Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Axel Groß

Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I

Übungsblatt Nr. 3, 13.11.2014

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
`http://www.uni-ulm.de/theochem/`
Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 25.11.2014, Raum N25/2102

Aufgabe 6: Operatoren und Basiswechsel

Für einen unitären Operator gilt: $UU^\dagger = U^\dagger U = 1$.

a) Zeigen Sie, dass die Eigenwerte eines unitären Operators U komplexe Zahlen mit dem Absolutbetrag 1 sind.

b) Bleibt ein hermitescher Operator A hermitesch nach einer unitären Transformation?

c) Zwei Operatoren A und B vertauschen, d.h. $[A, B] = 0$. Zeigen Sie, dass die beiden Operatoren nach einer unitären Transformation immer noch vertauschen.

d) Konstruieren Sie die Basiswechselmatrix, die die zu S_z diagonale Basis $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ mit der zu S_x diagonalen Basis verbindet. Zeigen Sie, dass das Ergebnis konsistent ist mit der allgemeinen Beziehung

$$U = \sum_r \left| b^{(r)} \right\rangle \left\langle a^{(r)} \right| .$$

Berechnen Sie die Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

in der neuen Basis und vergleichen Sie sie mit den ursprünglichen Matrizen.

Aufgabe 7: Ort und Impuls

a) Zeigen Sie, dass für all Funktionen F und G, die sich als **Potenzreihe** in x bzw. p darstellen lassen, folgende Vertauschungsregeln gelten

$$[x_i, G(\mathbf{p})] = i\hbar\frac{\partial G}{\partial p_i}, \quad [p_i, F(\mathbf{x})] = -i\hbar\frac{\partial F}{\partial x_i} \, .$$

Hinweis: Benutzen Sie die Darstellung von F und G als Potenzreihe und wenden Sie die fundamentalen Vertauschungsregeln an.

b) Berechnen Sie $\left[x^2, p^2\right]$. Vergleichen Sie das Ergebnis mit der klassischen Poissonklammer

$$\left\{x^2, p^2\right\}_{kl} = \frac{\partial x^2}{\partial x}\frac{\partial p^2}{\partial p} - \frac{\partial p^2}{\partial x}\frac{\partial x^2}{\partial p} = ?\,.$$

Aufgabe 8: Translation

Der Translationsoperator für eine endliche räumliche Verschiebung $\mathbf{l}$ ist gegeben durch

$$\mathcal{T}(\mathbf{l}) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}}{\hbar}\right),$$

wo $\mathbf{p}$ der Impulsoperator ist.

a) Berechnen Sie

$$[x_i, \mathcal{T}(\mathbf{l})]\,.$$

Hinweis: Benutzen Sie

$$[x_i, G(\mathbf{p})] = i\hbar\frac{\partial G}{\partial p_i},$$

wo G eine beliebige Funktion ist.

b) Benutzen Sie (a) (oder etwas anderes) um zu zeigen, wie sich der Erwartungswert $\langle\mathbf{x}\rangle$ unter einer Translation verändert.