

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie für LA Chemie (Modul VM11)

Blatt 4

Aufgabe 11: Operatoren.

- Falls $g = \hat{A}f$, finden Sie g 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 $\hat{A}$?
 - $A = p_x^2$
 - $H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}Dx^2$

Aufgabe 12: Eigenwertprobleme I

- Die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators für ein "freies Teilchen" sind allgemein

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad . \quad (1)$$

Mit der speziellen Wahl $A = 1$ und $B = i$ ($i^2 = -1$) ergibt sich nach dem Satz von Euler

$$\psi_+(x) = e^{ikx} \quad (2)$$

und mit der Wahl $A = 1$ und $B = -i$

$$\psi_-(x) = e^{-ikx} \quad . \quad (3)$$

Man interpretiert die Wellenfunktion (2) als diejenige eines *rechtslaufenden Teilchens*, die Wellenfunktion (3) als diejenige eines *linkslaufenden Teilchens*.

- Zeigen Sie, dass sowohl $\psi_+(x)$ als auch $\psi_-(x)$ Eigenfunktionen des Hamiltonoperators $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ sind, und dass in beiden Fällen die Eigenenergie E durch

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4)$$

gegeben ist.

3. Zeigen Sie, dass beide Funktionen auch Eigenfunktionen des Impulsoperators $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ sind, mit den Eigenwerten $+\hbar k$ (für ψ_+) bzw. $-\hbar k$ (für ψ_-).

Aufgabe 13: *Eigenwertprobleme II.*

1. Für ein sogenanntes Teilchen im Kasten der Länge L erhält man die Wellenfunktionen

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad . \quad (5)$$

(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

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad (6)$$

sind.

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