Prof. D. Egorova

WS 2011/12
Blatt 1
10.11.2011

Übungen zur Vorlesung
Theoretische Chemie: Quantenmechanik

1. Wir betrachten einen dreidimensionalen kartesischen Raum mit den Koordinaten x, y, z.

   (a) Schreiben Sie den Impulsoperator $\hat{p}$ und seine drei Komponenten $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ sowie den Operator der kinetischen Energie $\hat{T}$ und seine drei Komponenten $\hat{T}_x$, $\hat{T}_y$, $\hat{T}_z$ auf.

   (b) Rechnen Sie die Kommutatoren $[\hat{p}_z, \hat{z}]$, $[\hat{p}_x, \hat{y}]$, $[\hat{T}_x, \hat{p}_x]$ und $[\hat{T}_y, \hat{y}]$ aus und diskutieren Sie die physikalische Bedeutung des Ergebnisses.

2. Bilden Sie den Hamiltonoperator $\hat{H}$ für

   (a) ein freies Teilchen, das sich nur entlang der x - Achse bewegen kann.

   (b) den eindimensionalen harmonischen Oszillator.

3. Postulat 4 der Vorlesung definiert die Eigenwertgleichung:

$$\hat{F}\phi_i = F_i\phi_i.$$

   Bestimmen Sie die Eigenfunktionen des Operators $\hat{p}_x$.

4. In der Quantenmechanik spielen die Legendre-Polynome $P_n(x)$ eine wichtige Rolle (Eigenfunktionen des Bahndrehimpulsoperators). Die Polynome $P_1(x)$, $P_2(x)$ und $P_3(x)$ sind wie folgt gegeben:

$$P_1(x) = x \qquad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \qquad P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x).$$

   Wir definieren den komplexen Vektorraum $\mathbb{V}$ mit Elementen

$$f(x) = c_1P_1(x) + c_2P_2(x) + c_3P_3(x); \quad -1 \leq x \leq 1; \quad c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{C},$$

   in dem das Skalarprodukt (innere Produkt) durch

$$\langle f|g\rangle = \int_{-1}^{1} dx\ f^*(x)\ g(x)$$

   gegeben ist.

   (a) Bestimmen Sie $\{f_1 = c_1P_1(x), f_2 = c_2P_2(x), f_3 = c_3P_3(x)\}$ so, daß sie eine Orthonormalbasis von $\mathbb{V}$ darstellen und zeigen Sie die Orthogonalität der Basisvektoren.

   (b) Bestimmen Sie die Komponenten der Funktion $g(x) = 5x^3 + i\frac{3}{2}x^2 + (\sqrt{6} - 3)x - \frac{i}{2}$ in der Basis $\{|f_n\rangle\}$, $n = 1, 2, 3$.

5. Lösen Sie die stationäre Schrödingergleichung $\hat{H}\Psi = E\Psi$, $E > 0$ für das Teilchen von Aufgabe 2a. Schreiben Sie die erhaltene allgemeine Lösung sowohl in der exponentiellen als auch in der trigonometrischen Form auf. Beachten Sie dabei, dass für die Wellenfunktion Ψ auch komplexe Lösungen zugelassen sind. Vergleichen Sie die erhaltene Wellenfunktion mit der Eigenfunktion des Impulsoperators (Aufgabe 3).

6. Die auf dem Intervall $[0, 2\pi]$ definierten Funktionen

$$f_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \qquad f_2(x) = \frac{\sin(kx)}{\sqrt{\pi}}, \qquad f_3(x) = \frac{\cos(kx)}{\sqrt{\pi}}, \qquad k \in \mathbb{N}$$

bilden bezüglich des Skalarprodukts

$$\langle f|g\rangle = \int_0^{2\pi} dx\; f^*(x)\; g(x)$$

eine Orthonormalbasis des Vektorraums

$$\mathbb{V} = \{f : [0, 2\pi] \to \mathbb{C}; f(x) = c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x) + c_3 f_3(x); c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{C}\}.$$

Wir betrachten den Impulsoperator $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ auf dem Vektorraum $\mathbb{V}$.

(a) Bestimmen Sie die Matrixdarstellung

$$p_{nm} = \langle f_n|\hat{p}|f_m\rangle = \int_0^{2\pi} dx\; f_n^*(x)\; \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\; f_m(x), \qquad n, m = 1, 2, 3$$

des Operators $\hat{p}$ bezüglich der Basis $\{|f_1\rangle, |f_2\rangle, |f_3\rangle\}$

(b) Bestimmen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren der Matrix p_{nm}, $n, m = 1, 2, 3$, sowie die Eigenfunktionen von $\hat{p}$.

(c) Ist der Impulsoperator $\hat{p}$ ein Hermitescher Operator auf $\mathbb{V}$? (Begründung!)