Übungen zur Vorlesung
Theoretische Chemie I

1. Die für ein festes $k \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ auf dem Intervall $[0, 2\pi]$ definierten Funktionen

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

bilden bezüglich des Skalarprodukts

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

eine Orthonormalbasis des Vektorraums

$$\mathbb{V} = \{f : [0, 2\pi] \to \mathbb{C}; f(x) = c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x) + c_3 f_3(x);\; c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{C}\}.$$

Wir betrachten den Impulsoperator $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ auf dem Vektorraum $\mathbb{V}$.

(a) Zeigen Sie, dass der Impulsoperator $\hat{p}$ ein linearer Operator auf $\mathbb{V}$ ist.

Die Matrixdarstellung von $\hat{p}$ bezüglich der Basis $\{|f_1\rangle, |f_2\rangle, |f_3\rangle\}$ lautet:

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\hbar k \\ 0 & -i\hbar k & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{mit} \qquad P_{nm} = \langle f_n \mid \hat{p} \mid f_m \rangle \, .$$

(b) Ist der Impulsoperator $\hat{p}$ ein hermitescher Operator auf $\mathbb{V}$?

(c) Bestimmen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren der Matrix P sowie die Eigenfunktionen von $\hat{p}$.

Hausaufgabe:

2. Wir betrachten den Vektorraum $\mathbb{V}$ aus Aufgabe 1 sowie den Impulsoperator $\hat{p}$.
   Bestätigen Sie die Matrixdarstellung von $\hat{p}$ bezüglich der Basis $\{|f_1\rangle, |f_2\rangle, |f_3\rangle\}$:

   $$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\hbar k \\ 0 & -i\hbar k & 0 \end{pmatrix}$$

   $$\text{mit} \quad P_{nm} = \langle f_n \mid \hat{p} \mid f_m \rangle = \int_0^{2\pi} dx\ f_n^*(x)\ \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\ f_m(x), \quad n, m = 1, 2, 3$$

   Hinweis: Einige Matrixelemente lassen sich durch Symmetrieüberlegungen bestimmen.