2. 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)

Geben Sie für folgenden Hamiltonoperator alle Eigenwerte an:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \quad ,$$

wobei $V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad -a < x < a, \quad \text{mit} \quad a \in \mathbb{R},\ a > 0 \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$

2. (5 Punkte)

Betrachten Sie den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \quad .$$

(a) Zeigen Sie, daß für diesen Hamiltonoperator

$$\psi(x) = c \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}, \qquad c,\ k \in \mathbb{R}$$

eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung ist.

(b) Geben Sie für diesen Hamiltonoperator eine Lösung $\Psi(x,t)$ der zeitabhängigen Schrögingergleichung an, welche die Anfangsbedingung

$$\Psi(x, t = 0) = \psi(x) = c \cdot \mathrm{e}^{ikx}$$

erfüllt.

(c) Welche Messwerte erhalten Sie für gegebenes k, wenn Sie eine Impulsmessung durchführen?

3. (4 Punkte)

Betrachten Sie den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = A\hat{L}^2 + B\left(\hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2\right) \quad ,$$

wobei A, B reelle Konstanten, $\hat{L}_x^2, \hat{L}_y^2, \hat{L}_z^2$ die Komponenten des Drehimpulsoperators und $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ das Quadrat des Drehimpulsoperators ist. Geben Sie die möglichen Eigenwerte von $\hat{H}$ an.

4. (5 Punkte)

Gegeben sei der Hamiltonoperator

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

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

5. (4 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:

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

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

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

Geben Sie die Matrixdarstellung des Impulsoperators $\hat{p}$ bezüglich der Basis $(|\Psi_0\rangle, |\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle)$,

$$\mathbf{p} = \begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} & p_{02} \\ p_{10} & p_{11} & p_{12} \\ p_{20} & p_{21} & p_{22} \end{pmatrix}, \qquad \text{mit } p_{nn'} = \langle \Psi_n|\hat{p}|\Psi_{n'}\rangle,$$

explizit (durch Berechnung der $p_{nn'}$) an.

6. (2 Punkte)

Betrachten Sie den Hamiltonoperator

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

Im Rahmen des Variationsprinzips wird die bestmögliche Lösung für den Ansatz

$$\Psi(x) = (c_2\,x^2 + c_1\,x + c_0)\cdot \mathrm{e}^{-\alpha x^2}$$

mit den Variationsparametern α, c_0, c_1, c_2 gesucht.

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

7. (6 Punkte)

Betrachten Sie eine lineare, äquidistante Anordnung von 4 identischen Atomen (z.B. ähnlich dem Butadien) im Rahmen der Hückel-Näherung.

(a) Stellen Sie den Modell-Hamiltonoperator auf.

(b) Bestimmen Sie die Energieeigenwerte im Rahmen dieses Modells.

Viel Erfolg!