

---

## 4. Übung zur Quantenmechanik I

---

Wintersemester 2011/2012

**TUTORIUM: Freitag, 4.11.2011.**

### 7. Rechnungen mit Leiteroperatoren

3+2=5 Punkte

Wie in der Vorlesung schon diskutiert wurde, kann man den Hamilton-Operator des harmonischen Oszillators  $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$  mit Hilfe der sogenannten "Leiteroperatoren" so umschreiben:

$$H = \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right),$$

wobei  $a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{X}{x_0} + x_0 \frac{d}{dX} \right)$  und  $a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{X}{x_0} - x_0 \frac{d}{dX} \right)$ , mit  $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$  und  $[a, a^\dagger] = 1$ .

- Drücken Sie die Operatoren  $X$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  und  $X^4$  durch die Leiteroperatoren aus.
- Berechnen Sie nun die Erwartungswerte von  $X$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  und  $X^4$  für alle Eigenzustände des harmonischen Oszillators, und geben Sie eine Interpretation der Ergebnisse.

### 8. Molekülschwingungen

3+2=5 Punkte

Betrachten Sie ein Molekül mit zwei Atomen, jedes mit Masse  $M$ . Das Potential  $V$  als Funktion des Abstands  $R$  zwischen den zwei Atomen sei das sogenannte **Lennard-Jones** Potential:

$$V(R) = 2V_0 \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{R_0}{R} \right)^{12} - \left( \frac{R_0}{R} \right)^6 \right],$$

wobei die Dimensionen der zwei Konstanten  $V_0$  bzw.  $R_0$  Energie und Länge sind. Die physikalische Bedeutung dieser Formel für  $V(R)$  ist folgende (siehe Abbildung 1): Für  $R \ll R_0$  beobachtet man eine stark repulsive Kraft zwischen den Atomen, die durch den Überlapp der elektronischen Wolken der zwei Atome bedingt ist. Für große  $R$  sollte die Kraft attraktiv werden, um die Kohäsion des Moleküls zu garantieren (*van der Waals Wechselwirkung*).

- Betrachten Sie für die Molekülschwingungen das Relativ-Koordinatensystem(\*) mit dem Lennard-Jones Potential und geben Sie eine quantitative Abschätzung für die Energien des Grundzustands und der ersten zwei angeregten Zustände der Schwingungen dieses Moleküls unter der Annahme, dass sich das Molekül (bzw. der Abstand zwischen den Atomen) in diesen Zuständen nicht weit von der klassischen Gleichgewichtsposition entfernt befindet.

(\*) Welche Masse geht in die Kinetische Energie ein?

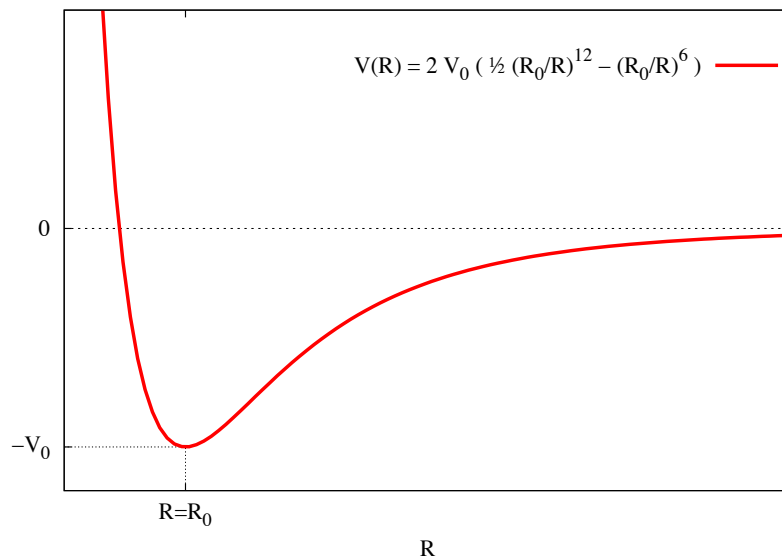


Abbildung 1: Schematischer Plot des Lennard-Jones Potentials als Funktion des Abstands  $R$  der zwei Atome des Moleküls

- b) Bestimmen Sie, unter welchen Bedingungen die Abschätzungen von **8a)** eine gute Näherung für die echten Eigenenergien des Grundzustands und des ersten angeregten Zustands dieses Moleküls sind.