

Theoretische Chemie – Quantenmechanik II

Übungsblatt Nr. 1, 21.04.2020

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Lösung der Aufgaben wird auf der Moodle-Plattform besprochen

Aufgabe 1: Sauerstofforbitale des Wassermoleküls

In der Abbildung ist das Wassermolekül und seine Symmetrieeoperationen gezeigt, die zur Symmetriegruppe C_{2v} gehören. 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 $|2s^O\rangle$, $|2p_x^O\rangle$, $|2p_y^O\rangle$ und $|2p_z^O\rangle$ des Sauerstoffatoms gewählt.

- Schreiben Sie die Darstellung D^O explizit hin und bestimmen die darin enthaltenen irreduziblen Darstellungen.
- Bestimmen Sie die Basen der irreduziblen Darstellungen mit Hilfe der Projektionsoperatoren.

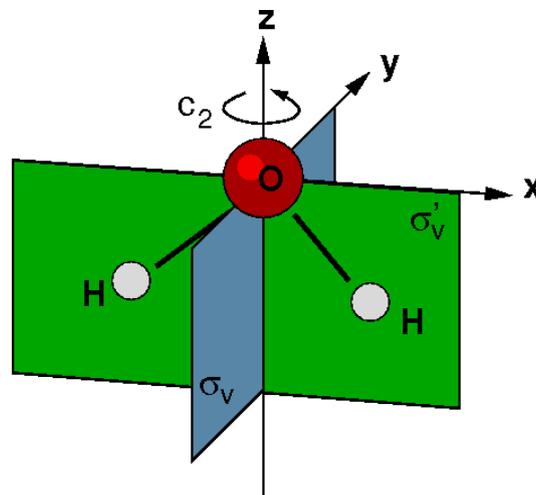


Abbildung 1: Das H_2O Molekül und seine Symmetrieeoperationen.

Tabelle 1: Multiplikations- und Charakterentafel 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

Aufgabe 2: 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.