Übungen zur Vorlesung
Theoretische Chemie I

1. Gegeben sei der Vektorraum

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

(Im Unterschied zu Blatt 1 sind hier komplexe Zahlen c_1, c_2, c_3 zugelassen.)

Auf dem Vektorraum $\mathbb{V}$ wird durch

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

ein Skalarprodukt definiert.

(a) Zeigen Sie, dass für alle $f, g, h \in \mathbb{V}$ und $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ die folgenden Eigenschaften eines Skalarprodukts erfüllt sind

Linearität:

$$\begin{aligned}\langle f|\alpha g + \beta h\rangle &= \alpha\langle f|g\rangle + \beta\langle f|h\rangle \\ \langle \alpha f + \beta g|h\rangle &= \alpha^*\langle f|h\rangle + \beta^*\langle g|h\rangle\end{aligned}$$

Symmetrie:

$$\langle f|g\rangle = (\langle g|f\rangle)^*$$

(b) Zeigen Sie, dass die Funktionen

$$f_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \qquad f_2(x) = \frac{\sin(x)}{\sqrt{\pi}}, \qquad f_3(x) = \frac{\sin(2x)}{\sqrt{\pi}}$$

ein Orthonormalsystem bilden (d.h. $\langle f_i|f_j\rangle = \delta_{ij}$).

(c) Die Basisdarstellung eines Vektors $|g\rangle \in \mathbb{V}$ bezüglich der Orthonormalbasis $\{|f_1\rangle, |f_2\rangle, |f_3\rangle\}$ ist gegeben durch $|g\rangle = \sum_{j=1}^{3} |f_j\rangle\langle f_j|g\rangle$. Bestimmen Sie die Komponenten $\langle f_j|g\rangle, j = 1, 2, 3,$ der Funktion $g(x) = 1 + i\sin(x)$.

Hausaufgabe:

2. Wir betrachten den Vektorraum $\mathbb{V}$ aus Aufgabe 1 mit dem dort definierten Skalarprodukt $\langle g \mid h \rangle$ und der Basis $\{|f_1\rangle, |f_2\rangle, |f_3\rangle\}$:

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

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

$$f_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \qquad f_2(x) = \frac{\sin(x)}{\sqrt{\pi}}, \qquad f_3(x) = \frac{\sin(2x)}{\sqrt{\pi}}$$

(a) Bestimmen Sie die Wirkung des Operators $\Delta := \frac{d^2}{dx^2}$ auf eine beliebige Funktion $f \in \mathbb{V}$, also Δf mit $f(x) = c_1 + c_2 \sin(x) + c_3 \sin(2x)$.

(b) Liegt Δf in $\mathbb{V}$?

(c) Bestimmen Sie die Matrixdarstellung

$$D = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} \end{pmatrix}$$

des Operators Δ bezüglich der Basis $\{|f_1\rangle, |f_2\rangle, |f_3\rangle\}$. Dabei ist

$$d_{nm} = \langle f_n \mid \Delta \mid f_m \rangle = \int_0^{2\pi} dx\ \ f_n^*(x)\ \frac{d^2}{dx^2} f_m(x).$$