Universität Ulm
Abteilung Theoretische Chemie

Prof. Dr. Axel Groß

Theoretische Chemie – Quantenmechanik II

Übungsblatt Nr. 1, 19.05.2008

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
`http://www.uni-ulm.de/theochem/`
Die Aufgaben werden besprochen in der Vorlesung am 02.06.2007

Aufgabe 1: Gestörter eindimensionaler Harmonischer Oszillator
Ein Harmonischer Oszillator in einer Dimension wird durch ein Potential

$$\lambda H_1 = bx$$

gestört, wobei b eine Konstante ist.

a) Berechnen Sie die Energueverschiebung in erster nicht-verschwindender Ordnug.

b) Lösen Sie das $H_0 + V$ Problem exakt. Vergleichen Sie das Ergebnis mit der Störungsrechnung aus (a).
Hinweis: Sie können ohne Beweis annehmen, dass

$$\langle u_i | x | u_j \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{j+1}\delta_{i,j+1} + \sqrt{j}\delta_{i,j-1} \right).$$

Zusatz-Aufgabe 2: Gestörter zweidimensionaler Harmonischer Oszillator
Betrachten Sie einen isotropen harmonischen Oszillator in zwei Dimensionen beschrieben durch den Hamiltonoperator

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\left(x^2 + y^2\right).$$

a) Bestimmen Sie die Eigenenergien der drei niedrigsten Zustände. Gibt es Entartungen?

b) Nun sei eine Störung

$$V = \lambda m\omega^2 xy$$

gegeben, wobei λ eine dimensionslose reelle Zahl sei, die viel kleiner als Eins ist. Bestimmen sie die Energieeigenzustände in null-ter Ordnung und die entsprechenden Energien in erster Ordnung für jeden der drei niedrigsten Zustände.

c) Lösen Sie das $H_0 + V$ Problem exakt. Vergleichen Sie das Ergebnis mit der Störungsrechnung aus (b).