

---

# Klausur zur Experimentalphysik 4

Prof. Dr. L. Oberauer

Sommersemester 2011

18. August 2011

**Musterlösung**

---

## Aufgabe 1 (7 Punkte)

- a) Berechnen Sie nach dem Bohrschen Atommodell die Energieniveaus für ein Elektron eines  $\text{Li}^{2+}$ -Ions in Zuständen mit  $n = 1, 2$ . Die Kernbewegung sei hierbei vernachlässigbar.

### Lösung:

Im Bohrschen Atommodell ist die Energie des Elektrons für eine beliebige Kernladung  $Z$  gegeben durch:

$$E_n = -13.6 \frac{Z^2}{n^2} \text{eV} \quad (1)$$

[1]

Setzt man nun  $Z = 3$  für Lithium ein, so erhält man:

$$E_1 = -122 \text{eV} \quad (2)$$

$$E_2 = -30.6 \text{eV} \quad (3)$$

[1]

- b) Berücksichtigt man die Kernbewegung, so erhält man für die Isotope  ${}^6\text{Li}^{2+}$  und  ${}^7\text{Li}^{2+}$  unterschiedliche Termenergien. Berechnen Sie den davon herrührenden Unterschied der Frequenzen und Wellenlängen des emittierten Lichts für den Übergang  $n = 2 \rightarrow n = 1$  und zeigen sie, dass die relative Frequenzänderung  $\Delta\nu/\nu \approx 10^{-5}$  ist.

### Lösung:

Für die Energiedifferenz vom  $n_1$ -ten in den  $n_2$ -ten Zustand erhält man (unter Vernachlässigung der Kernbewegung)

$$\Delta E = E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{m_e e^4 Z^2}{8 \epsilon_0^2 h^2} \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \quad (4)$$

[1]

In diesem Fall beträgt sie

$$\Delta E = 91.8392 \text{ eV} \quad (5)$$

Will man nun die Masse des Kerns in Betracht ziehen, so muss man mit der reduzierten Masse  $\mu = \frac{m_e m_k}{m_e + m_k}$  rechnen:

$$E_{red} = E \frac{\mu}{m_e} \Rightarrow \Delta E_{red} = \Delta E \frac{m_k}{m_k + m_e} = \Delta E \frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_k}} \quad (6)$$

[1]

wobei  $m_e$  die Masse des Elektrons und  $m_k$  die Masse des Kerns darstellt. Für  ${}^6\text{Li}^{2+}$  berechnet sich  $m_k$  zu

$$m_k = 3m_p + 3m_n \approx 6m_n \quad (7)$$

und daher ist die Energiedifferenz zwischen dem Übergang  $n = 2 \rightarrow n = 1$  gegeben durch

$$\Delta E_{6\text{Li}} = 91.8308 \text{ eV} \quad (8)$$

Daher:

$$\nu_{6\text{Li}} = \frac{\Delta E_{6\text{Li}}}{h} = 2.22044 \times 10^{16} \text{ s}^{-1} \quad (9)$$

$$\lambda_{6\text{Li}} = \frac{c}{\nu_{6\text{Li}}} = 1.35015 \times 10^{-8} \text{ m} \quad (10)$$

[1]

Hingegen für  ${}^7\text{Li}$  ist

$$m_k = 3m_p + 4m_n \approx 7m_n \quad (11)$$

Daraus folgt:

$$\Delta E_{7\text{Li}} = 91.83208 \text{ eV} \quad (12)$$

$$\nu_{7\text{Li}} = \frac{\Delta E_{7\text{Li}}}{h} = 2.22047 \times 10^{16} \text{ s}^{-1} \quad (13)$$

$$\lambda_{7\text{Li}} = \frac{c}{\nu_{7\text{Li}}} = 1.35013 \times 10^{-8} \text{ m} \quad (14)$$

[1]

Daher beträgt die absolute Wellenlängen- und Frequenzänderung:

$$\Delta\lambda = 2 \times 10^{-13}\text{m} \tag{15}$$

$$\Delta\nu = 3 \times 10^{11}\text{s}^{-1} \tag{16}$$

wohingegen

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} = 10^{-5} \tag{17}$$

[1]

## Aufgabe 2 (5 Punkte)

- a) Definieren Sie den Begriff des 'stationären Zustandes' in der Quantenmechanik und erklären Sie daraus den Unterschied zwischen der zeitabhängigen und der zeitunabhängigen Schrödingergleichung.

