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)

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?

2. (5 Punkte)

Gegeben sei der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 + y^2\right)$$

Berechnen Sie folgende Kommutatoren:

(a) $\left[\hat{H}, \hat{x}\right]$

(b) $\left[\hat{H}, \frac{\partial^2}{\partial x \partial y}\right]$

(c) $\left[\hat{H}, \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]$

Welche Folgen hat das Ergebnis aus Teilaufgabe (c) für die Eigenzustände von $x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}$ und $\hat{H}$?

3. (5 Punkte)

Betrachten Sie den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}kx^2 + a, \quad m, k > 0, \quad a \in \mathbb{R}.$$

Im Rahmen des Variationsprinzips wird die bestmögliche Lösung für den Ansatz

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

mit dem Variationsparameter α und der Normierungskonstanten c gesucht.

(a) Welchen Energieerwartungswert erhalten Sie für die optimale Lösung im Sinne des Variationsprinzips? Vergleichen Sie ihn mit dem exakten Wert der Grundzustandsenergie.

(b) Welche wichtige Aussage können sie bezüglich der erhaltenen Wellenfunktion treffen?

4. (8 Punkte)

Betrachtet wird das π-Elektronensystem der Stickstoff-Bor-Verbindung $N(BH_2)_3$.

(a) Stellen Sie im Rahmen der Hückel-Näherung die Hamiltonmatrix auf.

(b) Berechnen Sie die Energien aller Molekülorbitale in dieser Näherung.

5. (10 Punkte)

Betrachtet wird die Bewegung eines quantenmechanischen Teilchens mit Gesamtdrehimpulsquantenzahl $l = \frac{1}{2}$. Der Hamiltonoperator des Systems sei gegeben durch

$$\hat{H} = c_1\hat{L}^2 + c_2\hat{L}_z^2 + c_3\hat{L}_z, c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{R}.$$

Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Eigenfunktionen der Drehimpulsoperatoren $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$ sind wie folgt definiert:

$$\hat{L}^+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \qquad \hat{L}^- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y.$$

$|l, m>$ seien Eigenzustände zu $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$, wobei l die Quantenzahl zum Gesamtdrehimpuls und m Quantenzahl zur z-Komponente des Drehimpulses ist. Die Wirkung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren auf diese Eigenfunktionen ist gegeben durch:

$$\hat{L}_+|l, m> = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}|l, m+1>,$$
$$\hat{L}_-|l, m> = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}|l, m-1> .$$

(a) Drücken Sie die Operatoren $\hat{L}_x$ und $\hat{L}_y$ durch die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $\hat{L}_+$ und $\hat{L}_-$ aus.

(b) Berechnen Sie die Matrixdarstellung des Operators $\hat{L}_x$ in der Basis $K = \{\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle\}$.

(c) Das System sei präpariert im Zustand $|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle - \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle\right)$. Es wird der Drehimpuls um die z-Achse gemessen. Welche Messwerte werden mit welchen Wahrscheinlichkeiten erhalten? Begründen Sie ihr Ergebnis durch eine Rechnung.

(d) Bestimmen Sie die Zustandsfunktion als Funktion der Zeit t für $t \geq 0$, wenn sich das System zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand $|\Phi\rangle$ befindet.

(e) Berechnen Sie den $\hat{L}_y$-Erwartungswert im Zustand $|\Phi\rangle$ zur Zeit t. Zu welchen Zeitpunkten T_n ($n \in \mathbb{N}$) ist der Erwartungswert identisch mit dem $\hat{L}_y$-Erwartungswert zum Zeitpunkt $t = 0$?

Viel Erfolg!