$$\int \Psi^* \hat{p}_x^2 \Psi d^3r = \int (\hat{p}_x \Psi)^* (\hat{p}_x \Psi) d^3r,$$

osv.

**b.** Med  $\psi(r) = (\pi a^3)^{-1/2} \exp(-r/a)$  finner vi at

$$\nabla \psi(r) = \hat{e}_r \frac{\partial}{\partial r} \psi(r) = \hat{e}_r \psi(r) \frac{-1}{a}, \quad \text{slik at} \quad \langle \mathbf{p}^2 \rangle = \hbar^2 \int |\nabla \psi|^2 d^3r = \frac{\hbar^2}{a_0^2} \int \psi^* \psi d^3r = \frac{\hbar^2}{a^2}, \quad \text{q.e.d.}$$

Da blir rms-hastigheten for elektronet

$$v_{rms} = \sqrt{\langle \mathbf{v}^2 \rangle} = \sqrt{\langle \mathbf{p}^2 \rangle} / m_e = \frac{\hbar}{m_e a} = \frac{Z\hbar}{m_e \cdot 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / (m_e e^2)} = Z \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} = Z\alpha c, \quad \text{q.e.d.}$$

I den kvantemekaniske beskrivelsen har elektronet ingen klassisk bane  $\mathbf{r}(t)$  og ingen veldefinert hastighet  $\mathbf{v}(t) = d\mathbf{r}(t)/dt$ , men vi kan vel være enige om at det ikke er i ro? (Rms-hastigheten  $v_{rms}$  er tross alt av størrelsesorden  $10^6$  m/s selv for  $Z = 1$ ! For *store*  $Z$  ser vi at den blir en betydelig andel av lyshastigheten. Beskrivelsen bør da egentlig foregå ved hjelp av *relativistisk* kvantemekanikk.) Merk ellers at dreieimpulsen er lik null i grunntilstanden, så bevegelsen kan ikke ha karakter av en rotasjonsbevegelse.

**c.** Forventningsverdien av den kinetiske energien blir

$$\langle K \rangle = \frac{\langle \mathbf{p}^2 \rangle}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e a^2} = -E \approx +13.6 \text{ eV} \cdot Z^2.$$

Forventningsverdien av  $1/r$  finner vi slik:

$$\begin{aligned} \langle 1/r \rangle_a &= \int \psi_a^* \frac{1}{r} \psi_a d^3r = \frac{1}{\pi a^3} \int_0^\infty e^{-2r/a} \frac{1}{r} \cdot 4\pi r^2 dr && (x \equiv 2r/a) \\ &= \frac{1}{a} \int_0^\infty e^{-x} x dx = \frac{1}{a}, \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

Da blir

$$\langle V \rangle_a = -\frac{Z\hbar^2}{m_e a_0} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{m_e a^2} = 2E, \quad \text{q.e.d.}$$

For grunntilstanden har vi altså

$$\langle K \rangle = -E = |E| \quad \text{og} \quad \langle V \rangle = 2E.$$

[Disse relasjonene viser seg å holde for alle de bundne energiegentilstandene for det hydrogenlignende atomet.]

## Løsning OPPGAVE 22 Begynnelsestilstand $\psi_a(r) = (\pi a^3)^{-1/2} \exp(-r/a)$ (with $Z = 1$ )

**a.** Som nevnt i oppgaveteksten er

$$\langle V \rangle_a = -\frac{\hbar^2}{m_e a_0^2} \frac{a_0}{a} = \langle V \rangle_{a_0} \frac{a_0}{a},$$

der  $\langle V \rangle_{a_0} \approx -27.2$  eV, så jo mindre  $a$  vi velger for den preparerte tilstanden  $\psi_a$ , desto mer negativ blir  $\langle V \rangle_a$ . Så det *går an* å oppnå lavere potensiell energi enn i grunntilstanden, Og det går an å finne en tilstand som ligger nærmere kjernen enn grunntilstanden, vilkårlig nær faktisk, fordi vi i prinsippet står fritt til å preparere en tilstand med vilkårlig liten  $a$ . Men som vi skal se — dette straffer seg!

