

Klausur zur Vorlesung Theoretische Chemie I

Lösen Sie bitte jede Aufgabe auf einem separaten Blatt. 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. (2 Punkte)

Positronium ist ein exotisches Atom, welches aus einem Elektron und einem Positron anstelle eines normalen Atomkerns besteht. Das Positron ist ein Elementarteilchen mit Ladung $+e$, Spin $\frac{1}{2}$ und der Masse m_e gleich der Elektronenmasse (d.h. es ist ein sogenanntes Antielektron). Seine Grundzustandsenergie ist

$$E_1 = -\frac{me^4}{64\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}$$

Welche Energie besitzt der erste angeregte Zustand des Positroniums und wievielfach ist er entartet?

2. (4 Punkte)

Betrachten Sie ein System, das durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{1}{2I}\hat{L}^2 + V_0 \quad , \quad \hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \sin\vartheta \frac{d}{d\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \right)$$

beschrieben wird, wobei I und V_0 systemspezifische Konstanten sind.

- (a) Geben Sie die Energieeigenwerte des Systems für $V_0 = 0$ an.
- (b) Wievielfach sind diese Energieeigenzustände entartet?
- (c) Geben Sie die Grundzustandsenergie für den allgemeinen Fall $V_0 \neq 0$ an.

3. (10 Punkte)

Wir betrachten einen harmonischen Oszillator mit der Masse m und der Frequenz ω . Die Eigenzustände sind $|\Psi_n\rangle$. Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren \hat{a}^\dagger und \hat{a} sind wie folgt definiert:

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p} \\ \hat{a} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p}\end{aligned}$$

Die Wirkungen von \hat{a}^\dagger und \hat{a} auf einen Zustand $|\Psi_n\rangle$ sind:

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger |\Psi_n\rangle &= \sqrt{n+1} |\Psi_{n+1}\rangle \\ \hat{a} |\Psi_n\rangle &= \sqrt{n} |\Psi_{n-1}\rangle\end{aligned}$$

Betrachten Sie den Zustand $|\varphi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_0\rangle + |\Psi_1\rangle)$.

- (a) Berechnen Sie den Energieerwartungswert im Zustand $|\varphi_0\rangle$.
- (b) Berechnen Sie den Ortserwartungswert im Zustand $|\varphi_0\rangle$.

Betrachten Sie nun die zeitliche Entwicklung des Systems für den Fall, daß es sich zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand $|\varphi_0\rangle$ befindet.

- (c) Geben Sie die Zustandsfunktion als Funktion der Zeit t für $t \geq 0$ an.
- (d) Berechnen Sie den Ortserwartungswert zur Zeit t . Zu welchen Zeitpunkten T_n ($n \in \mathbb{N}$) ist der Ortserwartungswert identisch mit dem Ortserwartungswert zum Zeitpunkt $t = 0$?

4. (4 Punkte)

Gegeben sei der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + c \cdot e^{-\alpha x^2}$$

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

5. (5 Punkte)

Betrachten Sie ein System, in dem drei Wasserstoffatome linear angeordnet sind. Die Abstände zwischen benachbarten Atomkernen seien jeweils identisch.

- (a) Stellen Sie im Rahmen der Hückel-Näherung die Hamiltonmatrix, die jeweils die 1s-Orbitale der H-Atome berücksichtigt, auf.
- (b) Berechnen Sie die Energien aller Molekülorbitale in dieser Näherung.

6. (4 Punkte)

Betrachten Sie ein zweiatomiges Molekül in der starren Rotatornäherung, d.h. beschrieben durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{1}{2I} \hat{L}^2 \quad ,$$

wobei I das Trägheitsmoment bezeichnet.

Das System sei in einem Eigenzustand bezüglich \hat{L}^2 und \hat{L}_z mit den Quantenzahlen $l = 1$, $m = 0$. Welche Messwerte erhält man mit welchen Wahrscheinlichkeiten bei einer Messung von

- (a) \hat{L}_z (dem Drehimpuls um die z -Achse)
- (b) \hat{L}_x (dem Drehimpuls um die x -Achse)
- (c) \hat{L}_x^2 (dem Drehimpulsquadrat um die x -Achse) ?

Viel Erfolg!