

Übungen zur Vorlesung Fortgeschrittene Theoretische Chemie A

Betrachten sie ein System aus zwei Zuständen, das die Energieeigenwerte E_1 und E_2 , $E_1 < E_2$, besitzt. Zum Zeitpunkt $t = 0$ befindet sich das System im Energieeigenzustand mit Eigenwert E_1 und eine zeitabhängige Wechselwirkung $V_{WW}(t)$ (z.B. durch ein zeitabhängiges elektrisches Feld) wird eingeschaltet. Die Wechselwirkungsmatrixelemente sind für $t \geq 0$ gegeben durch:

$$\begin{aligned}\langle E_1 | V_{WW}(t) | E_1 \rangle &= \langle E_2 | V_{WW}(t) | E_2 \rangle = 0 \\ \langle E_1 | V_{WW}(t) | E_2 \rangle &= \langle E_2 | V_{WW}(t) | E_1 \rangle^* = \hbar\gamma e^{-i\omega t}\end{aligned}$$

11. (a) Bestimmen Sie die Wellenfunktion $|\Psi(t)\rangle$ in erster Ordnung Störungstheorie. Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit $w_{E_2}(t)$, das System im Zustand $|E_2\rangle$ zu finden.
(b) Betrachten Sie für $w_{E_2}(t)$ den Grenzfall $\alpha \rightarrow 0$ und vergleichen Sie mit der exakten Behandlung.
12. Berechnen sie die Übergangsrate von $|E_1\rangle$ nach $|E_2\rangle$ gemäss Fermis Golden Rule. Vergleichen Sie mit dem Ergebnis aus (11b).