### Lösung:

Ein stationärer Zustand ist ein Zustand, in dem die Wellenfunktion faktorisiert werden kann:

$$\psi(x, t) = u(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (18)$$

d.h. das Betragsquadrat (und damit die Wahrscheinlichkeitsdichte) ist unabhängig von  $t$ . [1]

Die vollständige Schrödingergleichung lautet:

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla^2\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (19)$$

Setzt man den Ausdruck für den stationären Zustand ein, wird die rechte Seite zu  $E\psi$  und resultiert in der zeitunabhängigen Schrödingergleichung. Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung sind somit immer stationäre Zustände. Dagegen kann die zeitabhängige Schrödingergleichung auch durch eine Superposition von verschiedenen stationären Zuständen gelöst werden.

[1]

- b) Zum Zeitpunkt  $t = 0$  ist die Wellenfunktion eines Teilchens gegeben durch

$$\psi(x) = (u_1(x) + u_2(x)) / \sqrt{2} \quad (20)$$

Hier sind  $u_1(x)$  und  $u_2(x)$  zwei reelle Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung mit den Energien  $E_1$  bzw.  $E_2$ . Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeitsdichte des Teilchens zu einem späteren Zeitpunkt  $t$ .

### Lösung:

Bei einer Überlagerung wie

$$\frac{u_1(x) + u_2(x)}{\sqrt{2}} \quad (21)$$

ist klar, dass es sich um die  $t = 0$ -Form der zeitabhängigen Überlagerung

$$\frac{\psi_1(x, t) + \psi_2(x, t)}{\sqrt{2}} \quad (22)$$

handelt. Somit erhält man folgende Gesamtwellenfunktion:

$$\psi(x, t) = \left( u_1(x) e^{\left(-\frac{iE_1 t}{\hbar}\right)} + u_2(x) e^{\left(-\frac{iE_2 t}{\hbar}\right)} \right) / \sqrt{2} \quad (23)$$

[1]

so dass

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} \left( u_1^2(x) + u_2^2(x) + u_1(x) u_2(x) e^{\frac{i}{\hbar}(E_1 - E_2)t} + u_1(x) u_2(x) e^{\frac{i}{\hbar}(E_2 - E_1)t} \right) \quad (24)$$

[1]

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{u_1^2(x)}{2} + \frac{u_2^2(x)}{2} + u_1(x) u_2(x) \cos \left( \frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar} \right) \quad (25)$$

[1]

### Aufgabe 3 (5 Punkte)

Ein Wasserstoffatom befindet sich im Grundzustand

$$\phi_{100}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \quad (26)$$

- a) Berechnen Sie den wahrscheinlichsten Wert von  $r$  im Grundzustand, wobei  $a_0 = 0.52 \text{ \AA}$  der Bohrsche Radius des Wasserstoffatoms ist.

#### Lösung:

Der wahrscheinlichste Wert von  $r$  ist derjenige, wo die Verteilung von  $r$  ihr Maximum hat. Die Verteilung von  $r$  aber ist nun nicht einfach gegeben durch  $|\psi(r)|^2$ , sondern man muss das Volumenelement berücksichtigen. Genauer: Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen innerhalb einer Kugel mit dem Radius  $r$  um den Ursprung zu finden, ist gegeben durch das Integral

$$W(r) = \int_0^r dr' \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi r'^2 \sin(\theta) |\psi(r')|^2 = 4\pi \int_0^r dr' r'^2 |\psi(r')|^2 \quad (27)$$

[1]

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung von  $r$  (also die Wahrscheinlichkeitsdichte) ist die Ableitung von  $W$  nach  $r$ :

$$w(r) = \frac{d}{dr} W(r) = 4\pi r^2 |\psi(r)|^2 \quad (28)$$

Im vorliegenden Fall also

$$w(r) = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0} \quad (29)$$

[1]

Dies ist 0 für  $r = 0$ , erreicht irgendwo ein Maximum und fällt für  $r \rightarrow \infty$  wieder auf 0 ab. Die Lage des Maximums ist bestimmt durch

$$w'(r) = \frac{8}{a_0^3} r \left(1 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-2r/a_0} \stackrel{!}{=} 0 \quad (30)$$

also

$$r_{max} = a_0 \quad (31)$$

[1]

(Die andere Nullstelle der Ableitung ist das Minimum bei  $r = 0$ .)

