

# 11. Übung zur Vorlesung Atom- und Molekülphysik (E4) SS2021

Prof. H. Weinfurter, Dr. L. Knips

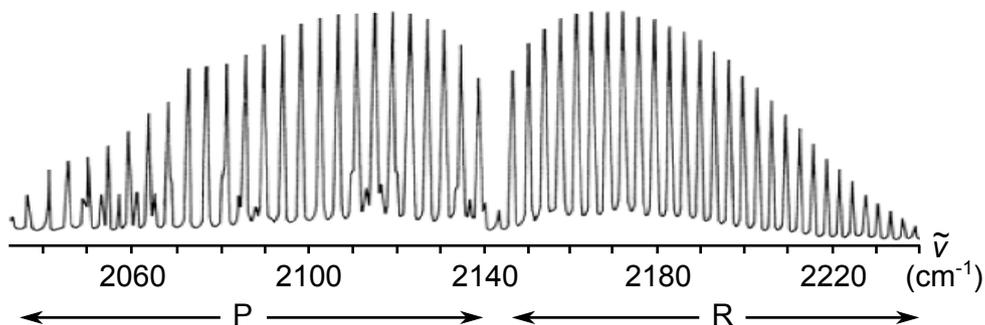
## Aufgabe 35 (optional für E4p) Vibrations- und Rotationspektrum vom CO-Molekül

In dieser Aufgabe soll die Struktur der Rotation und Vibration in zweiatomigen Molekülen am Beispiel von Kohlenmonoxid untersucht werden. Das CO-Molekül besteht aus einem Kohlenstoff- und einem Sauerstoffatom mit einer Bindungslänge von  $R_0 = 1.13 \cdot 10^{-10}$  m.

- Für kleine Streckungen und Stauchungen des Moleküls entlang der Verbindungsachse kann das Bindungspotential als harmonisch mit einer Federkonstante  $D = 1910$  N/m angenommen werden. Berechnen Sie die Frequenz der quantisierten Streck-Schwingung. Welches Spektrum (Übergangsfrequenzen zwischen verschiedenen Zuständen) kann man erwarten?
- Der klassische Ausdruck für die Rotationsenergie ist  $E_{\text{rot}} = \frac{1}{2I} K^2$ , wobei  $I$  das Trägheitsmoment und  $K$  der Drehimpuls ist. Berechnen Sie das Trägheitsmoment  $I$  des Moleküls für eine Rotation senkrecht zur Verbindungsachse. Welche Energien und welches Spektrum erwartet man für die quantisierte Rotation?
- Vergleichen Sie die Energieskalen für die Vibration und die Rotation. In welchem Wellenlängenbereich liegen die jeweiligen Übergänge?
- Welcher Rotationszustand  $k$  ist bei Raumtemperatur am stärksten besetzt?  
*Hinweis:* beachten Sie die Multiplizität/Entartung der Rotationszustände!

Betrachten Sie das unten abgebildete Absorptionsspektrum vom Kohlenmonoxid-Gas bei Raumtemperatur. Gezeigt sind Übergänge zwischen verschiedenen Rotationszuständen um den Vibrationsübergang  $\nu = 0 \rightarrow \nu = 1$  innerhalb des elektronischen Grundzustandes. Die fehlende Linie bei  $\tilde{\nu} = 2143 \text{ cm}^{-1}$  entspricht dem Rotationsübergang  $k = 0 \rightarrow k = 0$ .

- Wie, und mit welcher Information aus dem Spektrum können Sie die Federkonstante  $D$  des Moleküls berechnen?
- Ordnen Sie die Linien auf der Seite der höheren Energie („R-Zweig“) und auf der niederenergetischen Seite („P-Zweig“) den Rotationsübergängen zu.
- Wie kommen die unterschiedlichen Stärken der Linien zustande?  
*Hinweis:* argumentieren Sie basierend auf anderen Ergebnissen aus dieser Aufgabe!



### Aufgabe 36 (optional für E4p)      Zentrifugal-Aufweitung

Bei einem rotierenden zweiatomigen Molekül stellt sich der Kernabstand  $R$  so ein, dass die rücktreibende Kraft  $F_r(R)$  durch das Potential  $E_{\text{pot}}$  gleich der Zentripetalkraft  $F_z(R) = -\mu\omega^2 R$  wird. In der Nähe des Gleichgewichtabstandes  $R_e$  kann das Potential in guter Näherung durch ein Parabelpotential angenähert werden, was zu einer linearen Rückstellkraft  $F_r(R) = -D(R - R_e)$  führt.

- a) Zeigen Sie, dass der Kernabstand durch die Rotation des Moleküls aufgeweitet wird, d.h. dass die Relation

$$R - R_e = \frac{k(k+1)\hbar^2}{\mu D R^3}$$

gilt, wobei  $\mu$  die reduzierte Masse und  $D$  die Federkonstante ist.

