Universität Ulm
Abteilung Theoretische Chemie

Prof. Dr. Axel Groß

Theoretische Chemie – Quantenmechanik II

Übungsblatt Nr. 5, 30.06.2008

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
`http://www.uni-ulm.de/theochem/`

Die Aufgaben werden besprochen in der Vorlesung am 07.07.2008

Aufgabe 7: Überlapp zweier $1s$ Gauß-Funktionen
Zwei Wasserstoffatome an den Positionen $\mathbf{X}_1$ und $\mathbf{X}_2$ seien im $1s$ Grundzustand, und ihre atomaren Wellenfunktionen seien durch Gauß-Funktionen beschrieben, d.h.

$$\langle \mathbf{x}|\, 1s_{1,2}\rangle = \psi_{1,2}(\mathbf{x}) \;=\; C \exp\left(-\alpha(\mathbf{x}-\mathbf{X}_{1,2})^2\right)$$

a) Bestimmen Sie den Normierungsfaktor C der Gauß-Funktionen.

b) Berechnen Sie den Überlapp $S(R)$ beider Wellenfunktionen, wobei $R = |\mathbf{X}_1 - \mathbf{X}_2|$ der Abstand der beiden Wasserstoffatome ist.

Zusatzaufgabe 8: Überlapp zweier $1s$ Exponential-Funktionen
Führen Sie die gleichen Rechnungen wie in Aufgabe 7 für Exponentialfunktionen, sogenannten Slater-Funktionen

$$\langle \mathbf{x}|\, 1s_{1,2}\rangle = \psi_{1,2}(\mathbf{x}) \;=\; C \exp\left(-\alpha|\mathbf{x}-\mathbf{X}_{1,2}|\right)$$

durch.

Hinweis: Bei dieser Aufgabe empfiehlt sich die Verwendung von prolat-elliptischen Koordinaten zur Berechnung des Überlapps.