

Übungen zur Vorlesung Fortgeschrittene Theoretische Chemie A

1. Betrachten Sie einen Cluster aus einem Cl_2 -Molekül und einem Ne-Atom, das durch van der Waals-Kräfte gebunden ist. Führen Sie ein Koordinatensystem ein, in dem sich die Schwerpunktsbewegung abseparieren lässt und zudem der Abstandsvektor $\mathbf{x}_{\text{Cl}(1)} - \mathbf{x}_{\text{Cl}(2)}$ als Koordinate auftritt. Geben Sie den kinetischen Energieoperator für dieses Koordinatensystem an.
2. Zeigen Sie die Identität

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r$$