- b) Durch die Aufweitung des Kernabstands tritt zusätzlich zur kinetischen Energie des starren Rotators noch die potentielle Energie  $\frac{1}{2}D(R - R_e)^2$  auf. Zeigen Sie, dass für die gesamte Rotationsenergie  $E_{\text{rot}}$  näherungsweise gilt:

$$E_{\text{rot}} = \frac{k(k+1)\hbar^2}{2\mu R_e^2} - \frac{k^2(k+1)^2\hbar^4}{2\mu^2 D R_e^6}.$$

Bei konstantem Drehimpuls bewirkt die Zentrifugalaufweitung also eine Vergrößerung des Trägheitsmoments, die Rotationsenergie wird jedoch kleiner.

### Aufgabe 37      Wasserstoff-ähnliche Systeme

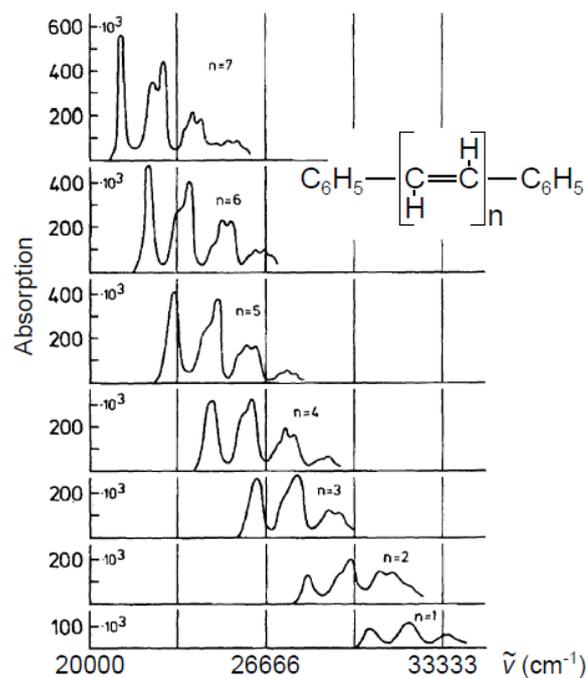
Als wasserstoff-ähnlich kann man alle Systeme bezeichnen, bei denen sich ein geladenes Teilchen im Coulombpotential eines anderen, entgegengesetzt geladenen Objekts befindet.

- a) Besonders ähnlich zum Wasserstoffatom sind natürlich Deuterium und Tritium, bei welchen zusätzlich zum Proton ein bzw. zwei Neutronen im Kern sind. Der Kern ist also deutlich schwerer als beim einfachen Wasserstoff. Wie wirkt sich das auf die Eigenenergien bzw. auf die emittierten Wellenlängen aus? Bestimmen Sie, um welche Faktoren sich diese Werte für Deuterium und Tritium von denen für Wasserstoff unterscheiden.
- b) Betrachten Sie myonischen Wasserstoff, bei dem das Elektron des Wasserstoffatoms durch ein Myon ( $m_\mu = 207m_e$ ) ersetzt ist. Berechnen Sie für dieses System die Energien der untersten drei Niveaus der Grobstruktur. Was für Änderungen erwarten Sie darüberhinaus gegenüber elektronischem Wasserstoff?
- c) Betrachten Sie Positronium, das aus einem Positron  $e^+$  und einem Elektron  $e^-$  besteht. Berechnen Sie für dieses System die Energien der untersten drei Niveaus der Grobstruktur. Was für Änderungen erwarten Sie darüberhinaus gegenüber elektronischem Wasserstoff?

### Aufgabe 38 Spektren von Polyen-Molekülen

Die Moleküle der im Bild gezeigten Klasse der Diphenyl-Polyene besitzen ein stark delokalisiertes  $\pi$ -Elektronensystem, das über das gesamte Molekül ausgedehnt ist. Zur Berechnung der Energieniveaus der  $\pi$ -Elektronen im Polyen-Molekül kann man in erster Näherung das Modell des eindimensionalen Kastenpotentials verwenden.

- Berechnen Sie die Länge des Potentialtopfs für die Polyene mit den Kettenlängen  $n = 3, 5, 7$  (Anzahl der  $\pi$ -Elektronen:  $2n$ ). Nutzen Sie dazu die jeweilige Lage der Absorption der niedrigsten Energie im entsprechenden Spektrum.
- Die Unterstruktur der Spektren entsteht durch zusätzliche Vibrationsübergänge. Woran kann man die Vibrationsfrequenz ablesen? Bestimmen Sie für  $n = 1$  die Vibrationsfrequenz  $\omega$  und die Federkonstante  $D$  der ( $C = C$ )-Bindung unter der Annahme, dass sich bei der Vibration nur die Länge dieser Bindung ändert.



*Hinweis:* In Aufgabe 11 (Blatt 4) hatten wir für die Eigenenergien des unendlich tiefen Potentialtopfes der Länge  $a$  gefunden als  $E_k = \frac{h^2 k^2}{8ma^2}$ .