- b) Berechnen Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im Kern eines wasserstoffähnlichen Atoms der Kernladungszahl  $Z$  und der Nukleonenzahl  $A$ , wenn sich das Atom im Grundzustand befindet. Nehmen Sie für den Kernradius die Näherungsformel  $R = 1.2 \cdot A^{1/3} \text{ fm}$  an und berücksichtigen Sie die Änderung des Bohrschen Radius von  $a_0$  zu  $a_0/Z$ .

### Lösung:

Da die Grundzustandswellenfunktion rotationssymmetrisch ist, ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im als kugelförmig angenommenen Kern mit dem Radius  $R$  durch

$$W = W(r \leq R) = \int_0^R dr 4\pi r^2 |\phi_{100}(r)|^2 = \int_0^R dr 4\pi r^2 \frac{Z^3}{\pi a_0^3} e^{-2Zr/a_0} = \frac{4Z^3}{a_0^3} \int_0^R dr r^2 e^{-2Zr/a_0} \quad (32)$$

[1]

gegeben. Das Integral lässt sich leicht mit zweimaliger partieller Integration berechnen. Allerdings hat wegen  $r \leq R \ll a_0$  der Exponentialfaktor im Integrationsintervall praktisch den konstanten Wert 1. Also in sehr guter Näherung:

$$W = \frac{4Z^3}{a_0^3} \int_0^R dr r^2 = \frac{4Z^3 R^3}{3a_0^3} \quad (33)$$

Man kann dies auch etwas einfacher erhalten, indem man von Anfang an sagt, die Wellenfunktion ist praktisch konstant über das Volumen des Kerns und dann ihren Wert bei  $r = 0$  mit dem Kernvolumen multipliziert:

$$W = \frac{4\pi}{3} R^3 |\phi_{100}(0)|^2 = \frac{4Z^3 R^3}{3a_0^3} \quad (34)$$

Mit  $R = 1.2 \cdot A^{1/3} \text{ fm}$  folgt schließlich:

$$W = \frac{4Z^3 A \cdot (1.2 \text{ fm})^3}{3a_0^3} (= 1.64 \cdot 10^{-14} \cdot Z^3 A) \quad (35)$$

[1]

#### Aufgabe 4 (8 Punkte)

Ein Elektron sei in einem Zustand mit Bahndrehimpulsvektor  $\mathbf{L}$  und Spinvektor  $\mathbf{S}$ . Diese koppeln zu einem Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{J}$ .

a) Wie ergeben sich die verschiedenen Vektoren auseinander?

**Lösung:**

$\mathbf{J}$  setzt sich aus  $\mathbf{L}$  und  $\mathbf{S}$  zusammen:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (36)$$

[1]

b) Welche möglichen Gesamtlängen haben die Vektoren? Was sind ihre möglichen Komponenten in einer gemeinsam ausgezeichneten Richtung? Verwenden Sie hierzu die nötigen Quantenzahlen! Welche Werte können diese beim Wasserstoffatom annehmen?

**Lösung:**

$$|\mathbf{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad (37)$$

$$|\mathbf{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad (38)$$

$$|\mathbf{J}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar \quad (39)$$

[1]

$$L_z = m_l \hbar \quad (40)$$

$$S_z = m_s \hbar \quad (41)$$

$$J_z = m_j \hbar \quad (42)$$

[1]

Im Wasserstoffatom können die Quantenzahlen folgende Werte annehmen:

$$l = 0, 1, \dots, n-1; \quad m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l \quad (43)$$

$$s = \frac{1}{2}; \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad (44)$$



$$j = \begin{cases} |l \pm \frac{1}{2}|, & l > 0 \\ \frac{1}{2}, & l = 0 \end{cases} ; m_j = -j, -j+1, \dots, j \quad (45)$$

[1]

- c) Berechnen Sie für die Bahndrehimpulszahl  $l = 1$  und die Spinquantenzahl  $s = \frac{1}{2}$  die Vektorlängen. Berechnen Sie den Winkel zwischen  $\mathbf{L}$  und  $\mathbf{S}$ .

