

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

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

Konklusjonen er at $\cos \theta$ (og dermed Y_{10}) er en egenfunksjon til $\hat{\mathbf{L}}^2$ 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

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

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

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

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

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

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

Altså er $\sin \theta e^{\pm i\phi}$ (og dermed $Y_{1\pm 1}$) egenfunksjoner til $\hat{\mathbf{L}}^2$ 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 \hat{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 radialligningen 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 radialkvantetall (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 radialligningen 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 radialligningen, 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 radialkvantetallet 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 radialkvantetallet n_r maksimalt være lik $n - 1$. (Jf tabellen med radialfunksjoner.)

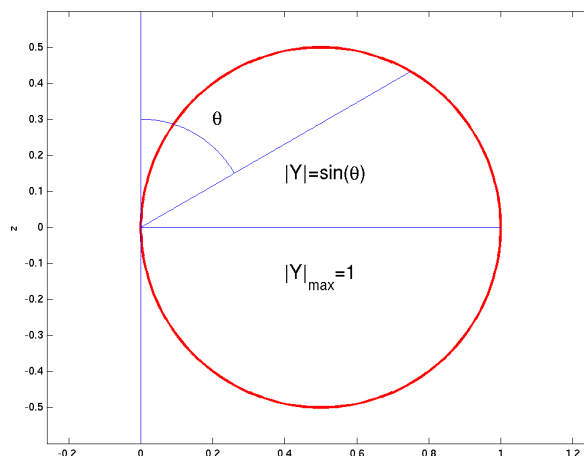
c. (c1): ϕ -avhengigheten til de sfæriske harmoniske Y_{lm} er generelt gitt av faktoren $e^{im\phi}$.

(c2): For $m = 0$ er altså funksjonene Y_{l0} uavhengige av ϕ , 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 θ .)

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

(c6):

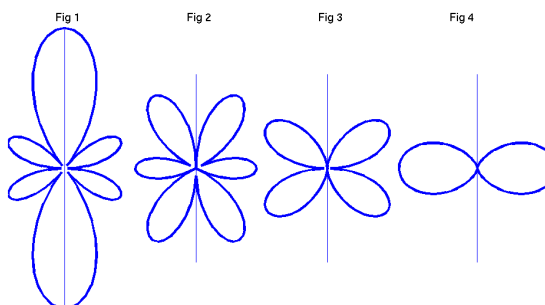


Figuren viser polardiagrammet for funksjonen

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

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 θ -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 $\pi - 40\text{--}50$ grader. Følgelig er graden av polynomet i $\cos \theta$ lik 3, slik at $l - |m| = \underline{l = 3}$. 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

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

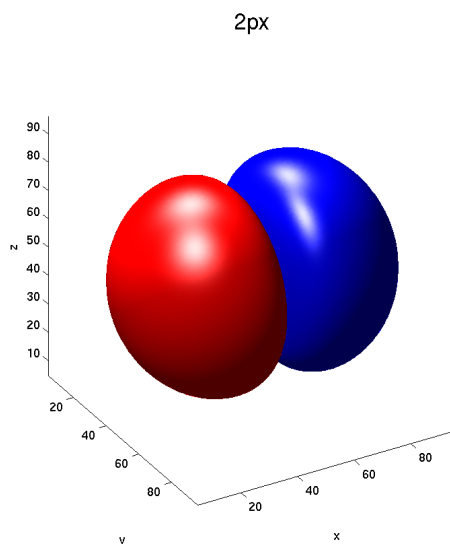
og vi ser at dette harmonerer med diagrammet. **(d3):** I figurene 2–4 er de tilsvarende antallene av nullpunkter (for $0 < \theta < \pi$) henholdsvis 2, 1 og null. Så disse viser henholdsvis $|Y_{3,\pm 1}|$, $|Y_{3,\pm 2}|$ og $|Y_{3,\pm 3}|$.

(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).

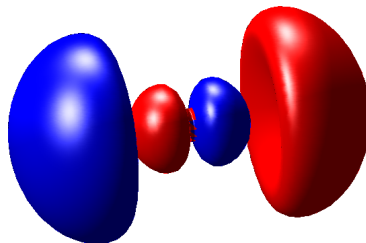
e. (e1): Orbitalen $\psi_{2p_z} = \psi_{210}$ er antisymmetrisk med hensyn på origo (dvs mhp rominversjon), og slik skal det være. Pariteten bestemmes av vinkelfunksjonen, og pariteten til alle vinkelfunksjoner med $l = 1$ er negativ (generelt $(-1)^l$). **(e2):** xy -planet er nodeplan. **(e3):** På den øvre nodeflaten har $2p_z$ -orbitalen ψ_{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 ψ_{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



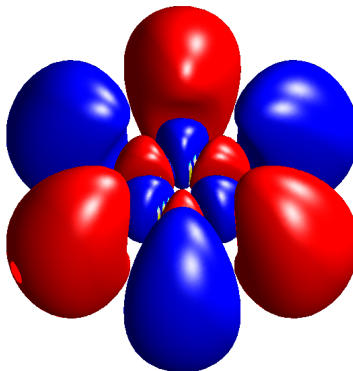
g.



(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):**

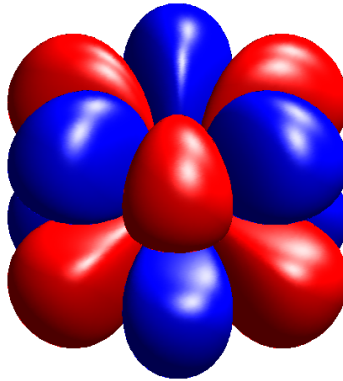


Siden Y_{l3} har $m = 3$, må dreieimpulskvantetallet l minst være lik 3. **(h2):** Siden denne vinkelfunksjonen Y_{l3} ikke har nullpunkter (unntatt ved "polene"), må den inneholde et polynom i $\cos \theta$ av grad $l - |m| = 0$. Følgelig er $l = 3$. **(h3):** Fra figuren framgår det videre at radialfunksjonen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

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.