Theoretische Chemie
Prof. Dr. Uwe Manthe

Sommersemester 2020
15. September 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.** (3 Punkte)

Betrachten Sie ein Teilchen mit folgendem Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x) \quad , \quad V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad 0 < x < 2L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

Geben Sie die Eigenenergien des Systems an.

**2.** (8 Punkte)

Betrachten Sie einen starren Rotator mit dem Hamiltonoperator

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

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

Die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}$ sind Eigenfunktionen zu $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$ mit den Quantenzahlen $l$ und $m$. Das System befindet sich zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand

$$\Psi(0) = \sqrt{\frac{3}{4}}\, Y_{00} + \frac{1}{2}\, Y_{2(-1)}$$

(b) Welche Messwerte erhalten Sie mit welchen Wahrscheinlichkeiten bei einer Energiemessung für $t = 0$.

(c) Geben Sie die Wellenfunktion für Zeiten $t > 0$ an.

**3.** (8 Punkte)

Betrachten Sie die reellen 2p-Orbitale

$$\Psi_{2p_x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{211} + \Psi_{21-1}), \quad \Psi_{2p_y} = \frac{1}{\sqrt{2}i}(\Psi_{211} - \Psi_{21-1}) \quad \text{und} \quad \Psi_{2p_z}.$$

Dabei sind die Funktionen $\Psi_{nlm}$ Orbitale des Wasserstoffatoms mit Hauptquantenzahl $n$, Nebenquantenzahl $l$ und magnetischer Quantenzahl $m$. Bestimmen Sie die Matrixdarstellung des Drehimpulsoperators $\hat{L}_z$ bezüglich der Basis $\{\Psi_{2p_x}, \Psi_{2p_y}, \Psi_{2p_z}\}$.

**4.** (9 Punkte)

Gegeben sei der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 + y^2\right)$$

(a) Berechnen Sie folgende Kommutatoren:

i. $\left[\frac{\partial}{\partial x}, \hat{H}\right]$

ii. $\left[y, \hat{H}\right]$

iii. $\left[\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right), \hat{H}\right]$

(b) Welche Folgen hat das Ergebnis aus Teilaufgabe (a iii) für die Eigenzustände von $x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}$ und $\hat{H}$?

**5.** (4 Punkte)

Betrachten Sie einen harmonischen Oszillator mit dem Hamiltonoperator

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

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

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

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

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

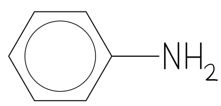
Die Grundzustandswellenfunktion des harmonischen Oszillators ist

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2).$$

Bestimmen Sie die Wellenfunktion des ersten angeregten Zustandes.

**6.** (4 Punkte)

Betrachten Sie das $\pi$-Elektronensystem des Moleküls Anilin ($C_6H_7N$)



im Rahmen der Hückel-Näherung. Nehmen Sie dabei an, dass alle CC-Bindungslängen identisch sind. Stellen Sie die Hückelmatrix für das $\pi$-Elektronensystem auf.

**7.** (8 Punkte)

Betrachten Sie das $\pi$-Elektronensystem des 1,3-Pentadienylradikals im Rahmen der Hückel-Theorie.

(a) Geben Sie die Orbitalenergien für das System an.

(b) Bestimmen Sie die Grundzustandsenergie des Systems.

(c) Geben Sie die Grundzustandsenergie für den Fall isolierter Doppelbindungen an und bestimmen Sie den Energiegewinn durch die Delokalisierung der Elektronen für das 1,3-Pentadienylradikal.

(Hinweis: $e^{i\pi/6} = \frac{\sqrt{3}}{2} + i\frac{1}{2}$, $e^{i\pi/3} = \frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2}$)

Viel Erfolg!