

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 $x = \dots, -a, 0, b, a+b, \dots$ 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 egenskapene, så følger det at den førstederiverte

$$\psi'(x) = \int dx \psi''(x)$$

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 kontinuiteten er å starte med et kontinuerlig potensial som vi gjør mer og mer diskontinuerlig. Se på intervallet $-a < x < b$ og la f.eks.

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

mens $V(x) = 0$ for $-a \leq x \leq -\epsilon < 0$ og $V(x) = V_0$ for $0 < \epsilon \leq x \leq b$. 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 begge være kontinuerlige der så lenge $\epsilon > 0$. Integrasjon av Schrödingerligningen fra $-\epsilon$ til ϵ gir at

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

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 $\epsilon \rightarrow 0$, og $\psi'(x)$ må fortsatt være kontinuerlig i $x = 0$ etter grenseovergangen $\epsilon \rightarrow 0$. 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

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

Poenget her er at

$$\frac{d^2}{dx^2} \cos(\beta x) = -\beta^2 \cos(\beta x) , \quad \frac{d^2}{dx^2} \sin(\beta x) = -\beta^2 \sin(\beta x) .$$

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

$$\frac{d^2}{dx^2} \cosh(\beta x) = \beta^2 \cosh(\beta x) , \quad \frac{d^2}{dx^2} \sinh(\beta x) = \beta^2 \sinh(\beta x) ,$$

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

$$A_1 = A_2 , \quad \alpha B_1 = \beta B_2 .$$

For $x = b$ får vi ligningene

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

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

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

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 energintervall, og ikke oppfylt mellom disse tillatte intervallene.

I følge figurene 1, 2 og 3 er det et tillatt energintervall 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 energibånd 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 et 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 energibånd, 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 elektronspinn), 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

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \int_{-a/2}^{a/2} dx_1 \int_{-a/2}^{a/2} dx_2 (x_1 - x_2)^2 |\psi(x_1, x_2)|^2.$$

Vi ekspanderer

$$(x_1 - x_2)^2 = x_1^2 - 2x_1x_2 + x_2^2.$$

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

$$\begin{aligned} \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 (x_1 - x_2)^2 |\psi(x_1) \psi_2(x_2)|^2 \\ &= \left(\int_{-a/2}^{a/2} dx_1 x_1^2 |\psi_1(x_1)|^2 \right) \left(\int_{-a/2}^{a/2} dx_2 |\psi_2(x_2)|^2 \right) \\ &\quad - 2 \left(\int_{-a/2}^{a/2} dx_1 x_1 |\psi_1(x_1)|^2 \right) \left(\int_{-a/2}^{a/2} dx_2 x_2 |\psi_2(x_2)|^2 \right) \\ &\quad + \left(\int_{-a/2}^{a/2} dx_1 |\psi_1(x_1)|^2 \right) \left(\int_{-a/2}^{a/2} dx_2 x_2^2 |\psi_2(x_2)|^2 \right). \end{aligned}$$

Enpartikkelbølgefunksjonene er normerte slik at

$$\int_{-a/2}^{a/2} dx_1 |\psi_1(x_1)|^2 = \int_{-a/2}^{a/2} dx_2 |\psi_2(x_2)|^2 = 1 .$$

Videre har vi at

$$\int_{-a/2}^{a/2} dx_1 x_1 |\psi_1(x_1)|^2 = \int_{-a/2}^{a/2} dx_2 x_2 |\psi_2(x_2)|^2 = 0 ,$$

fordi integrandene er antisymmetriske når vi skifter fortegn på x_1 og x_2 .

Vi substituerer $x_1 = au/\pi$ og får at

$$\begin{aligned} \int_{-a/2}^{a/2} dx_1 x_1^2 |\psi_1(x_1)|^2 &= \left(\frac{a}{\pi}\right)^3 \frac{2}{a} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} du u^2 \cos^2 u = \frac{2a^2}{\pi^3} \left(\frac{\pi^3}{24} - \frac{\pi}{4}\right) \\ &= a^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}\right) . \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \int_{-a/2}^{a/2} dx_2 x_2^2 |\psi_2(x_2)|^2 &= \left(\frac{a}{2\pi}\right)^3 \frac{2}{a} \int_{-\pi}^{\pi} du u^2 \sin^2 u = \frac{a^2}{4\pi^3} \left(\frac{\pi^3}{3} - \frac{\pi}{2}\right) \\ &= a^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{8\pi^2}\right) . \end{aligned}$$

I tilfelle 1 får vi alt i alt at

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

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

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

Siden bølgefunksjonene ψ_1 og ψ_2 begge er reelle, er

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

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

$$\begin{aligned} \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle &= \frac{1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} dx_1 x_1^2 |\psi_1(x_1)|^2 + \frac{1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} dx_1 x_1^2 |\psi_2(x_1)|^2 \\ &\quad + 2 \left(\int_{-a/2}^{a/2} dx_1 x_1 \psi_1(x_1) \psi_2(x_1) \right) \left(\int_{-a/2}^{a/2} dx_2 x_2 \psi_1(x_2) \psi_2(x_2) \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} dx_2 x_2^2 |\psi_2(x_2)|^2 + \frac{1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} dx_2 x_2^2 |\psi_1(x_2)|^2 . \end{aligned}$$

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

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

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

I tilfelle 2 får vi da alt i alt at

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

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

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

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

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

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

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

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

$$S_- = S_x - iS_y = S_{1x} + S_{2x} - i(S_{1y} + S_{2y}),$$

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

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

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

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 forventningsverdi

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (5)$$

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

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle .$$

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

Resonnement 1: Hermitisk konjugering av Schrödingerligningen gir at

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi | = \langle \psi | H .$$

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

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

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

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

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

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

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 $[x, p_x] = i\hbar$ er umulig. La for eksempel $|\psi\rangle$ være en egenvektor for x , i denne tilstanden må vi ha at

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

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

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

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

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

Av dette konkluderer vi at

$$[\vec{r}, H] = \frac{i\hbar}{m_e} \vec{p} . \quad (7)$$

Tilsvarende har vi at

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

og vi konkluderer at

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

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

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

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

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

Altså er

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

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

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

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

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

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

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

og forventningsverdien av p_x^2 er garantert ikke-negativ:

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