

Übungsserie 7

Wintersemester 18/19  
Besprechung am 28.01.2018

Andrey Surzhykov  
Robert Müller

---

**Aufgabe 1** (*Configuration Interaction in einer Dimension*)

Wir betrachten das Beispiel eines anharmonischen Oszillators mit dem Hamiltonian

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} + g\hat{x}^4 = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} + g\hat{x}^4.$$

Berechnen Sie zunächst die Energie des Grundzustands in erster Ordnung Störungstheorie, wobei wir als ungestörte Basis die Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators mit Hamiltonian

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}.$$

Nutzen Sie nun dieselbe Basis um die Energie des Grundzustands mit Hilfe der Configuration Interaction Methode zu berechnen (ein einfaches Mathematica- oder Python-Skript erledigt dies für Sie) und vergleichen Sie die Ergebnisse. Untersuchen Sie außerdem die Konvergenz des CI-Ansatzes abhängig von der Teilchenmasse  $m$ , Frequenz  $\omega$  und der Kopplungskonstanten  $g$ .

*Hinweis: Die Rekursionsformel für Hermitpolynome  $xH_n(x) = \frac{1}{2}H_{n+1}(x) + nH_{n-1}(x)$  hilft Ihnen die Störmatrix und die Hamilton'sche Matrix des CI-Problems analytisch zu berechnen.*

**Aufgabe 2** (*Kohlenstoff in verschiedenen Kopplungen*)

- a) Zu welchen Konfigurationen koppelt der angeregte Zustand von Kohlenstoff  $1s^2 2s^2 2p_{3/2}^2$  in  $jj$ -Kopplung?
- b) Zu welchen Konfigurationen koppelt der angeregte Zustand von Kohlenstoff  $1s^2 2s^2 2p^2$  in  $ls$ -Kopplung?