Prof. Dr. Axel Groß
Institut für Theoretische Chemie

Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I

Übungsblatt Nr. 3, 19.11.2019

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
`http://www.uni-ulm.de/theochem/`
Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 03.12.2019

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 $\left[x^2, p^2\right]$. Vergleichen Sie das Ergebnis mit der klassischen Poissonklammer

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

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.

bitte wenden

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.

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

wobei α eine feste vorgegebene Konstante sei.

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:

Verwenden Sie

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

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.