



Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I Übungsblatt Nr. 4, 06.12.2016

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 13.12.2016

Aufgabe 8: 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 (2.159) (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 9: 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 geeignete Integrale aus dem Hinweis zu Aufgabe 8.