Theoretische Chemie
Prof. Dr. Uwe Manthe

Sommersemester 2017
04. August 2017

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.

Klausurnummer: 1

1. (3 Punkte)

Die Energie des He^+-Ions im Grundzustand sei E_1.

(a) Die Energie des He^+-Ions im 3d-Zustand sei E_2. Geben Sie das Verhältnis E_2/E_1 an.

(b) Die Energie des Wasserstoffatoms im Zustand 1s sei E_3. Geben Sie E_3/E_1 an.

(c) Betrachten Sie den Vektorraum, der von allen 5f-Orbitalen (ohne Berücksichtigung des Elektronenspins) aufgespannt wird. Was ist seine Dimension ?

2. (2 Punkte)

Betrachten Sie den harmonischen Oszillator mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}kx^2$$

mit der Federkonstante k und der Masse m. Geben Sie die Energieeigenwerte dieses Hamiltonoperators an.

3. (13 Punkte)

Betrachten Sie ein Teilchen in einem Kasten, dessen Hamiltonoperator durch

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x) \quad , \quad V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für} \quad 0 < x < L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

gegeben ist.

(a) Geben Sie die Energieeigenwerte und Energieeigenfunktionen für dieses System an.

Zum Zeitpunkt $t = 0$ befindet sich das Teilchen im Zustand mit der Wellenfunktion

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(\sin(\frac{\pi x}{L}) - \sin(\frac{3\pi x}{L})\right) .$$

(b) Welche Energiewerte kann man zum Zeitpunkt $t = 0$ mit welcher Wahrscheinlichkeit messen?

(c) Berechnen Sie den Energieerwartungswert zum Zeitpunkt $t = 0$.

(d) Geben Sie die Wellenfunktion $\psi(x,t)$ für Zeiten $t > 0$ an.

(bitte wenden)

4. (8 Punkte)
Berechnen Sie die folgenden Kommutatoren.

(a) $[\hat{L}_x, \hat{x}]$ ($\hat{L}_x$ bezeichnet die x-Komponente des Drehimpulsoperators)

(b) $[\hat{\boldsymbol{r}}^2, \hat{p}_x]$ ($\hat{\boldsymbol{r}}^2 = \hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2$)

(c) $[\hat{p}_x\hat{p}_z, \hat{x}\hat{z}]$

5. (6 Punkte)

Betrachtet wird die Bewegung eines quantenmechanischen Teilchens mit Gesamtdrehimpulsquantenzahl $l = 1$. 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 $K = \{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle\}$.

6. (4 Punkte)

Betrachten Sie das π-Elektronensystem des Moleküls Anthracen ($C_{14}H_{10}$) im Rahmen der Hückel-Näherung und stellen Sie den Modell-Hamiltonoperator in dieser Näherung auf unter Annahme identischer C−C-Bindungslängen.

7. (10 Punkte)

Betrachten Sie das π-Elektronensystem im $CH_2{=}CH{-}CH{=}CH{-}CH_2^{\cdot}$ unter Annahme gleicher Bindungslängen zwischen den C-Atomen in der Hückel-Näherung.

(a) Geben Sie die zeitunabhängige Schrödingergleichung für eine Behandlung im Rahmen dieser Näherung an.

(b) Zeigen Sie, dass das Molekül ein nichtbindendes Orbital hat.

(c) Zeigen Sie, dass das Molekül ein Orbital mit der Energie $\alpha + \beta$ besitzt, wobei α die diagonalen und β die nicht verschwindenden off-diagonalen Matrixelemente des Hamiltonoperators bezeichnet. Bestimmen Sie dessen Wellenfunktion.

Viel Erfolg!