Prof. Dr. Axel Groß
Institut für Theoretische Chemie

Theoretische Chemie – Quantenmechanik II
Übungsblatt Nr. 2, 21.05.2019

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
`http://www.uni-ulm.de/theochem/`
Die Aufgaben werden besprochen im Seminar am 04.06.2019

Aufgabe 3: Sauerstofforbitale des Wassermoleküls
In der Abbildung ist das Wassermolekül und seine Symmetrieoperationen gezeigt, die zur Symmetriegruppe C_{2v} gehren. Die zugehörige Multiplikations- und Charakterentafel ist unten in der Tabelle aufgeführt. Als Basis für eine Darstellung D^{O} der Symmetriegruppe seien die $2s$ und $2p$ Orbitale $|2s^{\mathrm{O}}\rangle$, $|2p_x^{\mathrm{O}}\rangle$, $|2p_y^{\mathrm{O}}\rangle$ und $|2p_z^{\mathrm{O}}\rangle$ des Sauerstoffatoms gewählt.

a) Schreiben Sie die Darstellung D^{O} explizit hin und bestimmen die darin enthaltenen irreduziblen Darstellungen.

b) Bestimmen Sie die Basen der irreduziblen Darstellungen mit Hilfe der Projektionsoperatoren.

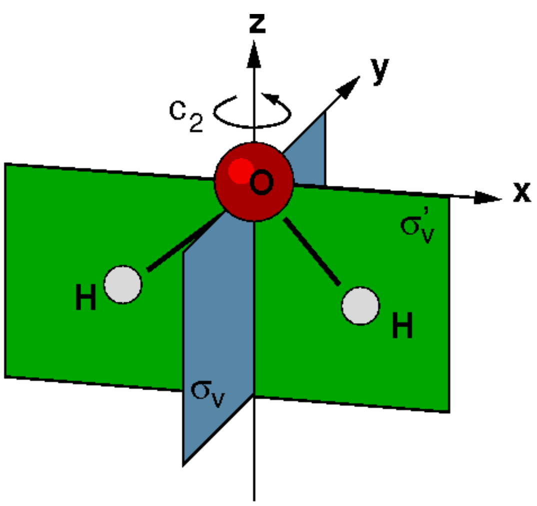

Abbildung 1: Das H_2O Molekül und seine Symmetrieoperationen.

Tabelle 1: Multiplikations- und Charaktertafel der Symmetriegruppe C_{2v}.

C_{2v}	E	c_2	σ_v	σ_v'		E	c_2	σ_v	σ_v'
E	E	c_2	σ_v	σ_v'	A_1	1	1	1	1
c_2	c_2	E	σ_v'	σ_v	A_2	1	1	-1	-1
σ_v	σ_v	σ_v'	E	c_2	B_1	1	-1	1	-1
σ_v'	σ_v'	σ_v	c_2	E	B_2	1	-1	-1	1

Bitte wenden!

Aufgabe 4: Coulomb-Integral zweier 1s Gauß-Funktionen
s Gauß-Funktionen an den Positionen $\mathbf{X}_1$ und $\mathbf{X}_2$ seien gegeben durch

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

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 $\mathrm{erf}(x)$ aus.