Theoretische Chemie
Prof. Dr. Uwe Manthe

Sommersemester 2020
31. Juli 2020

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)

Das He^+-Ion hat für die Hauptquantenzahl $n = 2$ den Energieeigenwert $-R$. Welchen Energieeigenwert hat

(a) das C^{5+}-Ion im 3s-Zustand,

(b) das Be^{3+}-Ion im 3d-Zustand?

2. (13 Punkte)

Betrachten Sie die Drehimpulsoperatoren

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$

und

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2.$$

Die Zustände Y_{lm} sind so gewählt, dass diese Eigenfunktionen zu $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$ mit den Quantenzahlen l und m sind. Die Auf- und Absteiger $\hat{L}_+$ und $\hat{L}_-$ sind wie folgt definiert:

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

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

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

(a) Berechnen Sie die Kommutatoren $[z, L_x]$ und $[L_z, xy]$.

(b) Drücken Sie den Operator $\hat{L}_x$ durch die Auf- und Absteiger aus.

(c) Geben Sie die Matrixdarstellung des Operators $\hat{L}_x$ bezüglich der Basis $Y_{1(-1)}$, Y_{10}, Y_{11} explizit an.

(d) Geben Sie die Matrixdarstellung des Operators $\hat{L}_x$ bezüglich der Basis Y_{00}, $Y_{1(-1)}$, Y_{10}, Y_{11} explizit an.

3. (4 Punkte)

Ein Wasserstoffatom befinde sich im $3p_x$-Zustand. Welche Messwerte erhält man mit welchen Wahrscheinlichkeiten, wenn man folgendes misst?

(a) $\hat{L}_z$ (den Drehimpuls um die z-Achse)

(b) $\hat{L}_x$ (den Drehimpuls um die x-Achse)

(c) $\hat{L}^2$ (das Betragsquadrat des Gesamtdrehimpulses)

4. (3 Punkte)

Ein System befindet sich zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand

$$\Psi = \sqrt{1/3}\,\Psi_0 + \sqrt{2/3}\Psi_\Delta,$$

wobei Ψ_0 und Ψ_Δ normierte Eigenzustände zum Hamiltonoperator mit den Energieeigenwerten E_0 und $E_0 + \Delta$ sind. Geben Sie die Wellenfunktion für Zeiten $t > 0$ an.

5. (6 Punkte)

Betrachten Sie den Hamiltonoperator

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

(a) Geben sie die Eigenenergien des gegebenen Systems an.

(b) Zeigen Sie, dass $\Psi(x) = e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ eine Eigenfunktion des Hamiltonoperators $\hat{H}$ ist.

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.

(a) Geben Sie die Hückelmatrix des Systems an.

(b) Bestimmen Sie die Orbitalenergien des Systems.

(c) 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.

(d) Bestimmen Sie die Bindungsenergie des I_3^- relativ zur Energie von I_2+I^-.

7. (6 Punkte)

Betrachten Sie das π-Elektronensystem des Benzol-Moleküls im Rahmen der Hückel-Theorie. Orbitale, die die zeitunabhängige Schrödingergleichung lösen, können in der folgenden Form angegeben werden.

$$\phi_0 = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \phi_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{2\pi i/6} \\ e^{4\pi i/6} \\ -1 \\ e^{-4\pi i/6} \\ e^{-2\pi i/6} \end{pmatrix}, \phi_2 = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{4\pi i/6} \\ e^{-4\pi i/6} \\ 1 \\ e^{4\pi i/6} \\ e^{-4\pi i/6} \end{pmatrix},$$

$$\phi_3 = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \phi_4 = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{-4\pi i/6} \\ e^{4\pi i/6} \\ 1 \\ e^{-4\pi i/6} \\ e^{4\pi i/6} \end{pmatrix}, \phi_5 = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{-2\pi i/6} \\ e^{-4\pi i/6} \\ -1 \\ e^{4\pi i/6} \\ e^{2\pi i/6} \end{pmatrix}$$

(a) Geben Sie die Energiewerte, die zu den Orbitalen ϕ_0, ϕ_1 und ϕ_5 gehören, explizit an.

(b) Geben Sie eine Basis aus normierten reelen Orbitalen an, die den gleichen Raum wie die Basis aus ϕ_1 und ϕ_5 aufspannt.

Viel Erfolg!