



## Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I

### Übungsblatt Nr. 3, 22.11.2018

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 06.12.2018

---

#### Aufgabe 6: Ort und Impuls

- a) Zeigen Sie, dass für all Funktionen  $F$  und  $G$ , die sich als **Potenzreihe** in  $x$  bzw.  $p$  darstellen lassen, folgende Vertauschungsregeln gelten

$$[x_i, G(\mathbf{p})] = i\hbar \frac{\partial G}{\partial p_i}, \quad [p_i, F(\mathbf{x})] = -i\hbar \frac{\partial F}{\partial x_i}.$$

Hinweis: Benutzen Sie die Darstellung von  $F$  und  $G$  als Potenzreihe und wenden Sie die fundamentalen Vertauschungsregeln an.

- b) Berechnen Sie  $[x^2, p^2]$ . Vergleichen Sie das Ergebnis mit der klassischen Poissonklammer

$$\{x^2, p^2\}_{kl} = \frac{\partial x^2}{\partial x} \frac{\partial p^2}{\partial p} - \frac{\partial p^2}{\partial x} \frac{\partial x^2}{\partial p} = ?.$$

#### Aufgabe 7: Translation

Der Translationsoperator für eine endliche räumliche Verschiebung  $\mathbf{l}$  ist gegeben durch

$$\mathcal{T}(\mathbf{l}) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{l}}{\hbar}\right),$$

wo  $\mathbf{p}$  der Impulsoperator ist.

- a) Berechnen Sie

$$[x_i, \mathcal{T}(\mathbf{l})].$$

Hinweis: Benutzen Sie

$$[x_i, G(\mathbf{p})] = i\hbar \frac{\partial G}{\partial p_i},$$

wo  $G$  eine beliebige Funktion ist.

- b) Benutzen Sie (a) (oder etwas anderes) um zu zeigen, wie sich der Erwartungswert  $\langle \mathbf{x} \rangle$  unter einer Translation verändert.

**Aufgabe 8:** 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.

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

wobei  $\alpha$  eine feste vorgegebene Konstante sei.

- 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:**

Verwenden Sie

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

und führen Sie eine quadratische Ergänzung im Exponenten durch. Beachten Sie, dass Sie je nach Wahl des Koordinatensystems (kartesische oder Kugelkoordinaten) nur eine der beiden Gleichungen oben brauchen.