Theoretische Chemie
Prof. Dr. Uwe Manthe

Sommersemester 2010
3. August 2010

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)

Der Grundzustand des Wasserstoffatoms hat den Energieeigenwert

$$E_1 = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0}.$$

(a) Welchen Energieeigenwert hat ein Wasserstoffatom im Zustand 4f?

(b) Betrachten Sie den Vektorraum, der von allen 4f-Orbitalen (ohne Berücksichtigung des Elektronenspins) aufgespannt wird. Was ist seine Dimension ?

2. (4 Punkte)

Ein Wasserstoffatom befinde sich im $3\mathrm{d}_{yz}$-Zustand. Welche Messwerte erhält man mit welchen Wahrscheinlichkeiten, wenn man

(a) L^2 (das Betragsquadrat des Gesamtdrehimpulses)

(b) L_z (den Drehimpuls um die z-Achse)

misst?

3. (4 Punkte)

Betrachten Sie den Hamiltonoperator

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

und geben Sie für folgende $V(x)$ alle Eigenwerte an:

(a) $V(x) = \alpha \cdot x^2$
$\alpha > 0$ ist ein reeller Parameter.

(b) $V(x) = \begin{cases} \beta & \text{für} \quad 0 < x < L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$
β ist ein reeller Parameter.

4. (4 Punkte)

Ein System befindet sich zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand

$$\Psi = c_1\Psi_0 + c_2\Psi_\Delta$$

wobei Ψ_0 und Ψ_Δ normierte Eigenzustände zum Hamiltonoperator mit den Energieeigenwerten E_0 und $E_0 + \Delta$ sind.

(bitte wenden)

(a) Wenn man zum Zeitpunkt $t = 0$ eine Energiemessung durchführen würde, welche Meßwerte erhielte man mit welchen Wahrscheinlichkeiten?

(b) Betrachten Sie den Fall $c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Geben Sie die Wellenfunktion für Zeiten $t > 0$ an.

5. (6 Punkte)

Wir betrachten einen harmonischen Oszillator mit dem Hamiltonoperator $\hat{H} = \frac{\hat{p}}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. 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:

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

(a) Drücken Sie die Operatoren $\hat{x}$ und $\hat{x}^2$ durch die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren aus.

(b) Berechnen Sie den Erwartungswert der potentiellen Energie für den Grundzustand $\langle\Psi_0|V(x)|\Psi_0\rangle$.

6. (5 Punkte)

Zwischen den Drehimpulsoperatoren $\hat{L}^2, \hat{L}_x, \hat{L}_y$ und $\hat{L}_z$ gelten die folgenden Kommutatorrelationen:

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z \qquad \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_x \qquad \left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}_y$$

$$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_x\right] = \left[\hat{L}^2, \hat{L}_y\right] = \left[\hat{L}^2, \hat{L}_z\right] = 0$$

Welche der folgenden Operatoren sind simultan diagonalisierbar ?

(a) $\hat{L}_z - \hat{L}_x$ und $\hat{L}_z$

(b) $\hat{L}_x^2$ und $\hat{L}_z$

(c) $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2$ und $\hat{L}_z$

Begründen Sie Ihre Antwort durch eine Rechnung (die die oben genannten Relationen nutzen darf).

7. (10 Punkte)

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

(a) Stellen Sie den Modell-Hamiltonoperator auf.

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

(c) Bestimmen Sie die Wellenfunktion niedrigster Energie. Mit welcher Wahrscheinlichkeit befindet sich das Elektron, das durch diese Wellenfunktion beschrieben wird, jeweils an den vier Atomen?

Viel Erfolg!