

Quantenchemie (ThC1): Aufgabenblatt 2

1. Zeigen Sie, daß Ψ in Gl. 51 normiert ist.
2. Leiten Sie die 2te Zeile in Gl. 56 ab, indem Sie Gl. 55 nach c_b differenzieren (in der Vorlesung haben wir nach c_a differenziert!).
3. Berechnen Sie, analog zu Gl. 60, die in den Matrixelementen H_{bb} auftretenden Integral und diskutieren Sie die auftretenden Terme T, J und K.
4. Hartree Methode: Zeigen Sie für die Wellenfunktion

$$\Psi_1(r_1, r_2) = \phi_1(r_1)\phi_1(r_2),$$

daß Gl. 73 bzw. Gl. 74 gilt. Für diese Wellenfunktion kann man die Spinindikatoren α und β weglassen. Beachten Sie, daß ϕ_1 und ϕ_2 normiert sind.

5. Erklären Sie so knapp wie möglich, warum in der Hartree-Theorie die Elektron-Elektron Abstoßung überschätzt wird. Ist dieses Problem in der HF Theorie vollständig gelöst?