Fra forrige oppgave har vi nemlig

$$\langle K \rangle_a = \frac{\langle \mathbf{p}^2 \rangle_a}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e a^2} = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \frac{a_0^2}{a^2} \approx +13.6 \text{ eV} \frac{a_0^2}{a^2} \propto \frac{1}{a^2}.$$

Her ser vi at jo mindre  $a$  vi velger — dvs jo mindre område vi skviser begynnelsestilstanden  $\psi_a$  inn i — desto større blir (nødvendigvis) gradienten og dermed kvantevillskapen. Dette er akkurat hva vi måtte vente ut fra uskarphetsrelasjonen.

Velger vi f.eks en begynnelsestilstand som er “halvparten så stor” som grunntilstanden ( $a = a_0/2$ ), ser vi at kvantevillskapen øker med en faktor 4, mens størrelsen av  $\langle V \rangle$  bare øker med en faktor 2:

$$\langle K \rangle_{a=a_0/2} \approx 54.4 \text{ eV}, \quad \langle V \rangle_{a=a_0/2} \approx -54.4 \text{ eV}, \quad \implies \quad \langle E \rangle_{a=a_0/2} = 0.$$

Så det vi har “vunnet” i form av lavere potensiell energi blir mer enn oppveid i form av økt kinetisk energi.

Prøver vi omvendt å “strekke” begynnelsestilstanden, ved å velge  $a = 2a_0$ , ser vi at resultatet blir

$$\langle E \rangle_{a=2a_0} = \langle K + V \rangle \approx \frac{1}{4} \cdot 13.6 \text{ eV} + \frac{1}{2} \cdot (-27.2) \text{ eV} = -\frac{3}{4} \cdot 13.6 \text{ eV},$$

som igjen ligger høyere enn energien for grunntilstanden.

**b.** At

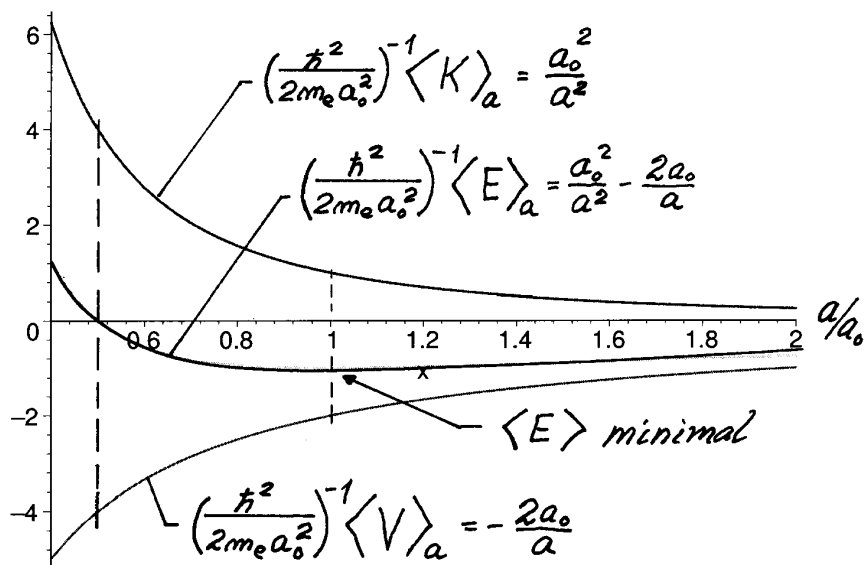
$$\langle E \rangle_a = \langle K + V \rangle_a = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \left( \frac{a_0^2}{a^2} - \frac{2a_0}{a} \right)$$

må ha et minimum for en viss verdi av  $a$ , skjønner vi straks ved å lage prinsippskisser av de to bidragene som funksjoner av  $a$ . Ved å derivere finner vi at

$$\frac{\partial \langle E \rangle_a}{\partial a} = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \left( -2 \frac{a_0^2}{a^3} + \frac{2a_0}{a^2} \right) = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \frac{2a_0}{a^2} \left( -\frac{a_0}{a} + 1 \right).$$

Denne er ganske riktig negativ for  $a < a_0$ , positiv for  $a > a_0$  og lik null for  $a = a_0$ , hvor  $\langle E \rangle_a$  altså har sitt minimum.

