



Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I

Übungsblatt Nr. 3, 24.11.2016

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 01.12.2016

Aufgabe 5: Operatoren und Basiswechsel

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

- Zeigen Sie, dass die Eigenwerte eines unitären Operators U komplexe Zahlen mit dem Absolutbetrag 1 sind.
- Bleibt ein hermitescher Operator A hermitesch nach einer unitären Transformation?
- Zwei Operatoren A und B vertauschen, d.h. $[A, B] = 0$. Zeigen Sie, dass die beiden Operatoren nach einer unitären Transformation immer noch vertauschen.
- Konstruieren Sie die Basiswechsellmatrix, 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

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

Berechnen Sie die Pauli-Matrizen

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

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

Aufgabe 6: 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 $[x^2, p^2]$. Vergleichen Sie das Ergebnis mit der klassischen Poissonklammer

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

Aufgabe 7: 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.