Inlämningsuppgift 2 i atomers och molekylers struktur

(28.1.2000)

1. **Partikeln i lådan** Lös Schrödingers ekvation för partikeln i lådan. Den en-dimensionella lådans dimension är L. Beräkna excitationsenergin för excitationen från systemets grundtillstånd (ψ_1) till dess första exciterade tillstånd (ψ_2). Beräkna förväntningsvärdet för rörelsemängdsoperatorn p och för p^2 för grundtillståndet. Hur stor är överlappet mellan ψ_1 och ψ_2?

2. **Hermite polynom:** Konstruera Hermite polynomet H_3 ($\nu = 3$) med hjälp av rekursionsrelationen för Hermite polynomen, samt normalisera den motsvarande vibrationsfunktionen.

3. **Klotfunktioner:** Visa att $\mathrm{Y}_2^1(\theta, \phi) = (\frac{15}{8\pi})^{1/2} cos(\theta) sin(\theta) e^{i\phi}$ är en egenfunktion till $\nabla^2(\theta, \phi)$ samt att den är normaliserad.

4. **Formella vågfunktioner:** Normalisera vågfunktionen $\psi = \psi_1 + \psi_2$ när ψ_1 och ψ_2 är egenfunktioner till samma Hamilton-operator med energiegenvärdena ϵ_1 respektive ϵ_2. Beräkna även tillståndets energi som funktion av ϵ_1 och ϵ_2.

5. **Kommutering:** De tre komponenterna av banimpulsmomentoperatorn kan skrivas som $\hat{l}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$, $\hat{l}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z$ och $\hat{l}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_z$. (Klassiskt som en vektorkryssprodukt). Visa att $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$ och $\hat{l}_z$ inte kommuterar. Kan $l_x = < \hat{l}_x >$ och $l_y = < \hat{l}_y >$ bestämmas samtidigt ?

6. **Förväntningsvärden:** Hur stor är sannolikheten att en elektron i väteatomens grundtillstånd befinner sig utanför $2a_0$ från atomkärnan. a_0 är bohrradien.