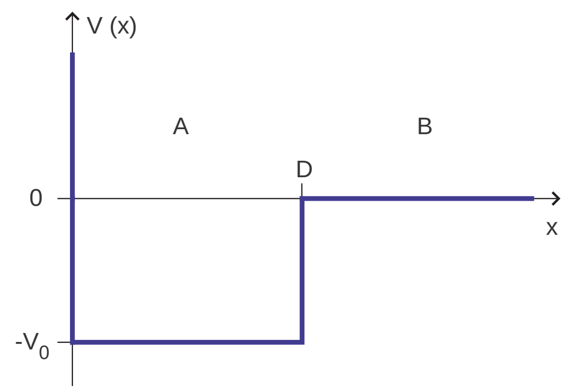
Aufgabe 14: Vereinfachtes Molekülbindungspotential **(mündlich, 4 Punkte)**

Das Bindungspotential zwischen den Atomen eines einfachen zweiatomigen Moleküls kann durch

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{für} \quad x \leq 0 \\ -V_0 & \text{für} \quad 0 < x < D \\ 0 & \text{für} \quad D \leq x \end{cases}$$



approximiert werden.

a) [2 Punkte] Leiten Sie die Lösbarkeitsbedingungen

$$\cot(k\,D) = -\frac{\kappa}{k} \qquad \text{mit} \qquad k^2 = \frac{2\,m}{\hbar^2}\,(E + V_0) \qquad \text{und} \qquad \kappa^2 = -\frac{2\,m}{\hbar^2}\,E$$

für gebundene Zustände mit $-V_0 < E < 0$ her.

b) [2 Punkte] Zeigen Sie, dass außerdem

$$V_0 > \frac{\pi^2\,\hbar^2}{8\,m\,D^2}$$

gelten muss, damit ein gebundener Zustand existiert.

Aufgabe 15: Operatorrelationen **(schriftlich, 6 Punkte)**

Da in der Quantenmechanik ständig mit linearen Operatoren gerechnet wird, sollen im Folgenden einige Relationen bewiesen werden.

a) [2 Punkte] Zeigen Sie, dass die folgenden Relationen erfüllt sind:

$$\left[\hat{A}\hat{B},\, \hat{C}\right] = \left[\hat{A},\, \hat{C}\right]\,\hat{B} + \hat{A}\,\left[\hat{B},\, \hat{C}\right]\,,$$

$$\left[\hat{A},\, \left[\hat{B},\, \hat{C}\right]\right] + \left[\hat{B},\, \left[\hat{C},\, \hat{A}\right]\right] + \left[\hat{C},\, \left[\hat{A},\, \hat{B}\right]\right] = 0\,.$$

b) [4 Punkte] Bekanntlich gilt für den Ortsoperator $\hat{x}$ und den Impulsoperator $\hat{p}$ eines eindimensionalen Teilchens die Vertauschungsrelation $[\hat{x},\, \hat{p}] = i\,\hbar$. Zeigen Sie durch vollständige Induktion, dass

$$[\hat{x}^m\,\hat{p}^n,\, \hat{x}] = -n\,i\,\hbar\,\hat{x}^m\,\hat{p}^{n-1} = -i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{x}^m\,\hat{p}^n}{\partial\,p}\,,$$

$$[\hat{x}^m\,\hat{p}^n,\, \hat{p}] = m\,i\,\hbar\,\hat{x}^{m-1}\,\hat{p}^n = i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{x}^m\,\hat{p}^n}{\partial\,x}\,.$$

Damit erhält man für eine beliebige, in eine Reihe entwickelbare Funktion $F(\hat{x},\, \hat{p})$

$$[F(\hat{x},\, \hat{p}),\, \hat{x}] \;=\; -i\,\hbar\,\frac{\partial F}{\partial p}\;, \qquad [F(\hat{x},\, \hat{p}),\, \hat{p}] \;=\; i\,\hbar\,\frac{\partial F}{\partial x}\;.$$

Berechnen Sie damit $[\hat{H},\, \hat{x}]$ und $[\hat{H},\, \hat{p}]$ mit $\hat{H} \,=\, \frac{\hat{p}^2}{2\,m} + V(\hat{x})$.

Aufgabe 16: Ehrenfest-Theorem (schriftlich, 4 Punkte)

Berechnen Sie unter Verwendung des Ehrenfest-Theorems

$$\frac{d}{d\,t}\,\langle\hat{A}\rangle \;=\; \frac{i}{\hbar}\left\langle[\hat{H},\, \hat{A}]\right\rangle + \left\langle\frac{\partial\,\hat{A}}{\partial\,t}\right\rangle \qquad \text{mit} \qquad \hat{H} \;=\; \frac{\hat{p}^2}{2\,m} + V(\hat{x})$$

die Bewegungsgleichungen für die Erwartungswerte $\langle\hat{x}\rangle$ und $\langle\hat{p}\rangle$ für

a) [1 Punkt] ein freies Teilchen mit $V(\hat{x}) \,=\, 0$,

b) [1 Punkt] den harmonischen Oszillator $V(\hat{x}) \,=\, \frac{1}{2}\,m\,\omega^2\,\hat{x}^2$,

c) [2 Punkte] den anharmonischen Oszillator mit $V(\hat{x}) \,=\, \gamma\,\hat{x}^3$.

Diskutieren Sie, ob die Bewegungsgleichungen für $\langle\hat{x}\rangle$ und $\langle\hat{p}\rangle$ ein geschlossenes System bilden.

Aufgabe 17: Hermitesche und unitäre Operatoren (mündlich, 6 Punkte)

Untersuchen Sie folgende Operatoren auf Hermitizität und Unitarität:

a) [1,5 Punkte] den Ableitungsoperator:

$$\hat{D}_x \;=\; \frac{\partial}{\partial\,x}\;,$$

b) [1,5 Punkte] den Hamiltonoperator:

$$\hat{H} \;=\; \frac{\hat{p}^2}{2\,m} + V(\hat{x})\;,$$

c) [1,5 Punkte] den Translationsoperator $\hat{T}_a$ mit:

$$\hat{T}_a\,\psi(x) \;=\; \psi(x + a)\;,$$

d) [1,5 Punkte] die z-Komponente des Drehimpulsoperators:

$$\hat{L}_z \;=\; \left(\hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}\right)_z\;.$$