Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I Sommersemester 2017

4. Übungsblatt

17.5.2017

1. Berechnen Sie folgende drei Erwartungswerte für die normierte Wellenfunktion Ψ:

$$\langle \Psi | \hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x | \Psi \rangle \ , \ \langle \Psi | \hat{p}_x \hat{y} - \hat{y} \hat{p}_x | \Psi > \rangle \ , \ \langle \Psi | \hat{p}_x \hat{x}^2 - \hat{x}^2 \hat{p}_x | \Psi \rangle$$

Hinweis: Nutzen Sie aus, was Sie über den Kommutator (Vertauschungsrelation) von p_x und $\hat{x}$ wissen. Nützlich sind auch die folgenden Rechenregeln für Kommutatoren dreier Operatoren $\hat{A}$, $\hat{B}$ und $\hat{C}$:

$$[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]$$
$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$$
$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$$

2. Bereits in Aufgabe 5 haben Sie die zeitabhängige Schrödingergleichung kennengelernt. Sie lautet in kompakter Notation:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

wobei $\hat{H}$ der sogenannte Hamiltonoperator ist, der die Gesamtenergie des Systems beschreibt, die sich aus der Summe aus der kinetischen und der potentiellen Energie ergibt ($\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$). Separieren Sie die Zeitabhängigkeit aus obiger Gleichung. Oder mit anderen Worten, machen Sie den Schritt von der zeitabhängigen zur zeitunabhängigen Schrödingergleichung !!

Hinweis: Machen Sie sich zunächst klar, dass die Schrödingergleichung eine Differentialgleichung von (mindestens) zwei unterschiedlichen Variablen ist. Eine einfache Lösung erhält man, wenn man diese beiden Variablen separieren kann (Das bekannte Verfahren heisst auch: Trennung der Variablen). Eine Separation ist dabei möglich, wenn man die folgenden zwei Einschränkungen macht (bitte begründen): a) $\hat{H}$ ist nicht explizit von t abhängig und b) für Ψ ist ein Produktansatz $\Psi(x,t) = \Psi(x) f(t)$ möglich.

Please turn page!!

3. Ermitteln Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren der folgenden Matrix.

(a) $$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

4. In der Quantenmechanik kommen vor allem lineare und hermitische Operatoren vor.

   (a) Man nennt Operatoren linear, wenn gilt:

   $$\hat{A}(af + bg) = a\hat{A}f + b\hat{A}g$$

   mit den Konstanten a und b, den Funktionen f und g dem Operator $\hat{A}$. Sind die folgenden Operatoren linear? Beweisen Sie ihre Antwort.

   - Das Quadrat einer Funktion
   - Differentiation
   - Integration
   - Logarithmus einer Funktion

   (b) Ein Operator ist hermitisch, wenn gilt:

   $$\int f_m^* \hat{A} f_n d\tau = \left\{ \int f_n^* \hat{A} f_m d\tau \right\}^*$$

   Zeigen Sie, dass der Ortsoperator $\hat{x} = x\cdot$ und der Impulsoperator $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ hermitisch sind. Hinweis: $(f^*)^* = f$; benutzen Sie im Falle des Impulsoperators die partielle Integration für die Beweisführung.

   (c) Der Kommutator von $\hat{A}$ und $\hat{B}$, geschrieben als $[\hat{A}, \hat{B}]$, hat den Wert $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Benutzen Sie eine Funktion $f(x)$ und berechnen Sie den Kommutator $[\hat{x}, \hat{p}_x]$, d.h. berechnen Sie $(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})f(x)$