

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: NUMMER

1. Betrachten Sie den harmonischen Oszillator mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 - E_0,$$

mit der Federkonstante k , der Masse m und dem konstanten Potentialwert E_0 . Geben Sie die Energieeigenwerte dieses Hamiltonoperators an.

(3 Punkte)

2. Betrachten Sie den Hamiltonoperator durch

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \lambda\Theta(\hat{x}), \quad \text{mit } \Theta(\hat{x}) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 < x < L, \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases},$$

wobei $\lambda > 0$ und reell. Geben Sie die Energieeigenwerte und Energieeigenfunktionen für diesen Hamiltonoperator an.

(2 Punkte)

3. Ein System befindet sich im Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand $|\Psi\rangle = \frac{3}{5}|\phi_1\rangle + \frac{4}{5}|\phi_2\rangle$, wobei $|\phi_1\rangle$ und $|\phi_2\rangle$ normierte Eigenzustände zum Hamiltonoperator \hat{H} mit den Eigenenergien E_1 und E_2 ($E_1 \neq E_2$) sind.

- Normieren Sie $|\Psi\rangle$.
- Geben Sie die zeitabhängige Schrödingergleichung an.
- Geben Sie $|\Psi(t)\rangle$ für beliebige Zeiten t an.

(4 Punkte)

4. Betrachtet wird die Bewegung eines quantenmechanischen Teilchens in einem Zustand mit Gesamtdrehimpulsquantenzahl $l = 1$. Leiteroperatoren für die Eigenfunktionen $|l, m\rangle$ der Drehimpulsoperatoren \hat{L}^2 und \hat{L}_z sind definiert durch

$$\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y, \quad \hat{L}_{\pm}|l, m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}|l, m \pm 1\rangle.$$

- Drücken Sie die Operatoren \hat{L}_x und \hat{L}_y durch \hat{L}_+ und \hat{L}_- aus.
- Berechnen Sie die explizite Matrixdarstellung von \hat{L}_y in der Basis $\mathcal{B} = \{|1, -1\rangle, |1, 1\rangle\}$.
- Berechnen Sie die explizite Matrixdarstellung von \hat{L}_+ in der Basis $\mathcal{D} = \{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle\}$.
- Ist \hat{L}_+ ein hermitescher Operator? Begründen Sie!

(10 Punkte)

5. Betrachten Sie ein zweiatomiges Molekül in der Näherung des starren Rotators. Das Molekül wird dann beschrieben durch den Hamiltonoperator

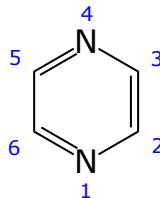
$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I}.$$

Das Molekül sei in einem Eigenzustand bezüglich \hat{L}^2 und \hat{L}_z mit $l = 1$, $m = 0$. Welche Messwerte erhält man mit welchen Wahrscheinlichkeiten bei einer Messung

- der Energie,
- das Drehimpulsquadrat um die z -Achse (L_z^2)?
- Das Molekül wurde im oben genannten Zustand präpariert, anschließend wurde bei einer einmaligen Messung des Drehimpulses um die x -Achse (L_x) ein Wert von $-\hbar$ gemessen. Wie wahrscheinlich ist dieses Ergebnis?
- Welche Messwerte erhalten Sie mit welcher Wahrscheinlichkeit, wenn Sie nach der Messung aus (c) erneut L_x messen?

(5 Punkte)

6. Betrachten Sie das Pyrazin-Molekül.



- Stellen Sie die Hückelmatrix für das π -System des Moleküls auf.
- Zeigen Sie, dass der Zustand $|\Psi\rangle = \frac{1}{2}(0, -1, 1, 0, -1, 1)^T$ (die Komponenten sind wie in der Abbildung dargestellt sortiert, d.h. $(1, 0, 0, 0, 0, 0)^T$ gibt das p -Orbital am N_1 an) ein Eigenzustand zur Hückelmatrix ist. Geben Sie den zugehörigen Energieeigenwert an.

(7 Punkte)

7. Betrachten Sie das CO_2 -Molekül, das parallel zur z -Achse im Raum steht.

- Bestimmen Sie die Hückelmatrix für das π -System des Moleküls.
- Betrachten Sie das π -Elektronensystem, das von den p_x -Orbitalen der beteiligten Atome aufgespannt wird. Geben Sie die entsprechende Hückelmatrix und die sich daraus ergebenden Energieeigenwerte an.
- Geben Sie alle Eigenwerte und deren Entartung für die Hückelmatrix des CO_2 aus Teilaufgabe a) an.

(9 Punkte)

Viel Erfolg!