



Theoretische Chemie – Quantenmechanik II

Übungsblatt Nr. 4, 16.06.2014

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Aufgaben werden besprochen in der Übung am 26.06.2014

Aufgabe 5: Coulomb-Integral zweier $1s$ Gauß-Funktionen
 s Gauß-Funktionen an den Positionen \mathbf{X}_1 und \mathbf{X}_2 seien gegeben durch

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

wobei C der Normierungsfaktor ist.

In Rahmen von quantenchemischen Rechnungen, bei denen Gauß-Funktionen als Basis verwendet werden, kommen häufig Coulomb-Integrale der Form

$$I = \int d^3r \psi_1(\mathbf{r}) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{X}_3|} \psi_2(\mathbf{r})$$

vor, ein sogenanntes Drei-Zentrenintegral.

Berechnen Sie das Integral I für beliebige \mathbf{X}_i , $i = 1, 2, 3$.

Hinweis: Drücken Sie das Ergebnis mit Hilfe der Fehlerfunktion $\text{erf}(x)$ aus.