



## Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I Übungsblatt Nr. 5, 23.12.2009

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 13.01.2010

---

### Aufgabe 9: Unschärfe von Gauß-Wellenpaketen

Ein eindimensionales Gauß-Wellenpaket wird beschrieben durch

$$\langle x' | \alpha \rangle = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{d}} e^{ikx - \frac{x^2}{2d^2}} \quad (1)$$

Für dieses Gauß-Wellenpaket, zentriert um  $x = 0$ , gilt  $\langle x \rangle = 0$  und  $\langle x^2 \rangle = d^2/2$ .

Zeigen Sie, dass

$$\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2, \quad \langle p \rangle = \hbar k. \quad (2)$$

**Hinweis:** Benutzen Sie die Darstellung (2.157) (siehe Vorlesung) des Wellenpakets im Impulsraum und verwenden Sie

$$\int_0^\infty e^{-a^2 x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2a}, \quad \int_0^\infty x^2 e^{-a^2 x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4a^3},$$

nachdem Sie eine quadratische Ergänzung im Exponenten durchgeführt haben.

### Aufgabe 10: Überlapp zweier 1s Gauß-Funktionen

Zwei Wasserstoffatome an den Positionen  $\mathbf{X}_1$  und  $\mathbf{X}_2$  seien im 1s Grundzustand, und ihre atomaren Wellenfunktionen seien durch Gauß-Funktionen beschrieben, d.h.

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

- Bestimmen Sie den Normierungsfaktor  $C$  der Gauß-Funktionen. Beachten Sie, dass diese Gauß-Funktionen im  $\mathbb{R}^3$  definiert sind.
- Berechnen Sie den Überlapp  $S(R) = \langle 1s_1 | 1s_2 \rangle$  beider Wellenfunktionen, wobei  $R = |\mathbf{X}_1 - \mathbf{X}_2|$  der Abstand der beiden Wasserstoffatome ist.

**Hinweis:** Benutzen Sie den Hinweis aus Aufgabe 9.