

Übungen zur Vorlesung Fortgeschrittene Theoretische Chemie A

Betrachten Sie N Funktionen einer harmonischen Oszillatorbasis $\{|n\rangle\}$ mit der Frequenz ω und dem Gleichgewichtsabstand $x_0 = 0$.

25. Zeigen Sie, daß ein Hermite-DVR die Matrixelemente $\langle n|V(x)|m\rangle$ mit $m, n \in \{0, 1, \dots, N-1\}$ eines linearen Potentials $V(x) = c_0 + c_1x$ fehlerfrei berechnet.

26. Bestimmen Sie den Fehler, den ein Hermite-DVR bei der Berechnung der Matrixelemente $\langle n|x^2|m\rangle$ verursacht.

Hinweis: Zeigen Sie, daß dieser Fehler durch

$$\langle n|x^2|m\rangle - \langle n|x^2|m\rangle_{DVR} = \sum_{i=N}^{\infty} \langle n|x|i\rangle \langle i|x|m\rangle$$

gegeben ist.

27. Betrachten Sie ein Polynom $\sum_{j=0}^M c_j x^j$. Bis zu welcher Ordnung M werden Matrixelemente für gegebene $n, m < N$ fehlerfrei durch das Hermite-DVR beschrieben?

28. Interpretieren Sie die Bedeutung dieser Ergebnisse für die Güte der Beschreibung der Matrixelemente zwischen Wellenfunktionen $|\psi\rangle$, die durch die Basisentwicklung $|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} c_n |n\rangle$ gegeben sind.