

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 F^{8+} -Ions im 2p-Zustand sei E .

- (a) Geben Sie die Energie des Li^{2+} -Ions im 4f-Zustand an.
- (b) Geben Sie die Energie des C^{5+} -Ions im 2s-Zustand an.

2. (5 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:

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

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

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

- (a) Drücken Sie den Ortsoperator \hat{x} durch die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren aus.
- (b) Geben Sie die Matrixdarstellung des Ortsoperators \hat{x} bezüglich der Basis $|\Psi_0\rangle, |\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle$ explizit an.

3. (7 Punkte)

Betrachten Sie den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} ((\hat{p}_x - q\hat{y})^2 + (\hat{p}_y + q\hat{x})^2 + \hat{p}_z^2), \quad \text{mit } q \in \mathbb{R}$$

- (a) Berechnen Sie die Kommutatoren $[\hat{p}_x - q\hat{y}, \hat{L}_z]$ und $[\hat{p}_y + q\hat{x}, \hat{L}_z]$, wobei $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ ist.
- (b) Berechnen Sie den Kommutator $[\hat{H}, \hat{L}_z]$.

4. (4 Punkte)

Ein Wasserstoffatom befinde sich im $3p_x$ -Zustand.

- (a) Welche Messwerte erhält man mit welchen Wahrscheinlichkeiten, wenn man den Drehimpuls um die z -Achse misst?
- (b) Welche Messwerte erhält man mit welchen Wahrscheinlichkeiten, wenn man anschließend eine weitere Messung des Drehimpuls um die z -Achse durchführt?

5. (4 Punkte)

Betrachten Sie den harmonischen Oszillator

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

wobei \hat{p} der Impulsoperator und \hat{x} der Ortsoperator ist. Die Eigenzustände zu diesem Hamiltonoperator seien $\Psi_n(x)$ mit $n = 0, 1, 2, \dots$.

Gegeben sei die Wellenfunktion

$$\Psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \phi(x).$$

Für welche E und $\phi(x)$ erfüllt $\Psi(x, t)$ die zeitabhängige Schrödingergleichung. Begründen Sie Ihre Antwort.

6. (10 Punkte)

Betrachten Sie das I_3^- -Molekülion. Im Rahmen der Hückel-Theorie sollen für jedes I ein p-Orbital, das entlang der Bindungsachse orientiert ist, betrachtet werden.

- Geben Sie die Hückelmatrix des Systems an.
- Bestimmen Sie die Orbitalenergien des Systems.
- Geben Sie die Energieeigenfunktion des nicht-bindenden Orbitals an. Wie wahrscheinlich ist es, dass sich ein Elektron, welches sich in diesem Orbital befindet, am zentralen I-Atom aufhält.
- Bestimmen Sie die Bindungsenergie des I_3^- relativ zur Energie von $I_2 + I^-$.

7. (6 Punkte)

Betrachten Sie ein Methanmolekül. Die sp^3 -Hybridorbitale des Kohlenstoffatoms setzen sich aus den 2p- und dem 2s-Orbital des Kohlenstoffs zusammen:

$$\begin{aligned} \psi_{sp^3,1} &= \frac{1}{2}\psi_{2s} + \frac{1}{2}\psi_{2p_x} + \frac{1}{2}\psi_{2p_y} + \frac{1}{2}\psi_{2p_z} & \psi_{sp^3,2} &= \frac{1}{2}\psi_{2s} - \frac{1}{2}\psi_{2p_x} - \frac{1}{2}\psi_{2p_y} + \frac{1}{2}\psi_{2p_z} \\ \psi_{sp^3,3} &= \frac{1}{2}\psi_{2s} - \frac{1}{2}\psi_{2p_x} + \frac{1}{2}\psi_{2p_y} - \frac{1}{2}\psi_{2p_z} & \psi_{sp^3,4} &= \frac{1}{2}\psi_{2s} + \frac{1}{2}\psi_{2p_x} - \frac{1}{2}\psi_{2p_y} - \frac{1}{2}\psi_{2p_z} \end{aligned}$$

- Geben Sie die unitäre Matrix an, die den Basiswechsel zwischen der Basis aus den Hybridorbitalen und der Basis aus dem 2s-Orbital und den 2p-Orbitalen des Kohlenstoffatoms vermittelt.
- Die Orbitale, die die lokalisierten C-H-Bindungen beschreiben, seien im Rahmen der Hückelnäherung näherungsweise

$$\psi_{\pm,i} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{sp^3,i} \pm \psi_{H,i}).$$

Dabei ist $\psi_{H,i}$ das 1s-Orbital des i-ten Wasserstoffatoms. Geben Sie die delokalisierten Molekülorbitale an, in denen das 2s- und die 2p-Orbitale des C-Atoms maximal entkoppelt sind.

Viel Erfolg!