MC 2.1.8 Theoretische Chemie
Übungen im Sommersemester 2019

Übung 1

Übungstag: 17.04.2019

In der Übung werden wir aus der Vielzahl der Aufgaben exemplarisch einzelne besprechen. Bearbeiten Sie die übrigen Aufgaben bitte im Selbststudium.

1. Es seien:

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}, \qquad \hat{F} = \begin{pmatrix} 0 & 3 & \mathrm{i} \\ 0 & 1 & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad |b\rangle = \hat{F}\,|a\rangle$$

gegeben. Berechnen Sie und geben Sie explizit an:

(a) $|b\rangle$ (c) $\langle a|b\rangle$ (e) $(\langle a|b\rangle)^*$ (g) $\langle a|a\rangle$

(b) $\langle b|$ (d) $\langle b|a\rangle$ (f) $(\langle b|a\rangle)^*$ (h) $\langle b|b\rangle$

2. Wir betrachten die folgenden Räume mit zugehörigem Skalarprodukt:

(a) $\ell_2 = \left\{ (a_n)_{n=1}^{\infty} \,\middle|\, a_n \in \mathbb{C} \wedge \sum\limits_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 < \infty \right\}$; $\quad \langle a|b\rangle := \sum\limits_{n=1}^{\infty} a_n^* b_n$ und

(b) die Menge $\mathcal{L}_2(\mathbb{R})$ der komplexwertigen integrablen Funktionen f, die der Bedingung $\int\limits_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2\,\mathrm{d}x < \infty$ genügen. Das Skalarprodukt ist $\langle f|g\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x)^* g(x)\mathrm{d}x$.

Prüfen Sie exemplarisch, ob die Skalarprodukte wohldefiniert sind, d. h. den Bedingungen der Definition (vgl. VL) genügen.

3. Untersuchen Sie die folgenden Operatoren im Raum $\mathcal{L}_2(\mathbb{R})$ auf Linearität. Welcher Operator ist hermitesch? Verwenden Sie das oben definierte Skalarprodukt.

(a) $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ (b) $\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ (c) $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$ (d) $-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$

4. Beweisen Sie mit der Definition $\langle f|\hat{A}g\rangle = \langle \hat{A}^+ f|g\rangle$ die Beziehung $\left(\hat{A}\hat{B}\right)^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$.

5. Die hermiteschen Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ mögen kommutieren. Zeigen Sie, dass falls

(a) $|f\rangle$ Eigenvektor von $\hat{A}$ ist, dann ist auch $|g\rangle = \hat{B}\,|f\rangle$ Eigenvektor von $\hat{A}$ zum gleichen Eigenwert.

(b) $|f\rangle$ und $|g\rangle$ Eigenvektoren von $\hat{A}$ mit den Eigenwerten λ und $\mu(\neq\lambda)$ sind, dann gilt $\left\langle g \,\middle|\, \hat{A} f \right\rangle = 0$.

6. Es seien $\underline{\underline{A}}$ und $\underline{\underline{B}}$ n-reihige, quadratische Matrizen. Wir definieren:

$$\left[\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{B}}\right] := \underline{\underline{AB}} - \underline{\underline{BA}} \qquad \text{den Kommutator der Matrizen } \underline{\underline{A}} \text{ und } \underline{\underline{B}} \text{ und}$$

$$\underline{\underline{A}}^{+} := \left(\underline{\underline{A}}^{*}\right)^{\mathrm{T}} \qquad \text{die zu } \underline{\underline{A}} \text{ hermitesch adjungierte Matrix.}$$

(a) Zeigen Sie, dass

i. $[\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{B}}] + [\underline{\underline{B}}, \underline{\underline{A}}] = \underline{\underline{0}}$

ii. $[\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{B}} + \underline{\underline{C}}] = [\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{B}}] + [\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{C}}]$

iii. $[\underline{\underline{A}} + \underline{\underline{B}}, \underline{\underline{C}}] = [\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{C}}] + [\underline{\underline{B}}, \underline{\underline{C}}]$

iv. $[\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{BC}}] = [\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{B}}]\underline{\underline{C}} + \underline{\underline{B}}[\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{C}}]$

v. $[\underline{\underline{AB}}, \underline{\underline{C}}] = [\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{C}}]\underline{\underline{B}} + \underline{\underline{A}}[\underline{\underline{B}}, \underline{\underline{C}}]$

vi. $[\underline{\underline{A}}, [\underline{\underline{B}}, \underline{\underline{C}}]] + [\underline{\underline{C}}, [\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{B}}]] + [\underline{\underline{B}}, [\underline{\underline{C}}, \underline{\underline{A}}]] = \underline{\underline{0}}$

vii. $(\underline{\underline{AB}})^{+} = \underline{\underline{B}}^{+}\underline{\underline{A}}^{+}$

viii. $(\underline{\underline{AB}})^{-1} = \underline{\underline{B}}^{-1}\underline{\underline{A}}^{-1}$

(b) Es seien $\underline{\underline{A}}$ und $\underline{\underline{B}}$ die folgenden Matrizen

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 3 & \mathrm{i} & 0 \\ 0 & \mathrm{i} & -\mathrm{i} \end{pmatrix} \qquad \underline{\underline{B}} = \begin{pmatrix} 1 & \mathrm{i} & 0 \\ 0 & 2 & 3 \\ -\mathrm{i} & 0 & -3 \end{pmatrix}$$

Berechnen Sie $[\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{B}}]$ explizit.