

Kvantová chemie

Cvičení 6

Přibližné metody II
Poruchová metoda

Problém 1

Nalezněte řešení ilustračního příkladu z přednášky pro $y_0 = 0$ s přesností až do 6. řádu poruchové teorie a určete (všechny) přibližné výsledky až do tohoto řádu. Dosazením do levé strany rovnice určete, jak se tato pro jednotlivá přiblížení liší od strany pravé (0).

Problém 2 (Hůla)

Nalezněte řešení ilustračního příkladu z přednášky pro $y_0 = 1$ s přesností až do 3. řádu poruchové teorie.

Problém 3 (Hlobílková)

Na základě znalosti řešení stacionární SR pro lineární harmonický oscilátor $\left(\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)$ určete v prvním řádu poruchové teorie energii základního stavu lineárního (anharmonického) oscilátoru $\left(\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \varepsilon x^4, \varepsilon > 0\right)$. [Návod: Tvar normované vlnové funkce LHO v základním stavu naleznete [zde](#).]