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 Ερμητιανός.

3. Ο τελεστής $\hat{A}$ είναι Ερμητιανός 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:

$$< \phi_1|\hat{A}|\phi_1 >, < \phi_1|\phi_1 >, < \phi_1|\phi_2 >, < \phi_1|\hat{A}|\phi_3 >$$

$$< \phi_1 + \phi_3|\hat{A}|\phi_1 - \phi_3 >, < \phi_1 - \phi_3|\hat{A}|\phi_1 - \phi_3 >$$

4. Η μικρότερη συχνότητα απορρόφησης του $^{12}C^{16}O$ είναι 115,271 s^{-1}.

   i) Υπολογίστε τη ροπή αδρανείας του CO.

   ii) Ποιά είναι η συχνότητα φωτός για τη μετάβαση από το περιστροφικό επίπεδο $J = 1$ στο $J = 2$.

5. Για έναν άκαμπτο περιστροφέα η ενέργεια μηδενικού σημείου είναι μηδέν. Βρίσκεται αυτό σε αντίθεση με την αρχή αβεβαιότητας;