

2. Klausur zur Vorlesung Theoretische Chemie I

Lösen Sie bitte jede Aufgabe auf einem separaten Blatt (erleichtert die *schnelle* Korrektur). Verwenden Sie nur das zur Verfügung gestellte Papier. Schreiben Sie auf jedes Ihrer Lösungsblätter oben rechts Name, Vorname und Matrikelnummer. Lösen Sie die Aufgaben nachvollziehbar auf Grundlage der in der Vorlesung und in den Übungen besprochenen Sätze und Definitionen. Hilfsmittel sind nicht erlaubt.

1. (4 Punkte)

Die Wellenfunktion eines freien Teilchens kann die Form

$$\Psi(x) = c \cdot e^{ikx}, \quad c, k \in \mathbb{R}$$

annehmen.

- (a) Bestimmen Sie die möglichen Werte von k für ein Teilchen der Masse m mit der Energie E . Zeigen Sie dabei, dass die Wellenfunktion eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung ist.
- (b) Welche Messwerte erhalten Sie für gegebenes k , wenn Sie eine Impulsmessung durchführen?

2. (3 Punkte)

Betrachten Sie ein Teilchen der Masse m in einem eindimensionalen Kasten der Länge L .

- (a) Geben Sie die Grundzustands-Wellenfunktion an, wobei eine Normierung der Funktion nicht erforderlich ist.
- (b) Geben Sie die Nullpunktsenergie des Systems an.
- (c) Geben Sie alle Energieeigenwerte des Systems an.

3. (2 Punkte)

Ein zweiatomiges Molekül wird in der Näherung des starren Rotators durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu r^2} \hat{L}^2$$

beschrieben, wobei μ die reduzierte Masse, r die Bindungslänge und \hat{L} der Drehimpulsoperator ist. Welche Energieeigenwerte treten auf?

4. (5 Punkte)

Ein Wasserstoffatom befinde sich im $3d_{xz}$ -Zustand. Welche Messwerte erhält man mit welchen Wahrscheinlichkeiten, wenn man

- (a) L_z (den Drehimpuls um die z -Achse)
- (b) L_x (den Drehimpuls um die x -Achse)
- (c) L^2 (das Betragquadrat des Gesamtdrehimpulses)

misst?

5. (4 Punkte)

Gegeben sei der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p} + eA)^2, \quad m, e, A \in \mathbb{R}.$$

Berechnen sie die Kommutatoren $[\hat{H}, \hat{x}]$ und $[\hat{H}, \hat{p}]$.

6. (2 Punkte)

Das He^+ -Ion hat für die Hauptquantenzahl $n = 2$ den Energieeigenwert

$$E = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0}.$$

Welchen Energieeigenwert hat

- (a) das He^+ -Ion im 1s-Zustand,
- (b) das Li^{2+} -Ion im 3d-Zustand?

7. (5 Punkte)

Betrachten Sie den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \quad m, \omega > 0.$$

Im Rahmen des Variationsprinzips wird die bestmögliche Lösung für den Ansatz

$$\Psi(x) = c \cdot e^{-\alpha x^2}$$

mit dem Variationsparameter α und der Normierungskonstanten c gesucht.

- (a) Welchen Energieerwartungswert erhalten Sie für die optimale Lösung im Sinne des Variationsprinzips?
- (b) Welche wichtige Aussage können sie bezüglich der erhaltenen Wellenfunktion treffen?
- (c) Betrachten Sie nun den alternativen Variationsansatz

$$\Psi(x) = c \cdot x \cdot e^{-\alpha x^2}.$$

Welchen Energieerwartungswert erhalten Sie für die optimale Lösung im Sinne des Variationsprinzips für diesen Ansatz?

Viel Erfolg!