LMU
LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT MÜNCHEN

Lehrstuhl für Theoretische Chemie
Prof. Dr. C. Ochsenfeld
Übungsgruppenleiter: Simon Maurer

# Quantenchemie 1

## Übungsblatt Nr. 1

**WS 2011/12**

### Aufgabe 1

Eine Einführung in die hier verwendete Dirac-Schreibweise finden Sie z.B. in A. Szabo, N. S. Ostlund, "Modern Quantum Chemistry", Kap. 1.1.4 ff. (in Bezug auf Vektoren) und Kap. 1.2 (Erweiterung auf Funktionen).

- Schreiben Sie $\langle i|\hat{O}|j\rangle$ in Integralschreibweise mit den beiden Funktionen $\psi_i(x)$ und $\psi_j(x)$ aus.
- Wie lauten die Bedingungen für normierte Funktionen und für zwei zueinander orthogonale Funktionen in der Dirac-Formulierung?
- Formulieren Sie eine Eigenwertgleichung für einen beliebigen Operator $\hat{O}$ in Dirac-Schreibweise.

### Aufgabe 2

Für einen hermiteschen Operator $\hat{O}$ gilt:

$$\langle i|\hat{O}|j\rangle = \langle i|\hat{O}^\dagger|j\rangle = \langle j|\hat{O}|i\rangle^*$$

- Zeigen Sie, dass die Eigenwerte eines hermiteschen Operators reell sind. Setzen Sie dazu zunächst i = j.
- Zeigen Sie, dass die Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators zueinander orthogonal sind. Gehen Sie davon aus, dass keine entarteten Eigenwerte auftreten.

### Aufgabe 3

Zeigen Sie, dass der Operator $\hat{p_x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ hermitesch ist. Verwenden Sie dazu die partielle Integration um zu zeigen, dass

$$\int_a^b \psi_m^*(x)\hat{O}\psi_n(x)\,dx = \left(\int_a^b \psi_n^*(x)\hat{O}\psi_m(x)\,dx\right)^*$$

gilt und nehmen Sie dabei an, dass die Funktionswerte von $\psi_n$ und $\psi_m$ an den Integrationsgrenzen $a$ und $b$ verschwinden.

Diskutieren Sie anhand Ihrer Ergebnisse, ob der Operator $\frac{\partial}{\partial x}$ ebenfalls hermitesch ist.