

## 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. (2 Punkte)

Die Energie des  $\text{Li}^{2+}$ -Ions im 2s-Zustand sei  $E$ .

- (a) Geben Sie die Energie des  $\text{Li}^{2+}$ -Ions im 4d-Zustand an.
- (b) Geben Sie die Energie des  $\text{He}^+$ -Ions im 3p-Zustand an.

2. (7 Punkte)

Betrachten Sie den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} .$$

und die Wellenfunktionen des Typs

$$\Psi(x, t) = c \cdot e^{-i(\omega t - kx)} \quad \text{mit } c, k, \omega \in \mathbb{R} \text{ und } x \in ]-\infty, \infty[.$$

- (a) Gibt es  $\omega$  und  $k$  Werte, für die diese Wellenfunktionen Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung sind.
- (b) Das System wird in einem Zustand präpariert, der durch die Wellenfunktion  $\Psi(x, 0)$  beschrieben wird. Welche Messwerte erhalten Sie mit nicht verschwindender Wahrscheinlichkeit für folgende Messungen:
  - (I) Energiemessung bei gegebenem  $k$
  - (II) Impulsmessung bei gegebenem  $k$
  - (III) Ortsmessung bei gegebenem  $k$

3. (7 Punkte)

Gegeben sei der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = A\hat{L}^2 + B(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2),$$

wobei  $A, B$  reelle Konstanten,  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$  die Komponenten des Drehimpulsoperators und  $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$  das Quadrat des Drehimpulsoperators sind.

- (a) Geben Sie die möglichen Eigenwerte von  $\hat{H}$  an.
- (b) Zum Zeitpunkt  $t = 0$  wird das System im Zustand  $|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |10\rangle)$  präpariert, wobei  $|lm\rangle$  Eigenzustände zu  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$  mit den Quantenzahlen  $l$  und  $m$  sind. Geben sie den Zustand  $|\Psi(t)\rangle$  zu beliebigen Zeiten  $t > 0$  an.

4. (11 Punkte)

Betrachten Sie einen harmonischen Oszillator mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2.$$

Die Eigenzustände sind  $|\Psi_n\rangle$ . Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $\hat{a}^\dagger$  und  $\hat{a}$  sind wie folgt definiert:

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

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

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

- Berechnen Sie die Kommutatoren  $[\hat{a}, \hat{x}]$ ,  $[\hat{a}^\dagger, \hat{p}]$ ,  $[\hat{a}, \hat{x}^2]$ .
- Drücken Sie die Operatoren  $\hat{x}$  und  $\hat{x}^2$  durch die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren aus.
- Berechnen Sie den Erwartungswert der potentiellen Energie für den Grundzustand  $\langle \Psi_0 | V(x) | \Psi_0 \rangle$ .

5. (7 Punkte)

Betrachten Sie die  $\pi$ -Systeme der folgenden Molekülonen in der Hückel-Näherung:

- Cyclopropenyl-Kation
- Cyclopropenyl-Anion

- Geben Sie die Orbitalenergien für beide Systeme an.
- Bestimmen Sie die Gesamtbindungsenergie des  $\pi$ -Elektronensystems für beide Moleküle.
- Sind die Ionen (I) und (II) aromatisch? Begründen Sie anhand der  $\pi$ -Bindungsenergie.

6. (8 Punkte)

Betrachten Sie das 1,3-Butadien in der Hückel-Näherung.

- Stellen Sie unter der Annahme identischer C-C Bindungen die Hückelmatrix für das konjugierte  $\pi$ -Elektronensystem auf.
- Zeigen Sie, dass die Wellenfunktionen

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{5+\sqrt{5}}} \begin{pmatrix} 1 \\ (\sqrt{5}+1)/2 \\ (\sqrt{5}+1)/2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{5-\sqrt{5}}} \begin{pmatrix} 1 \\ (\sqrt{5}-1)/2 \\ -(\sqrt{5}-1)/2 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Lösungen der Schrödingergleichung sind. Bestimmen Sie die zugehörigen Orbitalenergien.

Viel Erfolg!