

## Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I: Teil 1, Quantenmechanik (Modul A8)

### Blatt 4

#### Aufgabe 10: Operatoren.

- Sind die folgenden Operatoren linear?
  - $\hat{A} = \frac{d}{dx}$
  - $\hat{A} = \sqrt{\quad}$
- Finden sie  $g = \hat{A}f$  für die folgenden  $\hat{A}$  und  $f$ :
  - $\hat{A} = \frac{d}{dx}$  ;  $f = e^{bx}$
  - $\hat{A} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$  ;  $f = A \sin(ax)$
  - $\hat{A} = \exp$  ;  $f = \ln(x)$
  - $\hat{A} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$  ;  $f = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$
- Welches sind die zu folgenden klassischen Größen  $A$  gehörenden quantenmechanischen Operatoren  $\hat{A}$  ?
  - $A = p_x^2$
  - $A = (xp_y - yp_x)^2 = l_z^2$
- Berechnen Sie die Kommutatoren  $[\hat{A}, \hat{B}]$  für folgende Operatoren:
  - $\hat{A} = x$  ;  $\hat{B} = \frac{d}{dx}$
  - $\hat{A} = \frac{d}{dx}$  ;  $\hat{B} = x^2$
  - $\hat{A} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} = \hat{T}$  ;  $\hat{B} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$

#### Aufgabe 11: Eigenwertprobleme.

- Für ein sogenanntes Teilchen im Kasten der Länge  $L$  erhält man die Wellenfunktionen

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad . \quad (1)$$

( $n$  sind dabei ganze, positive Zahlen  $n = 1, 2, \dots$ ;  $A$  ist ein Vorfaktor – beides muss für das folgende nicht spezifiziert werden.)

- Zeigen Sie, dass diese *nicht* Eigenfunktionen des Impulsoperators

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad (2)$$

sind.

- Zeigen Sie, dass diese jedoch Eigenfunktionen des Operators  $\hat{p}^2$  sind. Welches sind in letzterem Falle die zugehörigen Eigenwerte?

2. Welche der folgenden Funktionen  $f(x)$  ist Eigenfunktion zum Operator

$$\hat{x} = \frac{d}{dx} \tag{3}$$

(a)  $f(x) = e^{ax}$

(b)  $f(x) = e^{ax^2}$

Was ist, falls Eigenfunktion, der zugehörige Eigenwert?