

## Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I

1. Der Hamiltonoperator für einen verschobenen harmonischen Oszillator lautet

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0 + V_1\hat{x} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2, \quad (1)$$

wobei  $m$ ,  $V_0$ ,  $V_1$  und  $\omega$  reelle Konstanten sind. Zudem sind  $m, \omega > 0$ .

- (a) Geben Sie die Energieeigenwerte für dieses System an.
- (b) Berechnen Sie die Kommutatoren  $[\hat{p}, H]$  und  $[\hat{x}, H]$ . Bestimmen Sie mit Hilfe dieser Kommutatoren und dem Ehrenfest-Theorem die Bewegungsgleichungen für den Impulserwartungswert und den Ortserwartungswert.
- (c) Der Erzeuger des nicht verschobenen harmonischen Oszillators ist

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}.$$

Nun sei

$$\hat{b}^\dagger = \hat{a}^\dagger + \gamma$$

der Erzeuger für den verschobenen harmonischen Oszillator (1). Bestimmen Sie die Konstante  $\gamma$  so, dass gilt:

$$[\hat{H}, \hat{b}^\dagger] = \hbar\omega\hat{b}^\dagger$$

- (d) Geben sie den Vernichter  $\hat{b}$  an und zeigen Sie, dass

$$[\hat{H}, \hat{b}] = -\hbar\omega\hat{b}$$

und

$$[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1$$

gelten.

### Hausaufgabe:

2.  $I_x$ ,  $I_y$  und  $I_z$  bezeichnen die Hauptträgheitsmomente eines Moleküls. Der Hamiltonoperator für die Rotationsbewegung sei in starrer Rotatornäherung gegeben durch

$$\hat{H} = \frac{1}{2I_x} \hat{L}_x^2 + \frac{1}{2I_y} \hat{L}_y^2 + \frac{1}{2I_z} \hat{L}_z^2. \quad (2)$$

Schreiben sie für folgende Fälle den Hamiltonoperator (2) um, sodass er nur noch von dem Gesamtdrehimpuls  $\hat{L}^2$  und dem Drehimpuls um die z-Achse  $\hat{L}_z$  abhängt.

- (a) Sphärischer Kreisel: Betrachten Sie ein Molekül mit  $I_x = I_y = I_z$ . Ein Beispiel ist Methan.
- (b) Symmetrischer Kreisel: Betrachten Sie nun ein Molekül mit  $I_x = I_y \neq I_z$ . Ein Beispiel ist Benzol.