Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Axel Groß

# Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I

**Übungsblatt Nr. 5, 16.12.2010**

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
`http://www.uni-ulm.de/theochem/`
Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 13.01.2011

---

**Aufgabe 9:** Unschärfe von Gauß-Wellenpaketen
Ein eindimensionales Gauß-Wellenpaket wird beschrieben durch

$$\left\langle x' | \alpha \right\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{d}} e^{ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}} \tag{1}$$

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

Zeigen Sie, dass

$$\left\langle p^2 \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2 \ , \qquad \langle p \rangle = \hbar k \ . \tag{2}$$

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

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

nachdem Sie eine geeignete Substitution 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.

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

a) Bestimmen Sie den Normierungsfaktor $C$ der Gauß-Funktionen. Beachten Sie, dass diese Gauß-Funktionen im $\mathbb{R}^3$ definiert sind.
b) 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 und führen Sie eine geeignete quadratische Ergänzung im Exponenten durch.

bitte wenden

**Zusatzaufgabe 11:** Harmonischer Oszillator
Ein kohärenter Zustand eines eindimensionalen harmonischen Oszillators ist definiert als Eigenzustand des (nicht-hermiteschen) Vernichtungsoperators $a$:

$$a\,|\lambda\rangle = \lambda\,|\lambda\rangle\,,$$

wobei $\lambda$ eine i. allg. komplexe Zahl ist.

a) Zeigen Sie, dass
$$|\lambda\rangle = e^{-\frac{|\lambda|^2}{2}} e^{\lambda a^\dagger}\,|0\rangle$$
ein normierter kohärenter Zustand ist, d.h. dass $a\,|\lambda\rangle = \lambda\,|\lambda\rangle$ und dass $\langle\lambda|\,\lambda\rangle = 1$.

**Hinweis:** Schreiben Sie $e^{\lambda a^\dagger}$ in der Reihendarstellung und zeigen Sie, dass dieser Zustand ein Eigenzustand des Vernichtungsoperators ist. Nutzen Sie dabei aus, dass
$$a{a^\dagger}^n \;= {a^\dagger}^n a\; + n{a^\dagger}^{n-1}\;.$$

b) Zeigen Sie, dass ein kohärenter Zustand auch erzeugt werden kann durch das Anwenden des Translationsoperators $e^{-\frac{ipl}{\hbar}}$ auf den Grundzustand des harmonischen Operators für eine endliche Verschiebung $l$, wobei $p$ der Impulsoperator ist.
**Hinweis:** Stellen sie $p$ durch $a$ und $a^\dagger$ dar und verwenden Sie das Baker-Hausdorff-Lemma in der Form
$$e^{A+B} = e^a e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]},\text{ falls } [A,[A,B]] = [B,[A,B]] = 0\;.$$