

## BLATT 1

### AUFRISCHUNG THEORETISCHE CHEMIE I

#### AUFGABE 1: *Teilchen im Kasten*

Ein Elektron bewege sich in einem eindimensionalen, unendlich hohen Potentialtopf der Länge  $L = 1 \text{ nm}$ :

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{falls } 0 \leq x \leq L \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases}$$

1. Stellen Sie die nichtrelativistische, zeitunabhängige Schrödingergleichung auf und formulieren Sie die Randbedingungen.
2. Berechnen Sie die diskreten Energieeigenwerte und die zugehörigen Eigenfunktionen.
  - a) Zeichnen Sie die Eigenfunktionen für  $n = 1 - 4$ .
  - b) Wie groß ist die Energie des niedrigsten Eigenzustands (in eV), den das Elektron besetzen kann? Warum ist die Quantenzahl  $n = 0$  nicht erlaubt?
  - c) Wie groß ist die Wellenlänge  $\lambda$  der zugehörigen Wellenfunktion? Welche Geschwindigkeit müsste ein freies Elektron besitzen, um eine de Broglie Wellenlänge von gleicher Größe zu haben?
  - d) Durch Absorption von Licht werde ein elektronischer Übergang vom Grund- in den ersten angeregten Zustand erzwungen. Welche Wellenlänge hat das absorbierte Licht?
3. Das Elektron befinde sich im Zustand mit der Quantenzahl  $n = 4$ . Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit es zwischen  $x = 0$  und  $x = L/2$  zu finden?

(Elektronenmasse:  $m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ , Planck Konstante:  $\hbar = h/2\pi = 1.055 \times 10^{-34} \text{ Js}$ , Lichtgeschwindigkeit  $c = 2.997 \times 10^8 \text{ m/s}$ ,  $\int \sin^2(\alpha x) dx = \frac{1}{2}x - \frac{1}{4\alpha} \sin(2\alpha x)$ )

#### AUFGABE 2: *Harmonischer Oszillator*

Ein schwingendes CO-Molekül kann als harmonischer Oszillator mit der reduzierten Masse  $\mu = \frac{m_C m_O}{m_C + m_O}$  idealisiert werden.

1. Stellen Sie die nichtrelativistische, zeitunabhängige Schrödingergleichung für den eindimensionalen harmonischen Oszillator auf.
2. Worin unterscheidet sich die quantenmechanische Beschreibung der Energie des harmonischen Oszillators von der klassischen?
3. Die harmonische Kraftkonstante von CO sei  $D = 1870 \text{ N/m}$ . Wie groß ist die Energie des niedrigsten Schwingungszustandes  $v = 0$  (in eV)?
4. Berechnen Sie die harmonische Schwingungsfrequenz (in  $s^{-1}$ ) und die Wellenzahl (in  $\text{cm}^{-1}$ ) für den in einem Infrarotspektrum messbaren Übergang von  $v = 0$  nach  $v = 1$ .

5. Der Wirklichkeit etwas näher kommt die Beschreibung des CO-Moleküls als anharmonischer Oszillator, z.B. durch das Morse-Potential. Welche Auswirkungen hat die Anharmonizität auf die Frequenz des Übergangs von  $v$  nach  $v + 1$ ?

(Atommassen:  $m_C = 19.93 \times 10^{-27}$  kg,  $m_O = 26.56 \times 10^{-27}$  kg)

### AUFGABE 3: Bohr'sches Atommodell, Wasserstoffatom

Das Wasserstoffatom ist das einzige chemisch relevante System, für welches eine exakte, analytische Lösung der nicht-relativistischen Schrödingergleichung existiert.

1. Stellen Sie die nichtrelativistische, zeitunabhängige Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom in sphärischen Koordinaten auf und skizzieren Sie kurz den Lösungsansatz.
2. Geben Sie die Energien der im H-Atom erlaubten Eigenzustände des Elektrons an. Wie ist die Rydberg-Energie definiert und wie groß ist sie (in eV)?
3. Berechnen Sie die Frequenz eines emittierten Lichtquants beim Übergang vom Eigenzustand  $m$  in den Eigenzustand  $n$ . Was sind die Lyman- und Balmer-Serie?
4. Wie ändern sich die Energien wenn man statt dem H-Atom das  $\text{Li}^{2+}$ -Ion betrachtet?
5. Was ist ein Rydberg-Zustand?
6. Wieviele radiale Knoten besitzen die folgenden Orbitale des H-Atoms:
  - (a)  $2p_x$
  - (b)  $3p_z$
  - (c)  $3d_{xy}$
  - (d)  $5d_{x^2-y^2}$ ?

### AUFGABE 4: Operatoren und Kommutatoren

1. Definieren Sie den Begriff "Observable" und zeigen Sie, dass Observablen durch Erwartungswerte hermitescher Operatoren ( $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ ) dargestellt werden.
2. Beweisen Sie die folgende *Kommutatorrelation*:

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$$

3. Berechnen Sie  $[\hat{x}, \hat{p}]$  für  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ . Sind die zu  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$  gehörigen Observablen gleichzeitig scharf messbar?
4. Der lineare Operator  $\hat{A}$  erfülle die Eigenwertgleichung

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle.$$

Der inverse Operator  $\hat{A}^{-1}$  existiere. Zeigen Sie, dass er denselben Eigenzustand besitzt und berechnen Sie den zugehörigen Eigenwert.

**Hinweis:** Das Skript zur Vorlesung Theoretische Chemie I könnte sich bei der Bearbeitung dieses Übungsblattes als sehr hilfreich erweisen.