ØVING 1

KJ1041: KJEMISK BINDING, SPEKTROSKOPI OG KINETIKK

1) I kvantemekanikken er ethvert fysisk system beskrevet av en *bølgefunksjon* ψ, også kalt en *tilstand*. For eksempel, en partikkel som lever langs x-aksen, mellom $x = 0$ og $x = L$ ('en partikkel i boks'), er beskrevet av en bølgefunksjon $\psi(x)$. Hva sier Borns fortolkning om sannsynligheten for at man finner partikkelen i et område (a, b) på x-aksen i en måling av partikkelens posisjon?

2) La oss anta at partikkelens tilstand er som følger:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\sin\Big(\frac{2\pi x}{L}\Big). \tag{1}$$

Vi gjør så en måling av partikkelens posisjon. Hva er sannsynligheten for at vi finner partikkelen mellom $\frac{1}{4}L$ og $\frac{3}{4}L$? Et nyttig integral: $\int \sin(x)^2\,\mathrm{d}x = -\frac{1}{2}\sin(x)\cos(x) + \frac{x}{2} + C$.

3) Vis at

$$\int_0^L |\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x = 1. \tag{2}$$

Hva sier denne likningen ved Borns fortolkningsregel? Gi en kort forklaring på hvorfor en bølgefunksjon må være normalisert for at Born-regelen skal gi mening.

4) For hver observerbar størrelse Ω finnes en tilhørende operator $\hat{\Omega}$. Hva er definisjonen på en operator?

5) Man kan måle partikkelens posisjon x og bevegelsesmengde p_x, og disse størrelsene har tilhørende operatorer, $\hat{x}$ og $\hat{p}_x$, definert ved

$$\hat{x}\,\varphi(x) = x\,\varphi(x), \quad \hat{p}_x\,\varphi(x) = -i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial x}\varphi(x), \tag{3}$$

der $\varphi(x)$ er en vilkårlig funksjon.

Anta at vi preparerer partikkelen i tilstanden ψ og måler dens posisjon og bevegelsesmengde fem tusen ganger. En god tilnærming av gjennomsnittet til den observerte posisjonen og bevegelsesmengden er da gitt ved forventningsverdiene $\langle\hat{x}\rangle$ og $\langle\hat{p}_x\rangle$:

$$\langle\hat{x}\rangle = \int_0^L \psi(x)^*\,\hat{x}\,\psi(x)\,\mathrm{d}x, \quad \langle\hat{p}_x\rangle = \int_0^L \psi(x)^*\,\hat{p}_x\,\psi(x)\,\mathrm{d}x. \tag{4}$$

Her er $\psi(x)^*$ den kompleks-konjugerte av $\psi(x)$. Vis at

$$\langle\hat{x}\rangle = L/2, \quad \langle\hat{p}_x\rangle = 0, \tag{5}$$

for en partikkel med tilstand ψ gitt i likning (1).

6) I likning (4) har vi antatt at $\psi(x)$ er en normalisert bølgefunksjon. Gi definisjonene på $\langle\hat{x}\rangle$ og $\langle\hat{p}_x\rangle$ for en ikke-normalisert bølgefunksjon $\tilde{\psi}(x)$.

7) En funksjon φ er en *egenfunksjon* av en operator $\hat{\Omega}$ dersom $\hat{\Omega}\varphi(x) = \omega\varphi(x)$, der ω er et tall kalt *egenverdien*. Hvis dette er tilfellet sier vi at tilstanden φ har den bestemte verdien ω for den observerbare størrelsen Ω (en måling av Ω vil alltid gi verdien ω).
   a) Kan vi si at partikkelen beskrevet av ψ i likning (1) har en bestemt posisjon og/eller bevegelsesmengde? (Hint: sjekk om ψ er en egenfunksjon av $\hat{x}$ og $\hat{p}_x$.)
   b) Hvordan kan man forstå resultatet $\langle\hat{p}_x\rangle = 0$ når partikkelen ikke er i ro (med andre ord, ikke har en bestemt bevegelsesmengde lik null)?