

Zadatak 1.

Skup operatora $U(a)$, koji ovise o realnom parametru a , ima svojstvo

$$U(a_1 + a_2) = U(a_1)U(a_2) , \quad U(0) = 1$$

Pokažite da $U(a)$ ima oblik

$$U(a) = e^{iaF}$$

gdje je F operator koji određuje operator U za infinitezimalno male vrijednosti parametra a :

$$U(d a) = 1 + i F d a$$

Ilustrirajte taj rezultat na operatoru pomaka $T_a \Psi(x) = \Psi(x+a)$.

Zadatak 2.

Pokažite da se svojstvene vrijednosti kvadrata operatora zamaha $\vec{L}^2 = l(l+1)$ mogu izvesti iz elementarne teorije vjerojatnosti ako prihvatimo tvrdnju da projekcije operatora zamaha na bilo koju prostornu os mogu imati samo vrijednosti $-l, -l+1, \dots, 0, 1, l-1, l$.

Zadatak 3.

Kako se mijenjaju energetske razine $E_{n_r l}$ u centralno-simetričnom potencijalu ako je

- a) l zadan, a n_r raste ?
- b) n_r zadan, a l raste ?

Zadatak 4.

Izračunajte vlastite vektore i vlastite vrijednosti operatora

$$F = a + \vec{b} \cdot \vec{\sigma}$$

gdje su $\vec{\sigma}$ Paulijeve matrice, a je realni parametar i \vec{b} je neki realni vektor.

Zadatak 5.

Ako bismo molekulske orbitale molekule LiH sastavljali od atomskih orbitala, koliko bismo imali Slaterovih determinanata s kojima bismo, pojedinačno, napravili Hartree-Fockov sustav jednadžbi?

KVANTNA KEMIJA 14. vježbe