

Teilaufgabe 2: HCl-Molekül

(20 Punkte)

Im HCl-Molekül haben H und Cl den Gleichgewichtsabstand $r_0 = 0,127$ nm. Die Wechselwirkungsenergie zwischen ihnen im Abstand r kann näherungsweise durch das sog. Morse-Potential

$$W_M(r) = W_D [1 - e^{-a(r-r_0)}]^2$$

beschrieben werden, wobei $W_D = 4,44$ eV die Dissoziationsenergie des Moleküls ist und $a = 1,81 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$ beträgt.

- a) Zeigen Sie, dass sich für genügend kleine Auslenkungen aus der Gleichgewichtslage ein harmonisches Wechselwirkungspotential ergibt. Berechnen Sie für diesen Fall die Kraftkonstante D und die Schwingungsfrequenz ω . Bestimmen Sie auch die Energie der Nullpunktsschwingung und die zugehörige Schwingungsamplitude. (8 Punkte)
(Ersatzlösungen: $D = 500 \text{ N/m}$; $\omega = 5 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$).
- b) Nehmen Sie nun das Molekül zunächst als starr an und betrachten Sie seine Rotationen um eine Achse senkrecht zur Verbindungsachse der Atome und durch den molekularen Schwerpunkt. Bestimmen Sie für diesen Fall die ersten 3 Anregungsniveaus dieser Rotationen. Berechnen Sie für das 1. Anregungsniveau auch die Rotationsfrequenz. (6 Punkte)
- c) Wie in a) berechnet, ist das Molekül natürlich nicht starr. Aufgrund der Zentrifugalkraft bei der Rotation ändert sich der Atomabstand bei der Rotation. Berechnen Sie zunächst diese Änderung und benutzen Sie diese, um die zugehörige Energieänderung des 1. Anregungszustands der Rotation zu ermitteln. (6 Punkte)

Fortsetzung nächste Seite!

Themenschwerpunkt A:
Atom- und Molekülphysik

Aufgabe 1: Spektrallinien im Magnetfeld

Die H_α -Linie der Balmer-Serie im Wasserstoffatom ist der Übergang von $n = 3 \rightarrow n = 2$.

- a) Berechnen Sie die Energie und die zugehörige Wellenlänge dieses Übergangs im Bohrschen Atommodell ohne externe Einflüsse. Begründen Sie, warum gerade dieser Übergang des Wasserstoffs als einer der ersten beobachtet wurde. (3 Punkte)

Nun wird ein schwaches äußeres Magnetfeld in z-Richtung angelegt. Die potentielle Energie E_{pot} eines Atoms in einem solchen Magnetfeld ist gegeben durch das Produkt seines magnetischen Moments μ mit der magnetischen Feldstärke $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, d. h. $E_{pot} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\mu_z B$ (wobei μ_z die z-Komponente des magnetischen Moments des Atoms ist). Im Wasserstoff-Atom erzeugt u. a. die Bahnbewegung des Elektrons ein magnetisches Moment $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_l$, das proportional zum Bahndrehimpuls \mathbf{L} des Elektrons ist

$$\boldsymbol{\mu}_l = -\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L} \quad (\text{mit } \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \text{ Bohrsches Magneton}).$$

- b) Begründen Sie, in wie viele unterschiedliche Energieniveaus die Bohrschen Niveaus $n = 3$ und $n = 2$ in einem Magnetfeld aufgrund des Bahndrehimpulses aufspalten. Berechnen Sie für ein Magnetfeld der Stärke $B = 0,1 \text{ T}$ den Energieabstand benachbarter Energien eines Bohrschen Niveaus (in eV). (Hinweis: Zeeman-Effekt.) (3 Punkte)
- c) Geben Sie an, wie viele Übergänge mit unterschiedlicher Energie Sie demnach für die ursprüngliche H_α -Linie in einem schwachen Magnetfeld erwarten. Ordnen Sie jedem Übergang außerdem die Polarisationen zu, die Sie bei einer Emission entlang des B-Feldes beobachten können. (Hinweis: Beachten Sie die Auswahlregeln.) (4 Punkte)

Bei genauerer Betrachtung spaltet die H_α -Linie auch ohne Magnetfeld in eine Feinstruktur auf. U. a. unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung ($\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$) besteht das obere Niveau ($n = 3$) eigentlich aus den Niveaus $3s_{1/2}$, $3p_{1/2}$, $3p_{3/2}$, $3d_{3/2}$, $3d_{5/2}$ und das untere Niveau ($n = 2$) aus den Niveaus $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$.

- d) Zeichnen Sie in einem Energiediagramm qualitativ das Termschema der genannten Feinstruktur-niveaus. Begründen Sie, wie viele energetisch verschiedene Übergänge Sie aufgrund der Feinstrukturaufspaltung erwarten. (5 Punkte)

Fortsetzung nächste Seite!

Mit dem Elektronenspin \mathbf{S} ist ebenfalls ein magnetisches Moment $\boldsymbol{\mu}_s$ verbunden, sodass insgesamt das magnetische Moment gegeben ist durch

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_l + \boldsymbol{\mu}_s = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + g_s \cdot \mathbf{S}),$$

wobei $g_s \approx 2$ der Spin-Landé-Faktor des Elektrons ist. Bei Anlegen eines Magnetfelds (schwach gegenüber der $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ - Kopplung) spalten die Energieniveaus der Feinstruktur wiederum auf (anomaler Zeeman-Effekt). Die zusätzliche Energie im Magnetfeld kann berechnet werden zu

$$E = - \langle \mu_z \rangle B = m_j g_j \mu_B B,$$

wobei m_j die Quantenzahl der z - Komponente des Gesamtdrehimpulses $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ ist und der Gesamtdrehimpuls-Landé-Faktor gegeben ist durch

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

Betrachten Sie nun nur den Übergang $3p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$.

- e) Erläutern Sie, in wie viele Übergänge dieser anhand des anomalen Zeeman-Effekts aufspaltet und wie viele davon erlaubt sind. (3 Punkte)
- f) Berechnen Sie für ein Magnetfeld der Stärke $B = 0,01 \text{ T}$ den Abstand benachbarter Energieniveaus im $3s_{1/2}$ - und $3p_{3/2}$ -Niveau. (2 Punkte)

Fortsetzung nächste Seite!