### Lösung:

Für  $l = 1$ ,  $s = \frac{1}{2}$  und  $j = |l \pm s| = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$  ergeben sich die Vektorlängen zu:

$$|\mathbf{L}| = \sqrt{2}\hbar \quad (46)$$

$$|\mathbf{S}| = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \quad (47)$$

$$|\mathbf{J}| = \frac{\sqrt{15}}{2}\hbar \text{ für } j = \frac{3}{2}, \quad \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \text{ für } j = \frac{1}{2} \quad (48)$$

[1]

Der Winkel zwischen  $\mathbf{L}$  und  $\mathbf{S}$  beträgt, wie bei Vektoren üblich:

$$\cos(\alpha) = \frac{\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}}{|\mathbf{L}| |\mathbf{S}|} \quad (49)$$

[1]

Die Beträge der Vektoren sind bekannt. Das Produkt folgt aus der Quadrierung der Summe, welche natürlich  $\mathbf{J}$  ist:

$$(\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = \mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{S}^2 \quad (50)$$

Also:

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) = \frac{1}{2}\hbar^2 (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \quad (51)$$

Daraus folgt:

$$\cos(\alpha) = \frac{1}{2} \frac{(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1))}{\sqrt{l(l+1)} \cdot \sqrt{s(s+1)}} \quad (52)$$

[1]

Für  $j = \frac{3}{2}$ :

$$\cos(\alpha) = 0.408 \quad , \quad \alpha = 65.9^\circ \tag{53}$$

Für  $j = \frac{1}{2}$ :

$$\cos(\alpha) = -0.816 \quad , \quad \alpha = 144.73^\circ \tag{54}$$

[1]

### Aufgabe 5 (11 Punkte)

Man betrachte die Niveaus  $4\ ^2P_{1/2}$  und  $4\ ^2S_{1/2}$  des Kaliumatoms. Ohne äußeres Magnetfeld entspricht der Übergang  $4\ ^2P_{1/2} \rightarrow 4\ ^2S_{1/2}$  einer Wellenlänge von 766nm. Nun werde ein Magnetfeld  $B = 5\text{T}$  angelegt. Die L-S-Kopplung bleibe erhalten.

a) Berechnen Sie die Aufspaltung der beiden Niveaus im Magnetfeld.

#### Lösung:

Zuerst muss beachtet werden, dass sich der Zustand  $4\ ^2P_{1/2}$  mit

$$s = \frac{1}{2}, \quad l = 1, \quad j = \frac{1}{2} \quad (55)$$

[1]

entsprechend

$$m_j = -j, -j+1, \dots, j \quad (56)$$

in zwei Niveaus aufspaltet. Die Energieaufspaltung  $\Delta E$  ist gegeben durch die Gleichung

$$\Delta E = g_j \mu_B B \quad (57)$$

[1]

und davon  $g_j$ :

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} = \frac{2}{3} \quad (58)$$

[1]

Also ist

$$\Delta E_P = 1.94 \times 10^{-4} \text{eV} \quad (= 3.09 \times 10^{-23} \text{J}) \quad (59)$$

[1]

Für den Zustand  $4\ ^2S_{1/2}$ :

$$s = \frac{1}{2}, \quad l = 0, \quad j = \frac{1}{2} \quad (60)$$

Daher ist

$$g_j = 1 + \frac{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}}{2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}} = 2 \quad (61)$$

