Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I
WS 2018/19 – Übungsblatt 4

Ausgabe: Freitag 9. November, Besprechung: Freitag 16. November

1. Hermitesche Operatoren (übernommen von Übungsblatt 4)
   a) Sei $\hat{A}$ ein hermitescher Operator sowie $|\Phi\rangle$ und $|\Psi\rangle$ zwei beliebige Wellenfunktionen. Welcher Zusammenhang besteht dann zwischen $\langle\Phi|\hat{A}|\Psi\rangle$ und $\langle\Psi|\hat{A}|\Phi\rangle$?
   b) Zeigen Sie, dass ein hermitescher Operator $\hat{A}$ stets reelle Eigenwerte besitzt.
   c) Zeigen Sie, dass die Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators stets orthogonal sind.
   d) Prüfen Sie, ob der Ableitungsoperator $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ hermitesch ist. Sie können hierbei verwenden, dass
   $$\lim_{x\to\pm\infty} \Phi(x) = \lim_{x\to\pm\infty} \Psi(x) = 0$$
   (Dies ist eine Voraussetzung für die Normierbarkeit der beiden Wellenfunktionen.) Vergleichen Sie mit dem Impulsoperator $\hat{p} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$.

2. Für das sogenannte Unschärfeprodukt zweier Observablen A und B (bzw. die mit den Observablen assoziierten Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$) gilt:
   $$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle\hat{C}\rangle| \tag{1}$$
   Dabei ist $\Delta A = \sqrt{\langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2}$ die Standardabweichung der Observablen A und $\hat{C} = [\hat{A}, \hat{B}]$ der Kommutator der beiden Operatoren. Betrachten Sie nun speziell den Fall $\hat{A} = \hat{x}$ und $\hat{B} = \hat{p}_x$.
   a) Berechnen Sie zunächst den Kommutator $\hat{C} = [\hat{x}, \hat{p}_x]$ unter Zuhilfenahme einer beliebigen Testwellenfunktion $\phi(x)$.
   b) Formulieren Sie auf Grund des Ergebnisses von a) die Unschärferelation für $\hat{x}$ und $\hat{p}_x$.
   c) Können Sie aus dem Ergebnis von a) bzw. b) darauf schließen, ob $\hat{x}$ und $\hat{p}_x$ gemeinsame Eigenfunktionen haben?
   d) Betrachten Sie nun speziell die Wellenfunktion
   $$\psi(x) = N \exp\left(-\Gamma(x - x_0)^2\right)$$
   mit $N \in \mathbb{C}$, $\Gamma \in \mathbb{R}^+$ und $x_0 \in \mathbb{R}$. Berechnen Sie das Unschärfeprodukt $\Delta x \Delta p$ für $\psi(x)$. Wie hängt das Ergebnis mit Ungleichung (1) zusammen?

Fortsetzung auf der nächsten Seite!

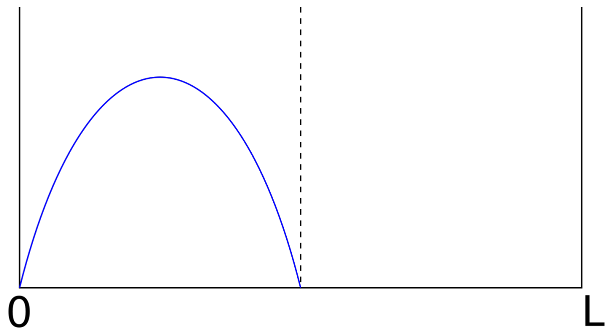

Abbildung 1: Die Wellenfunktion $\psi(x)$ in der linken Hälfte des Kastens.

3. Die Wellenfunktion

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L'}} \sin\left(\frac{\pi x}{L'}\right) & 0 \leq x \leq L' \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

soll in der Basis der Eigenfunktionen des Teilchens im Kasten der Länge L,

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad , \quad n \in \mathbb{N} \tag{2}$$

dargestellt werden. Hierbei gelte $L' = L/2$ (siehe Abbildung 1).

a) Berechnen Sie die ersten drei Koeffizienten c_1, c_2 und c_3. Visualisieren Sie sowohl die Funktion $\psi(x)$ als auch ihre Darstellung mittels $\varphi_n(x)$.

b) Erklären Sie den Zusammenhang zwischen der Funktion $\varphi_n(x)$ im Ortsraum und dem Zustand $|\varphi_n\rangle$ in der Dirac-Notation.

c) Wie lassen sich die Koeffizienten c_n in der Dirac-Notation darstellen?

Fortsetzung auf der nächsten Seite!

Hilfreiche Formeln

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \qquad , \qquad a \in \mathbb{R}^+$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{4a^3}} \qquad , \qquad a \in \mathbb{R}^+$$

$$\int\limits_{0}^{a} \sin^2(jx)\mathrm{d}x = \frac{a}{2} - \frac{\sin(2aj)}{4j}$$

$$\int\limits_{0}^{a} \sin(jx)\sin(kx)\mathrm{d}x = \frac{k\sin(aj)\cos(ak) - j\cos(aj)\sin(ak)}{j^2 - k^2} \qquad , \qquad j^2 \neq k^2$$