

Übungen zur Physikalischen und Theoretischen Chemie I, WS 2001/02, Blatt 10

Abgabe am 14.01.02 in der Übung um 8 hct.

Aufgabe 1 (5 Punkte)

- Wie ist das Skalarprodukt von Vektoren definiert?
- Ist $\int_0^1 dx \cdot$ ein linearer Operator?
- Ist d^2/dx^2 ein hermitescher Operator im Raum der auf dem Rand verschwindenden Funktionen?

Aufgabe 2 (5 Punkte)

Berechnen Sie die folgenden Skalarprodukte:

a) $\langle x|y\rangle$, mit $|x\rangle = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}$, $|y\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

- $\langle f_1|f_2\rangle$ mit $f_1 = e^{i\varphi}$, $f_2 = e^{-i\varphi}$, und
- dito, $f_2 = e^{i\varphi}$, je auf dem Bereich $\varphi \in [0, 2\pi]$

Aufgabe 3 (7 Punkte)

Geben Sie jeweils einen Eigenwert mit ihrer Eigenfunktion/Eigenvektor für die folgenden Operatoren an:

a) $Op1 = \frac{\partial}{\partial x}$

b) $Op2 = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

c) $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

Aufgabe 4 (7 Punkte)

Einheiten:

- Eine Bindung läßt sich mit UV-Licht der Wellenlänge 350 nm spalten. Gib Wellenzahl und Bindungsenergie BE in eV, in kJ/mol, in Hartree an. Welcher Temperatur T entspricht $BE = k \cdot T$?
- Ein stark ionisches Molekül A^+B^- hat einen Kernabstand von 250 pm und ein Dipolmoment von 5 Debye. Wie groß sind die effektiven Atomladungen? (Diese Atomladungen heißen Dipol-Ladungen. Es gibt etwa 3 Dutzend verschiedene Ladungsdefinitionen.)