

Checkliste zur Klausur Theoretische Chemie I WS 2018/19

1. Wellenfunktion:

- Welche Bedingungen muss eine physikalisch sinnvolle Wellenfunktion erfüllen?
- abstrakte Darstellung („Ket“ $|\psi\rangle$ im Hilbertraum)
- Darstellung im Ortsraum ($\psi(x)$)
- Bedeutung des Betragsquadrats $|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x)$ („Wahrscheinlichkeitsdichte“)
- Normierungsbedingung $\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x)\psi(x) = 1$
- die Wellenfunktion als reelles oder komplexwertiges Objekt
- Was versteht man unter Überlagerungszuständen (Superpositionszuständen)? Wie ist der Zustand der Schrödingerkatze definiert?

2. Operatoren:

- Definition des Orts- und Impulsoperators
- Wie hängt der Operator der kinetischen Energie mit \hat{p} zusammen?
- Was ist die physikalische Bedeutung des Hamilton-Operators?
- Wie ist der Drehimpuls definiert (klassisch bzw. quantenmechanisch)?
- Wie lauten der Drehimpulsoperator und der Hamilton-Operator für die Bewegung eines Teilchens auf einem Ring?

3. Eigenschaften von Operatoren:

- Was versteht man unter hermiteschen (selbstadjungierten) Operatoren?
- Welche speziellen Eigenschaften ergeben sich für hermitesche Operatoren?
- Wie ist der Erwartungswert eines Operators definiert?
- Wie ist der Kommutator zweier Operatoren definiert? Wie lautet speziell der Kommutator von Orts- und Impulsoperator?
- Was lässt sich über die Eigenfunktionen kommutierender Operatoren aussagen?

4. Eigenwertgleichungen:

- Welche Bedingung müssen die Eigenfunktionen eines Operators erfüllen?
- Was versteht man unter Entartung?
- Welche Eigenschaft besitzen die Eigenwerte eines hermiteschen Operators?
- Welche Eigenschaft besitzen die Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators?
- Wie lautet die Eigenwertgleichung des Hamilton-Operators? (Diese wird auch als zeitunabhängige Schrödingergleichung bezeichnet.)

5. Mehrdimensionale Probleme:

- Wie lauten die Eigenfunktionen und Eigenwerte eines separablen Hamiltonoperators, z.B. $\hat{H}(x, y) = \hat{H}_x(x) + \hat{H}_y(y)$?

- Wie lauten der Hamilton-Operator sowie die Eigenfunktionen und Eigenwerte eines Teilchens in einem ein- bzw. zweidimensionalen Kasten ?
6. Messprozess:
- Warum muss im Falle von Superpositionszuständen der Messprozess statistisch interpretiert werden?
 - Mit welcher Wahrscheinlichkeit werden die Zustände *alive* und *dead* der Schrödingerkatze gemessen?
 - Was sagt der Kommutator zweier Operatoren über die gleichzeitige Messbarkeit der betreffenden Observablen aus?
 - Was versteht man unter der sogenannten Unschärferelation?
7. Wie lautet die zeitabhängige Form der Schrödingergleichung?
8. Teilchen im Kasten:
- Welche Quantisierungsbedingung ergibt sich aus der Schrödingergleichung des Teilchens im Kasten?
 - Was ist der physikalische Grund für die Quantisierung?
 - Wie lässt sich das Modell des Teilchens im Kasten auf die Berechnung der Energieeigenwerte linearer Polyene anwenden?
9. Teilchen auf einem Ring:
- Welche Quantisierungsbedingung ergibt sich aus der Schrödingergleichung des Teilchens auf einem Ring?
 - Was ist der physikalische Grund für die Quantisierung?
10. Tunneleffekt:
- Wie ist die sogenannte Transmissionswahrscheinlichkeit definiert?
 - Welche Form nimmt die Wellenfunktion im klassisch verbotenen Bereich an?
11. Harmonischer Oszillator:
- Wie lautet die Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators in einer Dimension?
 - Wie lautet die Schrödingergleichung eines zweidimensionalen, separablen harmonischen Oszillators?
12. Wasserstoffatom:
- Wie lautet das Coulombpotential für die Elektron-Kern-Wechselwirkung?
 - Wie lautet die allgemeine Form der Eigenfunktionen $\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$? Diese werden üblicherweise als Atomorbitale bezeichnet.
 - Welche Relation besteht zwischen den verschiedenen Quantenzahlen?
 - Was versteht man unter dem Zentrifugalpotential?
 - Was versteht man unter der radialen Wahrscheinlichkeitsverteilung?

- Wie lautet der Erwartungswert für den radialen Abstand des Elektrons vom Kern?

13. Elektronenspin:

- Wie lauten die möglichen Spinzustände in der Wellenfunktion $|\psi_{n,l,m_l,m_s}\rangle = |\psi_{n,l,m_l}\rangle |m_s\rangle$ des Wasserstoffatoms?
- Was unterscheidet den Spinfreiheitsgrad vom Bahndrehimpuls?

14. Hamiltonoperator für Mehrelektronensysteme:

- Hamiltonoperator für N Elektronen und M Kerne
- anziehende vs. abstoßende Coulombwechselwirkung
- Definition des elektronischen Hamiltonoperators innerhalb der Born-Oppenheimer-Näherung (kinetische Energie der Elektronen + Coulombwechselwirkungen)
- Hamiltonoperator des He-Atoms, des H_2^+ -Moleküls, sowie des H_2 -Moleküls

15. LCAO-MO Verfahren:

- Darstellung von Wellenfunktion und Hamiltonoperator in einer Basis
- Lösung der Säkulargleichung, Eigenwerte und Eigenvektoren
- Anwendungsbeispiel H_2^+ -Molekül: Bedeutung von Coulomb- und Resonanzintegralen

16. Hückeltheorie:

- Konjugierte π -Elektronensysteme und π -Molekülorbitale
- Grundlagen der Hückeltheorie, vereinfachte Coulomb- und Resonanzintegrale
- Lösung der Säkulargleichung
- Frost-Musulin-Kreis

17. Mehrelektronenwellenfunktionen:

- Antisymmetrie fermionischer Wellenfunktionen
- Raum- und Spin-Anteile der Wellenfunktion
- Spinorbitale und Slater-Determinanten
- Pauli-Prinzip (sowie Äquivalenz zur Antisymmetrieeigenschaft der Wellenfunktion)