

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

Blatt 4

Aufgabe 10: Operatoren.

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

Aufgabe 11: Eigenwertprobleme.

1. 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.)

- (a) Zeigen Sie, dass diese *nicht* Eigenfunktionen des Impulsoperators

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

sind.

- (b) 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

$$\hat{x} = \frac{d}{dx} \quad (3)$$

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

Was ist, falls Eigenfunktion, der zugehörige Eigenwert?