

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 den harmonischen Oszillator mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2$$

mit der Federkonstante k und der Masse m . Geben Sie die Energieeigenwerte dieses Hamiltonoperators an.

2. (4 Punkte)

Betrachten Sie den Hamiltonoperator $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$.

- Zeigen Sie, dass für diesen Hamiltonoperator $\psi(x) = c \cdot e^{i\beta x}$, $c, \beta \in \mathbb{C}$ eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung ist. Geben Sie die Energie des Zustands an.
- Welche Messwerte erhalten Sie mit welcher Wahrscheinlichkeit, wenn Sie eine Impulsmessung durchführen?

3. (10 Punkte)

Ein System befindet sich zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 - \Psi_2)$, wobei Ψ_1 und Ψ_2 normierte Eigenzustände zum Hamiltonoperator \hat{H} des Systems mit den Energieeigenwerten $E_1 = 0$ und $E_2 = \Delta$ sind.

- Wenn Sie zum Zeitpunkt $t = 0$ eine Energiemessung durchführen würden, welche Messwerte würden sich mit welchen Wahrscheinlichkeiten ergeben?

Betrachten Sie eine Observable A , der der lineare, hermitesche Operator \hat{A} zugeordnet ist. Die Matrixelemente von \hat{A} sind gegeben als

$$\langle \Psi_1 | \hat{A} | \Psi_1 \rangle = 0, \quad \langle \Psi_2 | \hat{A} | \Psi_2 \rangle = 0, \quad \langle \Psi_1 | \hat{A} | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2 | \hat{A} | \Psi_1 \rangle = a.$$

- Berechnen Sie den Erwartungswert der Observablen A zum Zeitpunkt $t = 0$.
- Geben Sie die Wellenfunktion $\Psi(t)$ für Zeiten $t > 0$ an.
- Berechnen Sie den Erwartungswert der Observablen A als Funktion der Zeit t .

4. (8 Punkte)

Betrachten Sie den Operator $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$.

- (a) Berechnen Sie die Kommutatoren $[\hat{x}, \hat{L}_z]$, $[\hat{x}^2, \hat{L}_z]$ und $[\hat{y}^2, \hat{L}_z]$.
 (b) Gegeben sei der Hamiltonoperator eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators mit entarteten Schwingungsfrequenzen

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

Zeigen Sie mit Hilfe von $[\hat{p}_x^2, \hat{L}_z] = -2i\hbar\hat{p}_x\hat{p}_y$ und $[\hat{p}_y^2, \hat{L}_z] = 2i\hbar\hat{p}_x\hat{p}_y$, dass $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$ gilt.

- (c) Welche Bedeutung hat $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$ für die möglichen Eigenfunktionen von \hat{H} ?

5. (7 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 Ψ_{nlm} Orbitale des Wasserstoffatoms mit Hauptquantenzahl n , Nebenquantenzahl l und magnetischer Quantenzahl m .

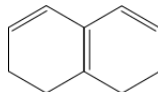
Für die Operatoren $\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$ und $\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$ gilt:

$$\hat{L}_\pm \Psi_{nlm} = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} \Psi_{nl(m \pm 1)}$$

- (a) Drücken Sie den Operator \hat{L}_x mittels \hat{L}_+ und \hat{L}_- aus.
 (b) Bestimmen Sie folgende Matrixelemente des Drehimpulsoperators: $\langle \Psi_{2p_x} | L_x | \Psi_{2p_z} \rangle$, $\langle \Psi_{2p_z} | L_x | \Psi_{2p_x} \rangle$.

6. (3 Punkte)

Betrachten Sie das π -Elektronensystem des Moleküls 1,2,7,8-Tetrahydronaphthalen ($C_{10}H_{12}$)



im Rahmen der Hückel-Näherung und stellen Sie den Modell-Hamiltonoperator in dieser Näherung unter Annahme identischer C-C-Bindungslängen auf.

7. (12 Punkte)

Betrachten Sie das π -Elektronensystem des CO_2 -Moleküls im Rahmen der Hückel-Theorie. Die Bindungsachse soll entlang der z -Achse liegen.

- (a) Geben Sie die Hückel-Matrix für das System an, wobei die Basis $\{p_x(O_1), p_x(C), p_x(O_2), p_y(O_1), p_y(C), p_y(O_2)\}$ genutzt werden soll. Hier bezeichnet $p_x(O_1)$ das p_x -Orbital des ersten O-Atoms, $p_x(C)$ das p_x -Orbital des C-Atoms usw.
 (b) Geben Sie die Hückel-Matrix für das aus den p_x -Orbitalen gebildeten Teilsystem an, das die Basis $\{p_x(O_1), p_x(C), p_x(O_2)\}$ berücksichtigt.
 (c) Bestimmen Sie die Orbitalenergien für das Teilsystem.
 (d) Geben Sie die Orbitalenergien für das Gesamtsystem an.
 (e) Geben Sie die Energieeigenfunktion aller nicht-bindenden Orbitale des Gesamtsystems an. Bestimmen Sie für jedes dieser Orbitale, wie hoch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit an den Atomen O_1 und C ist.

Viel Erfolg!