



Theoretische Chemie – Quantenmechanik II

Übungsblatt Nr. 2, 10.05.2010

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in der Vorlesung am 17.05.2010, O25/306.

Aufgabe 3: Wasserstoffähnliches Atom

Gegeben sei ein wasserstoffähnliches Atom mit der Kernladungszahl Z , in dem sich ein $1s$ -Elektron befindet.

Berechnen Sie die Änderung der Energie bei Erhöhung der Kernladungszahl um 1 mit Hilfe der Störungstheorie 1. Ordnung, und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem exakten Resultat.

Hinweis: Die Wellenfunktion für das $1s$ -Elektron lautet (vgl. Gl. (4.115))

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \gamma^{-3/2} e^{-\gamma r}, \quad \gamma = \frac{me^2}{\hbar^2} Z .$$

Aufgabe 4: Eindimensionaler Harmonischer Oszillator in Variationsrechnung

Wir suchen den Grundzustand im eindimensionalen Potential

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 .$$

Verwenden Sie als Testwellenfunktion

$$|\psi\rangle = A \exp\left(-\frac{\lambda^2}{2} x^2\right) .$$