Figuren nedenfor viser forventningsverdiene av  $K$ ,  $V$  og  $E$  i enheter av Rydberg-energien  $\hbar^2/(2m_e a_0^2) = 13.6$  eV, som funksjoner av  $a/a_0$ . Her ser vi hvordan  $\langle V \rangle$  går som  $-2a_0/a$ , mens  $\langle K \rangle$  går som  $(a_0/a)^2$ . Dette betyr at  $\langle V \rangle$  og  $\langle K \rangle$  vil dominere for henholdsvis store og små  $a$ , og da må summen av disse nødvendigvis ha et minimum, som altså opptrer for  $a = a_0$ .



### Moral og utfyllende kommentarer

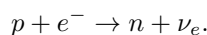
- Moralen i denne historien er at vi alltid kan preparere atomet i en begynnelsestilstand ( $\psi_a$ ) som har *mindre utstrekning* (og lavere  $\langle V \rangle$ ) enn grunntilstanden, men kvantevillskapen sørger da for at  $\langle E \rangle$  blir *større* enn grunntilstandsenergien. Det koster altså energi å “skvise” systemet, og forsåvidt også å “strekke” det; grunntilstanden representerer et energiminimum. Denne egenskapen henger som vi ser nøye sammen med kvantevillskapen. Derfor kan vi gjerne si at det er kvantevillskapen som hindrer atomer og små og store molekyler i å kollapse, ved at elektronene “dletter” inn mot kjernene.<sup>2</sup>
- Det er en enkel sak å vise (ved innsetting) at av funksjonene  $\psi_a(r)$  er det bare  $\psi_{a_0}$  (grunntilstanden) som er en egenfunksjon til  $\widehat{H}$ . Så med en “skviset” begynnelsestilstand  $\psi_a(r)$  (med  $a < a_0$ ) får vi en ikke-stasjonær tilstand. For  $t > 0$  vil en slik tilstand straks begynne å “ese ut”.
- Finnes det andre “lure” begynnelsestilstander  $\Psi(\mathbf{r}, t = 0)$  enn de vi har undersøkt her, som kan tenkes å gi lavere  $\langle E \rangle$  enn for grunntilstanden? Svaret er nei, og beviset er enkelt: Uansett hvilken lur tilstand  $\Psi$  vi velger ved  $t = 0$ , så kan denne utvikles i energiegentilstandene for dette atomet. Disse kan vi for enkelhets skyld kalle  $\psi_1, \psi_2$  osv, med energiene  $E_1, E_2$  osv, der  $E_1$  er grunntilstandsenergien. Vi har altså

$$\Psi = \sum_{n=1} c_n \psi_n,$$

der  $|c_n|^2$  er sannsynligheten for å måle energien  $E_n$ . Vha disse sannsynlighetene kan forventningsverdien av energien for den lure tilstanden uttrykkes slik:

$$\langle E \rangle_{\Psi} = \sum_{n=1} |c_n|^2 E_n \quad (E_1 < E_2 \leq E_3, \dots)$$

<sup>2</sup>At atomer og molekyler ikke kolliderer frivillig er én ting; en annen ting er at de kan presses sammen pga ytre trykk. Det er dette som skjer i kompakte stjerner, og ved dannelsen av nøytronstjerner, hvor elektroner og protoner “presses” til å “konvertere” til nøytroner, ved såkalt invers  $\beta$ -desintegrasjon:



$$\geq E_1 \sum_n |c_n|^2 = E_1.$$

Uansett hvor lure vi er, blir altså  $\langle E \rangle$  større enn grunntilstandsenergien. (Likhetstegnet gjelder bare når vi velger  $\Psi$  lik grunntilstanden  $\psi_{a_0}$ .) Så grunntilstanden representerer virkelig et energiminimum. (Mer om dette finner du i boka side 154, men det er utenfor pensum i dette kurset.) Moralen er at grunntilstanden svarer til et energiminimum. Dette gjelder ikke bare for  $H$ -atomet, men for alle systemer, som f.eks tyngre atomer, molekyler osv.

- For eksemplet med  $\psi_{a_0/2}$ , som ga  $\langle E \rangle = 0$ , skjønner vi nå at det må være betydelige sannsynligheter for å måle  $E > 0$ , som vil svare til at elektronet stikker av (havner i en kontinuumstilstand).