

Übungen zur Vorlesung Fortgeschrittene Theoretische Chemie A

7. Berechnen Sie die Matrixelemente

$$\langle JMK | \hat{H} | JMK' \rangle$$

für den allgemeinen starren Rotator.

8. Betrachten Sie einen annähernd symmetrischen Kreisel mit

$$I_x = I_{\perp} + \Delta I$$
$$I_y = I_{\perp} - \Delta I, \text{ und } \Delta I \text{ klein.}$$

Berechnen Sie die Energieeigenwerte in erster Ordnung Störungstheorie, wobei Sie

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \frac{1}{I_{\perp}} \hat{J}^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{I_z} - \frac{1}{I_{\perp}} \right) \hat{J}_z^2$$

als ungestörten Hamiltonoperator ansetzen und $\hat{H} - \hat{H}_0$ als Störung betrachten.
Hinweis: Verwenden Sie entartete Störungstheorie. Warum ist dieses nötig?