

## 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. (2 Punkte)

Positronium ist ein exotisches Atom, welches aus einem Elektron und einem Positron anstelle eines normalen Atomkerns besteht. Das Positron ist ein Elementarteilchen mit Ladung  $+e$ , Spin  $\frac{1}{2}$  und der Masse  $m_e$  gleich der Elektronenmasse (d.h. es ist ein sogenanntes Antielektron). Seine Grundzustandsenergie ist

$$E_1 = -\frac{m_e e^4}{64\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2}$$

Welche Energie besitzt der erste angeregte Zustand des Positroniums und wievielfach ist er entartet?

2. (5 Punkte)

Zwischen den Drehimpulsoperatoren  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$  und  $\hat{L}_z$  gelten die folgenden Kommutatorrelationen:

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z, \quad \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_x, \quad \left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}_y, \quad \left[\hat{L}^2, \hat{L}_x\right] = \left[\hat{L}^2, \hat{L}_y\right] = \left[\hat{L}^2, \hat{L}_z\right] = 0$$

Welche der folgenden Operatoren sind simultan diagonalisierbar?

a)  $\hat{L}_z - \hat{L}_x$  und  $\hat{L}_z$       b)  $\hat{L}_x^2$  und  $\hat{L}_z$       c)  $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2$  und  $\hat{L}_z$

Begründen Sie Ihre Antwort durch eine Rechnung (die die oben genannten Relationen nutzen darf).

3. (8 Punkte)

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

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + c_3\Psi_3$$

Die Wellenfunktionen erfüllen die Gleichungen

$$\hat{H}\Psi_1 = (E_0 - \Delta)\Psi_1, \quad \hat{H}\Psi_2 = E_0\Psi_2, \quad \hat{H}\Psi_3 = (E_0 + \Delta)\Psi_3,$$

wobei  $\hat{H}$  der Hamiltonoperator des Systems ist.

- (a) Sie führen eine Energiemessung durch. Mit welchen Wahrscheinlichkeiten erhalten Sie welche Messwerte?

- (b) Zum Zeitpunkt  $t = 0$  wird die Wellenfunktion in einem Zustand mit  $c_1 = c_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ,  $c_2 = 0$  präpariert. Geben Sie die Wellenfunktion zum Zeitpunkt  $t > 0$  an. Welche Ergebnisse erwarten Sie bei einer Energiemessung zu diesem Zeitpunkt?
- (c) Bestimmen Sie für die Wellenfunktion aus b) den zeitabhängigen Energieerwartungswert  $\langle \hat{H} \rangle (t)$ .
- (d) Bestimmen Sie für die Wellenfunktion aus b) die Standardabweichung der Energie  $\Delta E = \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2}$  zum Zeitpunkt  $t = 0$ .

4. (3 Punkte)

Die Wellenfunktion eines freien Teilchens mit der Masse  $m$  sei

$$\psi(x) = c \cdot e^{i\alpha x}, \quad c, \alpha \in \mathbb{R} \quad .$$

- (a) Welche Messwerte erhalten Sie für gegebenes  $\alpha$ , wenn Sie eine Impulsmessung durchführen?
- (b) Eine Energiemessung ergibt den eindeutigen Messwert  $E$ . Welche Werte kann  $\alpha$  haben?

5. (6 Punkte)

Wir betrachten einen harmonischen Oszillator mit dem Hamiltonoperator  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ . Die Eigenzustände sind  $|\Psi_n\rangle$ . Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $\hat{a}^\dagger$  und  $\hat{a}$  sind wie folgt definiert:

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

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 die Operatoren  $\hat{x}$  und  $\hat{x}^2$  durch die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren aus.
- (b) Berechnen Sie den Erwartungswert der potentiellen Energie für den Grundzustand  $\langle \Psi_0 | V(x) | \Psi_0 \rangle$ .

6. (10 Punkte)

Betrachten Sie das  $\text{BeH}_2$ -Molekül. In lokalisierter Darstellung können Sie die Bindung mittels  $sp$ -Hybridorbitalen am Be und den  $s$ -Orbitalen des Wasserstoffs beschreiben. Die bindenden lokalisierten Molekülorbitale haben die Form

$$\Psi_1 = c_1 \Psi_{\text{H}_1} + c_2 \Psi_{\text{Be}(sp),1}, \quad \Psi_2 = c_1 \Psi_{\text{H}_2} + c_2 \Psi_{\text{Be}(sp),2}, \quad \text{wobei } |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

- (a) Geben Sie die  $sp$ -Hybridorbitale als Linearkombination von geeigneten  $s$ - und  $p$ -Atomorbitalen des Be an.
- (b) Geben Sie die unitäre Transformationsmatrix an, welche die Hybridorbitale am Be auf Atomorbitale transformiert.
- (c) Geben Sie delokalisierte Molekülorbitale an, die jeweils nur  $s$ - oder  $p$ -Atomorbitale des Be enthalten.
- (d) Geben Sie in Hückel-Näherung (Vernachlässigung des Überlapps) ausgehend von  $\Psi_1$  und  $\Psi_2$  delokalisierte antibindende Molekülorbitale an, die jeweils nur  $s$ - oder  $p$ -Atomorbitale des Be enthalten.
- (e) Skizzieren Sie schematisch das zugehörige MO-Diagramm des  $\text{BeH}_2$ .

Viel Erfolg!