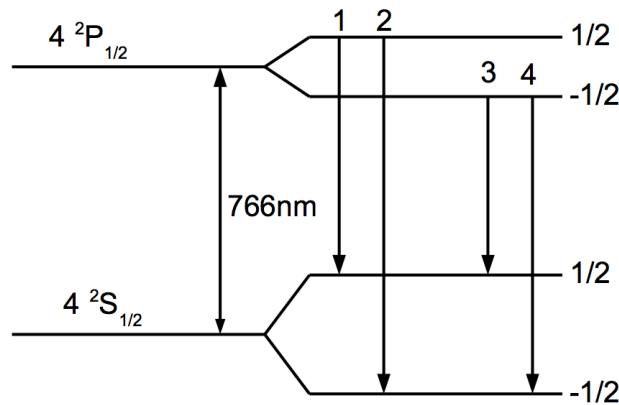
Es gibt also zwei Niveaus mit Abstand

$$\Delta E_S = 5.79 \times 10^{-4} \text{eV} \quad (= 9.26 \times 10^{-23} \text{J}) \quad (62)$$

[1]

- b) Skizzieren Sie die Energieniveaus qualitativ und zeichnen Sie die möglichen elektrischen Dipolübergänge ein.

**Lösung:**



Die Aufspaltung des  $4^2S_{1/2}$  Niveaus ist größer als die Aufspaltung des  $4^2P_{1/2}$  Niveaus.

[3]

- c) Bestimmen Sie für die einzelnen Emissionslinien die Abweichungen der beobachtbaren Frequenzen von der ursprünglichen Übergangsfrequenz (ohne Magnetfeld).

**Lösung:**

Da die Energieaufspaltung  $\Delta E_S$  größer als  $\Delta E_P$  ist erhält man 4 Emissionslinien:

$$\nu_i = \frac{E_{P_{1/2}} - E_{S_{1/2}} \pm 0.5 \cdot \Delta E_P \pm 0.5 \cdot \Delta E_S}{h} \quad (63)$$

$$\nu = \frac{E_{P_{1/2}} - E_{S_{1/2}}}{h} \Rightarrow \nu_i = \nu + \frac{\pm 0.5 \cdot \Delta E_P \pm 0.5 \cdot \Delta E_S}{h} = \nu + \Delta \nu_i \quad (64)$$

[1]

Mit  $c = 3 \times 10^8 \text{m/s}$  und  $h = 4.14 \times 10^{-15} \text{eVs}$  berechnen sich die Abweichungen  $\Delta \nu_i$  zu:

$$\Delta \nu_1 = \frac{1}{2} \frac{\Delta E_P}{h} - \frac{1}{2} \frac{\Delta E_S}{h} = \frac{1}{2h} (1.93 \times 10^{-4} - 5.79 \times 10^{-4}) \text{eV} = -4.66 \times 10^{10} \text{Hz} \quad (65)$$

$$\Delta\nu_2 = \frac{1}{2} \frac{\Delta E_p}{h} + \frac{1}{2} \frac{\Delta E_s}{h} = \frac{1}{2h} (1.93 \times 10^{-4} + 5.79 \times 10^{-4}) \text{eV} = 9.32 \times 10^{10} \text{Hz} \quad (66)$$

$$\Delta\nu_3 = -\frac{1}{2} \frac{\Delta E_p}{h} - \frac{1}{2} \frac{\Delta E_s}{h} = -9.32 \times 10^{10} \text{Hz} \quad (67)$$

$$\Delta\nu_4 = -\frac{1}{2} \frac{\Delta E_p}{h} + \frac{1}{2} \frac{\Delta E_s}{h} = 4.66 \times 10^{10} \text{Hz} \quad (68)$$

[2]

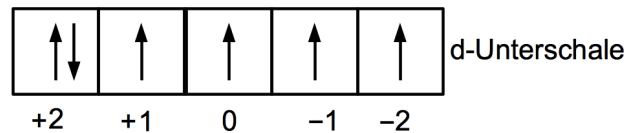
## Aufgabe 6 (7 Punkte)

Ein Atom habe die Elektronenkonfiguration  $[Ne]3s^23p^63d^64s^2$ . Leiten Sie nach den Hund'schen Regeln die spektroskopischen Symbole  $^{2S+1}L_J$  des Grundzustands des neutralen Atoms und des Grundzustands des 11-fach ionisierten Ions ab. Begründen Sie die einzelnen festgelegten Quantenzahlen nach den Hund'schen Regeln.

