



## Theoretische Chemie – Quantenmechanik II

### Übungsblatt Nr. 1, 04.05.2017

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Aufgaben werden besprochen im Seminar am 11.05.2017

---

#### Aufgabe 1: Spin-Projektionsoperatoren

Betrachten Sie zwei Teilchen mit Spin  $\mathbf{S}_1$  and  $\mathbf{S}_2$  ( $s_1 = s_2 = \frac{\hbar}{2}$ ).

- Was ist der Effekt der Operatoren  $P_0 = \frac{1}{4} - \frac{1}{\hbar^2} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$  bzw.  $P_1 = \frac{3}{4} + \frac{1}{\hbar^2} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$  auf einen beliebigen Zustand  $\chi(s_1, s_2)$ ?
- Zeigen Sie, dass  $P_{12}\chi(s_1, s_2) = \chi(s_2, s_1)$ , wobei  $P_{12}$  definiert ist durch  $P_{12} = \frac{1}{2} + \frac{2}{\hbar^2} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ .

Hinweis: Stellen Sie  $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$  mit Hilfe von  $S^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2$  dar und benutzen Sie die Singulett-Triplett-Darstellung der Spinwellenfunktion. Beachten Sie dabei, dass  $\mathbf{S}_i^2 = 3/4$  (Warum?).

#### Aufgabe 2: Zweielektronenatom in Störungstheorie

In erster Ordnung Störungstheorie ist der Beitrag der Elektron-Elektron-Wechselwirkung beim Zweielektronenatom gegeben durch (vgl. Gl. 6.29)

$$\Delta_{1s^2}^{(1)} = \left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle_{1s^2} = \int \int \frac{Z^6}{\pi^2 a_0^6} e^{-2Z(r_1+r_2)/a_0} \frac{e^2}{r_{12}} d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (1)$$

Benutzen Sie im Gegensatz zur Vorlesung die Fourierdarstellung von  $1/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = 1/r_{12}$

$$\frac{1}{r_{12}} = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) \frac{4\pi}{k^2}, \quad (2)$$

um den Störungsterm auszurechnen. Durch diese Ersetzung werden die Integrale über  $d^3 r_1$  und  $d^3 r_2$  entkoppelt.

**Hinweis:** Benutzen Sie ohne Beweis die folgenden Integrale:

$$\int d^3 r \exp(-\alpha r) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = \frac{8\pi\alpha}{(k^2 + \alpha^2)^2}, \quad (3)$$

$$\int_0^\infty \frac{dx}{(1+x^2)^4} = \frac{5\pi}{32}. \quad (4)$$