

E4 - Atomphysik Übungsblatt No. 11

Prof. Immanuel Bloch

Sommersemester 2010
Abgabe Montag 12. Juli

11.1 Schwingung und Rotation von Molekülen.

- Deuterium (D oder ${}^2_1\text{H}$) hat eine etwa doppelt so große Masse wie das Wasserstoffatom. Welches der beiden Moleküle H_2 und HD hat eine größere Nullpunktsenergie? Wie wird dadurch die Bindungsenergie der Moleküle beeinflusst?
- Berechnen Sie die Energien ($E \neq 0$) der vier niedrigsten Rotationsniveaus der H_2 und D_2 Moleküle. Beachten Sie, dass der interatomare Abstand in H_2 $7,42 \cdot 10^{-11}$ m beträgt.
- Gehen Sie davon aus, dass sich das H_2 Molekül wie ein harmonischer Oszillator mit einer Kraftkonstanten von 573 Nm^{-1} verhält. Berechnen Sie die Energien des Grundzustands und des ersten angeregten Schwingungszustands. Vergleichen Sie das Ergebnis mit der thermischen Energie bei Raumtemperatur.

11.2 Zentrifugalaufweitung.

Die Rotationsenergie eines zweiatomigen Moleküls ist gegeben durch

$$E_{rot} = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I}. \quad (1)$$

In der Vorlesung haben wir gesehen, dass die Rotationsenergie aufgrund der Zentrifugalaufweitung bei gleichem Drehimpuls kleiner wird. Leiten Sie unter Berücksichtigung der auftretenden Kräfte in einem rotierenden Molekül (d.h. Rückstellkraft der Potentialkurve und Zentripetalkraft) einen Ausdruck für die gesamte Rotationsenergie her.

11.3 Molekülorbitale und spektroskopische Notation

Wir betrachten ein Biatom also ein Molekül aus zwei identischen Atomen. Die Kerne haben den Abstand R voneinander. Die Molekülorbitale werden entsprechend der Heitler-London-Näherung aus Atomorbitalen $\psi_{n_i l_i \lambda_i}$ mit Hauptquantenzahlen n_i und Bahndreimpulsen \mathbf{l}_i und Projektion auf die Molekülachse $\lambda_i = |l_{iz}|$ zusammengesetzt. Die Wellenfunktion lässt sich also Linearkombination von Wellenfunktionen der Form $\psi_{n_i l_i \lambda_i}(\mathbf{r}_i \pm \mathbf{R}/2) \psi_{n_j l_j \lambda_j}(\mathbf{r}_j \mp \mathbf{R}/2)$ schreiben ($i \neq j$). \mathbf{r}_k sind dabei die Ortskoordinaten der beiden Elektronen.

- Da das Molekül symmetrisch bezüglich Inversion ($\mathbf{r}_i \mapsto -\mathbf{r}_i$) um den Molekülschwerpunkt ist, ist die Parität der Wellenfunktion eine Erhaltungsgröße und damit eine gute Quantenzahl. Zeigen Sie, dass die Heitler-London-Orbitale gegebener Parität von zwei Atomorbitalen mit gleichem n_i und l_i auch eine entsprechende Vertauschungssymmetrie besitzen, d.h. gerade orbitale sind symmetrisch, ungerade antisymmetrisch.
Hinweis: Nutzen Sie die Inversionssymmetrie der Atomorbitale
- Betrachten Sie ein Molekül aus zwei Lithiumatomen. Relevant für die Molekülbindung ist das 'Valenzelektron' des Lithiumatoms welches sich im Grundzustand im atomaren $2s$ Niveau

befindet. Geben sie die möglichen Werte der 'guten' Drehimpulsquantenzahlen $\Lambda = |L_z|$, S und $\Omega = |J_z|$ der zugehörigen Molekülorbitale an. \mathbf{L} ist der Gesamtbahndrehimpuls des Molekülorbitals, \mathbf{S} der Gesamtspin und $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ der Gesamtdrehimpuls.

- (c) Welche Parität haben die Zustände? Hinweis: betrachten sie die Vertauschungssymmetrie der Wellenfunktion mit Spin
- (d) Wie lauten die 'bindenden' und 'antibindenden' Zustände in der spektroskopischen Kurznotation
Hinweis: da die Elektronen auf den inneren Schalen (wie beim Heliummolekül) im wesentlichen nicht zur Molekülbindung beitragen, ist die Situation analog zum Wasserstoffmolekül.
- (e) Der erste angeregte elektronische Zustand des Li_2 Moleküls kann durch eine Kombination von 2s und 2p Atomorbitalen approximiert werden. Was sind in diesem Fall die möglichen Werte der guten Drehimpulsquantenzahlen und deren Multiplizität? Schreiben sie die zugehörigen Molekülorbitale in spektroskopischer Notation auf.