### Lösung:

Beim Atom mit der Elektronenkonfiguration  $[Ne]3s^23p^63d^64s^2$  handelt es sich um  $_{26}\text{Fe}$ , also Eisen. Im Grundzustand ergibt sich dann durch die Hund'schen Regeln:

- Volle Schalen und Unterschalen haben den Gesamtdrehimpuls Null, daher trägt nur die  $3d^6$ -Unterschale zum Gesamtdrehimpuls bei.
- Der Gesamtspin  $\mathbf{S}$  nimmt den maximal möglichen Wert an, die Spins der einzelnen Elektronen stehen möglichst parallel:



Also ist

$$S = 4 \times \frac{1}{2} = 2 \quad (69)$$

[1]

- Der Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{L}$  wird maximal:

$$L = 2 \cdot 2 + 1 + 0 - 1 - 2 = 2 \quad (70)$$

[1]

- Die Schale ist mehr als halbvoll, also ist der Zustand mit maximaler Gesamtdrehimpulszahl am stärksten gebunden:

$$J = L + S = 4 \quad (71)$$

[1]

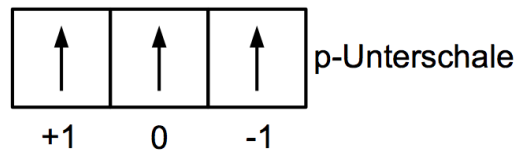
Damit ist das spektroskopische Symbol  $^{2S+1}L_J$ :

$$^5D_4 \quad (72)$$

Für das 11-fach ionisierte Ion ist die Elektronenkonfiguration  $3s^23p^3$ .

[1]

Also ergibt sich durch Anwendung der Hund'schen Regeln:



- 

$$S = 3 \times \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \quad (73)$$

[1]

- 

$$L = -1 + 0 + 1 = 0 \quad (74)$$

[1]

- Die Schale ist halbvoll:

$$J = S = \frac{3}{2} \quad (75)$$

[1]

Damit ist das spektroskopische Symbol:

$$^4S_{3/2} \quad (76)$$

## Aufgabe 7 (11 Punkte)

Bei einem CO-Molekül ist die potentielle Energie als Funktion des Abstandes  $r$  der Atomkerne durch die empirische Funktion

$$V(r) = D |1 - \exp(-\beta(r - r_0))|^2 \quad (77)$$

gegeben. Dabei ist  $D = 9.4\text{eV}$  die Dissoziationsenergie und  $r_0 = 1.128\text{\AA}$  der Gleichgewichtsabstand der Kerne  $^{12}\text{C}$  und  $^{16}\text{O}$ .

- a) Die beobachtete Frequenz für die Schwingungsanregung des Moleküls beträgt  $\nu = 6.499 \cdot 10^{13}\text{s}^{-1}$ . Berechnen Sie daraus den Wert von  $\beta$ .

**Hinweis:** Entwickeln Sie die Exponentialfunktion im Potential bis zur 1.Ordnung, so dass man das Potential eines harmonischen Oszillators erhält.

### Lösung:

Man entwickelt die Exponentialfunktion in Gleichung (77) bis zur 1.Ordnung:

$$V(r) = D |1 - \exp(-\beta(r - r_0))|^2 \approx D |1 - 1 + \beta(r - r_0) + \dots|^2 \quad (78)$$

Das Potential kann daher genähert werden durch

$$V(r) \approx D\beta^2(r - r_0)^2 \quad (79)$$

$$V(x) \approx D\beta^2 x^2 ; x := r - r_0 \quad (80)$$

[1]

Dies ist das Potential eines harmonischen Oszillators. Die Lösung ist folglich analog zum harmonischen Oszillator, wo

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (81)$$

[1]

Bei einem 2-atomigen Molekül muss man mit der reduzierten Masse  $\mu$  rechnen. Ein Vergleich mit der Gleichung (81) zeigt:

$$\frac{1}{2}\mu\omega^2 = D\beta^2 ; \omega = 2\pi\nu \quad (82)$$

$$\beta = \omega \sqrt{\frac{\mu}{2D}} \quad (83)$$

[1]



