

Praktikum Computational Chemistry

Blatt 0

Vorbereitung für ersten Versuch:

Das erste Thema wird der harmonische Oszillator sein. Wichtige Fragen in diesem Zusammenhang sind (siehe TC1 Skript):

1. Wie sieht der Hamiltonoperator aus?
2. Wie sehen die Energieeigenwerte aus?
3. Wie sehen die Energieeigenfunktionen aus?
4. Welche Rolle spielen die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren?
5. Wie sind diese definiert?