

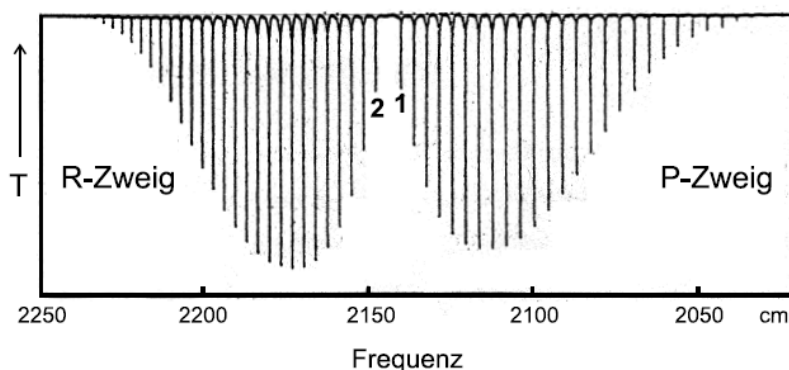
Klausurübungen für Examenskandidaten (experimentelle Physik, Lehramt vertieft)
Prof. Dr. Bert Hecht

Ausgegeben am 22.05.2007, Übungen jeweils Dienstag um 10:15 in SR 7
Übungsblätter und Vorlesungsfolien im Internet: www.nanoscale-optics.de → teaching
Für Rückfragen: hecht@physik.uni-wuerzburg.de, Zimmer B 032, Tel. 888-5863

Blatt 5: Molekülphysik

Aufgabe 9 (gestellt im Herbst 1999): Infrarotspektrum von Kohlenmonoxid (30 Punkte)

Im Rotations-Schwingungsspektrum ($E_{\text{rot}} = BJ(J+1)$ mit $B = \frac{h^2}{2I}$, $E_{\text{vib}} = h\omega(v + \frac{1}{2})$) misst man bei 300 K die abgebildete Transmission (T) einer $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ -Probe als Funktion der Frequenz (hier: $\frac{\nu}{c}$ in cm^{-1}):



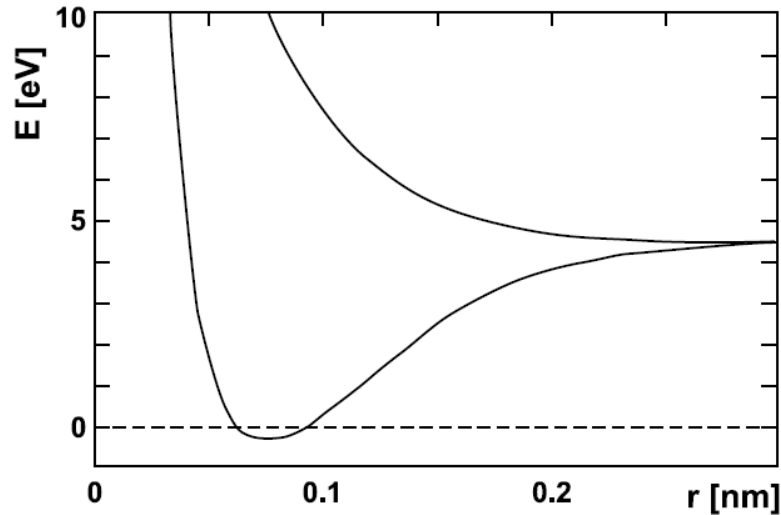
Die gekennzeichneten Peaks liegen bei: (1) 2140 cm^{-1} und (2) 2147 cm^{-1} .

- Geben Sie ein Energieniveauschema an, in dem je 2 Übergänge aus dem P- und R-Zweig des abgebildeten Spektrums mit den Quantenzahlen für Grundzustand und angeregten Zustand eingezeichnet sind. (3 Punkte)
- Wie lauten die Auswahlregeln, die dieses Spektrum erzeugen? (2 Punkte)
- Nehmen Sie zunächst an, dass B für $v = 0$ und $v = 1$ den gleichen Wert hat. Bei welcher Frequenz (in cm^{-1}) würde man den Übergang einer reinen Schwingungsanregung aus dem Grundzustand erwarten? (4 Punkte)
- Welche Frequenz (in cm^{-1}) hätte diese Anregung für das Molekül $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$? (3 Punkte)
- Wie groß ist der C-O-Abstand, berechnet aus den Positionen der Peaks (1) und (2)? (5 Punkte)
- Wodurch wird qualitativ die Intensitätsverteilung im P- und R-Zweig bestimmt? (6 Punkte)
- Warum ist der Abstand der Peaks bei 2175 cm^{-1} kleiner als der von den Peaks um 2100 cm^{-1} ? Berechnen Sie dazu die Energien für die Übergänge ($v = 0, J - 1$) \rightarrow ($v = 1, J$) und ($v = 0, J$) \rightarrow ($v = 1, J - 1$). (4 Punkte)
Hinweis: Beachten Sie, dass B für $v = 0$ und $v = 1$ unterschiedliche Werte annimmt!
- Würde man für Stickstoff ein ähnliches Infrarotspektrum erwarten (Grund)? (3 Punkte)

Aufgabe 10 (gestellt im Herbst 1997): Zwei H-Atome → H₂-Molekül

(20 Punkte)

In dem Diagramm rechts sind die Potentialkurven des H₂-Moleküls im elektronischen Grundzustand dargestellt, d. h. die potentielle Energie E der beiden Zustände als Funktion des Kernabstands r .



- 2.1 Geben Sie den Gesamtspin und die Multiplizität der beiden Zustände an, zu denen die Potentialkurven gehören. (3 Punkte)
- 2.2 Warum ist der Strahlungsübergang durch Dipolstrahlung zwischen den beiden gezeigten Potentialkurven nicht erlaubt? (1 Punkt)
- 2.3 Welches Prinzip gilt für die Übergänge zwischen Rotations-Schwingungs-Niveaus in verschiedenen elektronischen Zuständen von Molekülen? Was ist die anschauliche Bedeutung dieses Prinzips? (2 Punkte)

Die oben gefragten Auswahlregeln gelten nicht für eine Anregung durch Elektronenstoß, wohl gilt aber (näherungsweise) die Franck-Condon-Regel.

- 2.4 Schildern Sie die ablaufenden Prozesse, wenn ein Wasserstoffmolekül im Grundzustand durch Elektronenstoß in die obere der beiden Potentialkurven angeregt wird und das Molekül nicht mit anderen Teilchen wechselwirken kann. Wie groß ist die dabei frei werdende Energie und in welche Form wird sie umgewandelt? (5 Punkte)
- 2.5 Das Tal der unteren Potentialkurve soll durch folgenden Parabelansatz angenähert werden:

$$E = \frac{1}{2}k(r - r_0)^2 \quad \text{mit} \quad k = 573 \frac{\text{J}}{\text{m}^2} .$$

Geben Sie die Formel zur Berechnung der Vibrationsenergien an (harmonischer Oszillator) und berechnen Sie die Energien in eV für die Schwingungsquantenzahlen $v = 0$, $v = 1$ und $v = 2$. (5 Punkte)

- 2.6 Tragen Sie in der zugehörigen Potentialkurve die Lage dieser Vibrationsniveaus ein und skizzieren Sie die Rotationsniveaus, charakterisiert durch die Quantenzahl J . Wie ist der Energienullpunkt der Abbildung gewählt? (3 Punkte)
- 2.7 Entnehmen Sie dem Diagramm die Dissoziationsenergie D für Wasserstoff. (1 Punkt)