

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:

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

Geben Sie die Eigenenergien des Systems an.

2. (2 Punkte)

Betrachten Sie den harmonischen Oszillator mit dem Hamiltonoperator

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

mit der Federkonstante k und der Masse m .

Geben Sie die Energieeigenwerte dieses Hamiltonoperators an.

3. (4 Punkte)

Berechnen Sie die folgenden Kommutatoren.

- (a) $[\hat{L}_x, \hat{x}]$ (\hat{L}_x bezeichnet die x -Komponente des Drehimpulsoperators)
- (b) $[\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2, \hat{p}_x]$

4. (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.

5. (8 Punkte)

Betrachten Sie die beiden reellen 2p-Orbitale

$$\Psi_{2p_x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{211} + \Psi_{21-1}) \quad \text{und} \quad \Psi_{2p_z} = \Psi_{210}.$$

Dabei sind die Funktionen Ψ_{nlm} Orbitale des Wasserstoffatoms mit Hauptquantenzahl n , Nebenquantenzahl l und magnetischer Quantenzahl m .

Die Operatoren \hat{L}_+ und \hat{L}_- sind durch

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

definiert. Ihre Wirkung auf die Wellenfunktionen Ψ_{nlm} ist durch

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ \Psi_{nlm} &= \begin{cases} 0, & \text{für } m = l \\ \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \Psi_{nlm+1}, & \text{für } m = -l, -l+1, \dots, l-1 \end{cases} \\ \hat{L}_- \Psi_{nlm} &= \begin{cases} 0, & \text{für } m = -l \\ \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \Psi_{nlm-1}, & \text{für } m = -l+1, -l+2, \dots, l \end{cases} \end{aligned}$$

definiert.

- (a) Berechnen Sie $\hat{L}_+ \Psi_{2p_x}$.
- (b) Bestimmen Sie die Matrixdarstellung des Operators \hat{L}_x in der Basis $\{\Psi_{2p_x}, \Psi_{2p_z}\}$.

6. (7 Punkte)

Betrachtet wird das π -Elektronensystem der Stickstoff-Bor-Verbindung $\text{N}(\text{BH}_2)_3$.

- (a) Stellen Sie im Rahmen der Hückel-Näherung die Hamiltonmatrix auf.
- (b) Berechnen Sie die Energien aller Molekülorbitale in dieser Näherung.

7. (4 Punkte)

Betrachten Sie das 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 delokalisierten Molekülorbitale an, die jeweils nur s - oder p -Atomorbitale des Be enthalten.

Viel Erfolg!