ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ Ι

ΑΣΚΗΣΕΙΣ 5

1. Τα $\phi_1 = N_1 \exp(-r)$ και $\phi_2 = N_2 r \exp(-r)$ είναι δύο μη ορθοκανονικά τροχιακά. Υπολογίστε τους συντελεστές κανονικοποίησης N_1 και N_2. Βρείτε δύο γραμμικούς συνδυασμούς των ϕ_1 και ϕ_2 που να είναι ορθογώνιοι μεταξύ τους.
2. Αποδείξτε ότι ο τελεστής θέσης $(\hat{x})$ είναι Ερμιτιανός.
3. Αποδείξτε ότι ο τελεστής ορμής $(\hat{p})$ είναι Ερμιτιανός.
4. Δείξτε ότι οι ιδιοτιμές ενός Ερμιτιανού τελεστή είναι πραγματικές και οι ιδιοσυναρτήσεις ορθογώνιες μεταξύ τους.
5. Ο τελεστής $\hat{A}$ είναι Ερμιτιανός και οι ϕ_1, ϕ_2 και ϕ_3 ορθοκανονικές ιδιοσυναρτήσεις με αντίστοιχες ιδιοτιμές $a_1 = 2, a_2 = 3$ και $a_3 = 2$.
Υπολογίστε τα παρακάτω ολοκληρώματα:
$$< \phi_1|\hat{A}|\phi_1 >, < \phi_1|\phi_1 >, < \phi_1|\phi_2 >, < \phi_1|\hat{A}|\phi_3 >$$
$$< \phi_1 + \phi_3|\hat{A}|\phi_1 - \phi_3 >, < \phi_1 - \phi_3|\hat{A}|\phi_1 - \phi_3 >$$
6. Δείξτε ότι εάν δύο τελεστές μετατίθενται τότε έχουν τις ίδιες ιδιοσυναρτήσεις.
7. Η μικρότερη συχνότητα απορρόφησης του $^{12}C^{16}O$ είναι 115,271 s^{-1}.
ι) Υπολογίστε τη ροπή αδρανείας του CO.
ιι) Ποιά είναι η συχνότητα φωτός για τη μετάβαση από το περιστροφικό επίπεδο $J = 1$ στο $J = 2$.
8. Για έναν άκαμπτο περιστροφέα η ενέργεια μηδενικού σημείου είναι μηδέν. Βρίσκεται αυτό σε αντίθεση με την αρχή αβεβαιότητας·