



Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I

Übungsblatt Nr. 7, 31.01.2019

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 14.02.2019

Aufgabe 19: Variationsansatz für den harmonischen Oszillator

Schätzen Sie die Grundzustandsenergie eines eindimensionalen einfachen harmonischen Oszillators ab.

a) Benutzen Sie

$$|\psi\rangle = A \exp(-\beta|x|) .$$

als Ansatzfunktion und variieren β .

b) (Zusatzaufgabe) Verwenden Sie als Testwellenfunktion

$$|\psi\rangle = A \exp\left(-\frac{\lambda^2}{2}x^2\right) .$$

und variieren λ .

Sie können folgende Beziehungen nutzen:

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x} x^n dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}} .$$

$$\frac{d|x|}{dx} = 2\Theta(x) - 1, \quad \frac{d\Theta(x)}{dx} = \delta(x)$$

$\Theta(x)$: Stufenfunktion, $\delta(x)$: Delta-Funktion

Aufgabe 20: Zeitlich gestörter harmonischer Oszillator

Ein eindimensionaler harmonischer Oszillator sei in seinem Grundzustand für $t < 0$. Für $t \geq 0$ sei er durch eine zeitabhängige, aber gleichförmige Kraft in x -Richtung gestört.

$$F(t) = F_0 e^{-\frac{t}{\tau}} ,$$

d.h., das Störpotential sei gegeben durch

$$V(t) = -x F_0 e^{-\frac{t}{\tau}} , t \geq 0 .$$

- a) Benutzen Sie zeitabhängige Störungstheorie in erster Ordnung, um die Wahrscheinlichkeit zu bestimmen, den Oszillator in seinem ersten angeregten Zustand zu finden für $t > 0$. Zeigen Sie, dass im Limes $t \rightarrow \infty$ für endliches τ der Ausdruck unabhängig von der Zeit wird. Ist das vernünftig oder überraschend?
- b) Kann man auch höher angeregte Zustände finden?