Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I Sommersemester 2017

7. Übungsblatt

14.6.2017

1. In der Vorlesung wurden für die Koordinatentransformation in Kugelkoordinaten die Beziehungen

$$\begin{aligned} x &= r \sin\vartheta \cos\varphi \\ y &= r \sin\vartheta \sin\varphi \\ z &= r \cos\vartheta \end{aligned}$$

   angegeben.

   (a) Geben Sie die Transformationsgleichungen für r, ϑ und φ an, also $r = r(x, y, z)$, $\vartheta = \vartheta(x, y, z)$ und $\varphi = \varphi(x, y, z)$.

   (b) Drücken Sie den Punkt mit den kartesischen Koordinaten $(x, y, z) = (2, 1, 3)$ über seine korrespondierenden Kugelkoordinaten r, ϑ, φ aus.

2. Berechnen Sie den Kommutator von

   (a)

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z]$$

   (b)

$$[\hat{L}_x, \hat{L}^2]$$

   Die folgenden Kommutatorregeln vereinfachen ggfs. die Rechungen:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$$

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

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

Please turn page!!

3. In Kugelkoordinaten lautet der Operator für die z-Komponente des Drehimpulses:

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Ist $f(\varphi) = e^{i\varphi}$ eine Eigenfunktion zu diesem Operator? Wenn ja, berechnen Sie den Eigenwert.

4. Zeigen Sie, dass die folgenden Beziehungen zwischen Operatoren gelten:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}\right) r = 2\left(\frac{\partial}{\partial r}\right) + r\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}\right)$$

und

$$\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right) r^2 \left(\frac{\partial}{\partial r}\right) = 2\left(\frac{\partial}{\partial r}\right) + r\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}\right)$$