



## Theoretische Chemie – Quantenmechanik II

### Übungsblatt Nr. 1, 26.04.2010

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in der Vorlesung am 03.05.2010, O25/306.

---

#### **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.

- Berechnen Sie die Energieverschiebung in erster nicht-verschwindender Ordnung.
- Lösen Sie das  $H_0 + V$  Problem exakt. Vergleichen Sie das Ergebnis mit der Störungsrechnung aus (a).

Hinweis: Sie können ohne Beweis annehmen, dass

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

Zur exakten Lösung bei b) sollten Sie eine quadratische Ergänzung beim Potentialterm im Hamiltonoperator anwenden

#### **Aufgabe 2:** Gestörter zweidimensionaler Harmonischer Oszillator

Betrachten Sie einen isotropen harmonischen Oszillator in zwei Dimensionen beschrieben durch den Hamiltonoperator

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

- Bestimmen Sie die Eigenenergien der drei niedrigsten Zustände. Gibt es Entartungen?
- Nun sei eine Störung

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

gegeben, wobei  $\lambda$  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.

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

Hinweis: Die exakte Lösung ist am einfachsten zu erhalten, wenn Sie die Koordinaten in der  $xy$ -Ebene um  $45^\circ$  drehen.