Die reduzierte Masse ist gegeben durch:

$$\mu = \frac{m_C m_O}{m_C + m_O} = \frac{12 \cdot 16}{12 + 16} m_n \approx 6.86 m_n \quad (84)$$

Mit  $m_n = 1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$  und  $\omega = 2\pi\nu = 4.1 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$  ist  $\beta$  also:

$$\beta = 2.53 \times 10^{-10} \text{ m}^{-1} \quad (85)$$

[2]

- b) Skizzieren Sie qualitativ die Energieniveaus der Zustände mit  $n_1=0$ ;  $l_1=0,1,2$  und  $n_2=1$ ;  $l_2=0,1,2$ , wobei  $n_{1/2}$  den Schwingungszustand und  $l_{1/2}$  den Rotationszustand angibt. Skizzieren Sie anschließend die erlaubten Rotationsschwingungsübergänge und berechnen Sie deren Frequenzen. Beachten Sie dabei, dass das Molekül nur um eine Achse senkrecht zur Molekülachse rotiert.

### Lösung:

Die Rotationsbedingung ist allgemein gegeben durch:

$$E_{rot} = \frac{1}{2} I \omega^2 \quad (86)$$

Für ein 2-atomiges Molekül mit Trägheitsmoment

$$I = \mu r_0^2 = 1.46 \times 10^{-46} \text{ kg m}^2 \quad (87)$$

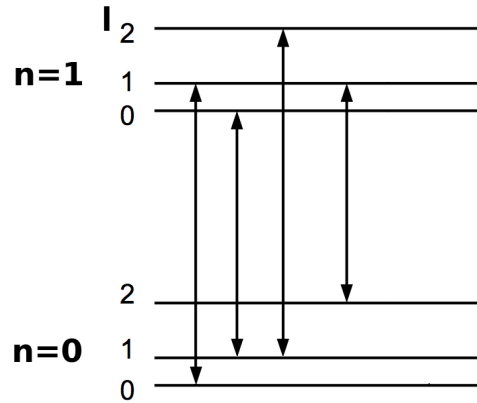
[1]

wird dies zu:

$$E_{rot} = \frac{\mathbf{L}^2}{2I} = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) = 4.76 \cdot 10^{-4} \cdot l(l+1) \text{ eV} \quad (88)$$

[1]

Die erlaubten Übergänge sind  $\Delta n = \pm 1, \Delta l = \pm 1$ :



[2]

Die Energiedifferenz  $\Delta E_S$  zwischen den beiden Schwingungszuständen  $n=0,1$  beträgt:

$$\Delta E_S = \nu h = 0.2688 \text{ eV} \quad (89)$$

Für den Übergang von  $n_1 = 1, l_1 \rightarrow n_2 = 0, l_2$  gilt:

$$\Delta E_{l_1, l_2} = \Delta E_S + E_{rot}(l_1) - E_{rot}(l_2) \quad (90)$$

$$\nu_{l_1, l_2} = \frac{\Delta E_{l_1, l_2}}{h} \quad (91)$$

Die Frequenzen der Rotationsschwingungsübergänge ergeben sich somit zu:

$$\nu_{0,1} = \frac{0.2688 \text{ eV} - 2 \cdot 4.76 \cdot 10^{-4} \text{ eV}}{h} = 6.477 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1} \quad (92)$$

$$\nu_{1,0} = \frac{0.2688 \text{ eV} + 2 \cdot 4.76 \cdot 10^{-4} \text{ eV}}{h} = 6.523 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1} \quad (93)$$

$$\nu_{1,2} = \frac{0.2688 \text{ eV} + 2 \cdot 4.76 \cdot 10^{-4} \text{ eV} - 6 \cdot 4.76 \cdot 10^{-4} \text{ eV}}{h} = 6.454 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1} \quad (94)$$

$$\nu_{2,1} = \frac{0.2688 \text{ eV} + 6 \cdot 4.76 \cdot 10^{-4} \text{ eV} - 2 \cdot 4.76 \cdot 10^{-4} \text{ eV}}{h} = 6.546 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1} \quad (95)$$

[2]