Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Axel Groß

Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I

Übungsblatt Nr. 7, 03.02.2010

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
`http://www.uni-ulm.de/theochem/`
Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 10.02.2011

Aufgabe 15: 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 Energieverschiebung in erster nicht-verschwindender Ordnung.

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

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

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

Aufgabe 16: 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).
Hinweis: Die exakte Lösung ist am einfachsten zu erhalten, wenn Sie die Koordinaten in der xy-Ebene um 45° drehen.