

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. (4 Punkte)

Betrachten Sie ein System, das durch den Hamiltonoperator $\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I} + V_0$ beschrieben wird. Dabei ist \hat{L}^2 das Quadrat des Drehimpulsoperators und I und V_0 sind systemspezifische Konstanten.

- (a) Geben Sie die Energieeigenwerte des Systems für $V_0 = 0$ an.
- (b) Wievielfach sind diese Energieeigenzustände entartet?
- (c) Geben Sie die Grundzustandsenergie für den allgemeinen Fall $V_0 \neq 0$ an.

2. (3 Punkte)

Betrachten Sie das H_2 -Molekül in der Hückel-Näherung.

- (a) Geben Sie die Energieeigenwerte an.
- (b) Geben Sie die Energieeigenfunktionen an.

3. (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 ω und k Werte, für die diese Wellenfunktionen Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung sind. Falls ja, geben Sie diese Werte an.
- (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

4. (6 Punkte)

Wir betrachten einen harmonischen Oszillator mit der Masse m und der Frequenz ω . Die Eigenzustände sind $|\Psi_n\rangle$. Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren \hat{a}^\dagger und \hat{a} sind wie folgt definiert:

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

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

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

- Drücken Sie den Impulsoperator \hat{p} und dessen Quadrat \hat{p}^2 durch die Leiteroperatoren \hat{a}^\dagger und \hat{a} aus.
- Bestimmen Sie den Erwartungswert von \hat{p}^2 für den Grundzustand $|\Psi_0\rangle$.

5. (8 Punkte)

Der Hamiltonoperator für einen verschobenen harmonischen Oszillator lautet

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0 + V_1 \hat{x} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 \tag{1}$$

wobei m , V_0 , V_1 und ω reelle Konstanten sind. Zudem sind $m, \omega > 0$.

- Berechnen Sie die Kommutatoren $[\hat{p}, H]$ und $[\hat{x}, H]$.
- Der Erzeuger des nicht verschobenen harmonischen Oszillators ist

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

Nun sei $\hat{b}^\dagger = \hat{a}^\dagger + \gamma$ der Erzeuger für den verschobenen harmonischen Oszillator (1). Bestimmen Sie die Konstante γ so, dass gilt: $[\hat{H}, \hat{b}^\dagger] = \hbar\omega \hat{b}^\dagger$

6. (7 Punkte)

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

- Geben Sie einen orthonormalen Basissatz von Orbitalen, der sp-Hybridorbitale enthält, an.
- Kann der Orbitalsatz aus (a) so gewählt werden, dass alle Orbitale Eigenfunktionen zum Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms (\hat{H}) sind? Begründen Sie Ihre Antwort.
- Kann der Orbitalsatz aus (a) so gewählt werden, dass alle Orbitale Eigenfunktionen zum Drehimpulsoperator \hat{L}^2 sind? Begründen Sie Ihre Antwort.
- 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.

7. (7 Punkte)

Betrachten Sie die π -Systeme der folgenden Molekülonen in der Hückel-Näherung:

I Cyclopropenyl-Kation

II Cyclopropenyl-Anion

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

Viel Erfolg!