Theoretische Chemie
Prof. Dr. Uwe Manthe

Sommersemester 2018
12. September 2018

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)
Betrachten Sie einen starren Rotator mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$$

Geben Sie die Eigenwerte von $\hat{H}$ an.

2. (9 Punkte)
Betrachten Sie einen harmonischen Oszillator mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{k}{2}\hat{x}^2, \text{ mit } m, k \in \mathbb{R}^+.$$

(a) Geben Sie die Eigenwerte von $\hat{H}$ an.

Betrachten Sie ein System, dass sich zum Zeitpunkt 0 im Zustand $|\Psi\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\,|0\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\,|1\rangle$ befindet, wobei $|0\rangle$ der Grundzustand und $|1\rangle$ der erste angeregte Zustand von $\hat{H}$ ist.

(b) Welche Energien können Sie mit welcher Wahrscheinlichkeit zum Zeitpunkt 0 messen.
(c) Bestimmen Sie den Energieerwartungswert zum Zeitpunkt 0.
(d) Bestimmen Sie den Zustand $|\Psi\rangle$ zum Zeitpunkt $\sqrt{\frac{4\pi^2 m}{k}}$.

3. (10 Punkte)
Betrachten Sie einen Raum, der von den Eigenfunktionen Ψ_{2s}, Ψ_{2p_x}, Ψ_{2p_y}, Ψ_{2p_z} des Wasserstoffatoms aufgespannt wird.

(a) Geben Sie einen orthonormalen Basissatz von Orbitalen, der sp-Hybridorbitale enthält, an.
(b) Kann der Orbitalsatz aus (a) so gewählt werden, dass alle Orbitale Eigenfunktionen zum Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms ($\hat{H}$) sind? Begründen Sie Ihre Antwort.
(c) Kann der Orbitalsatz aus (a) so gewählt werden, dass alle Orbitale Eigenfunktionen zum Drehimpulsoperator $\hat{L}^2$ sind? Begründen Sie Ihre Antwort.
(d) Kann der Orbitalsatz aus (a) so gewählt werden, dass alle Orbitale Eigenfunktionen zum Drehimpulsoperator um die z-Achse ($\hat{L}_z$) sind? Begründen Sie Ihre Antwort.
(e) Kann der Orbitalsatz aus (a) so gewählt werden, dass alle Orbitale Eigenfunktionen zum Drehimpulsoperator um die x-Achse ($\hat{L}_x$) sind? Begründen Sie Ihre Antwort.

(bitte wenden)

4. (12 Punkte)

Betrachten Sie die Drehimpulsoperatoren $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ und $\hat{L}^2$, die die Kommutatorrelationen $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$, $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$, $[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$ erfüllen. Die Zustände $|lm\rangle$ sind so gewählt, dass diese Eigenfunktionen zu $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$ mit den Quantenzahlen l und m sind. Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $\hat{L}_+$ und $\hat{L}_-$ sind wie folgt definiert:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + \mathrm{i}L_y$$
$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - \mathrm{i}L_y$$

Die Wirkungen von $\hat{L}_+$ und $\hat{L}_-$ auf einen Zustand $|lm\rangle$ sind:

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

(a) Berechnen Sie die Kommutatoren $[\hat{L}_-, \hat{L}_z]$, $[\hat{L}_+, \hat{L}_x^2]$ $[\hat{L}_+, \hat{L}_-]$.

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

(c) Berechnen Sie den Erwartungswert von $\hat{L_x}^2$ für den Zustand $|11\rangle$.

5. (6 Punkte)

Betrachten Sie ein System, in dem drei Wasserstoffatome linear angeordnet sind. Die Abstände zwischen benachbarten Atomkernen seien jeweils identisch.

(a) Stellen Sie im Rahmen der Hückel-Näherung die Hamiltonmatrix, die jeweils die 1s-Orbitale der H-Atome berücksichtigt, auf.

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

6. (3 Punkte)

Betrachten Sie das Bortrichlorid in der Hückel-Näherung. Stellen die Hückelmatrix für das π-Elektronensystem senkrecht zur Molekülebene auf.

Viel Erfolg!