

Moleküle und Wärmestatistik

Aufgaben

22.08.2008

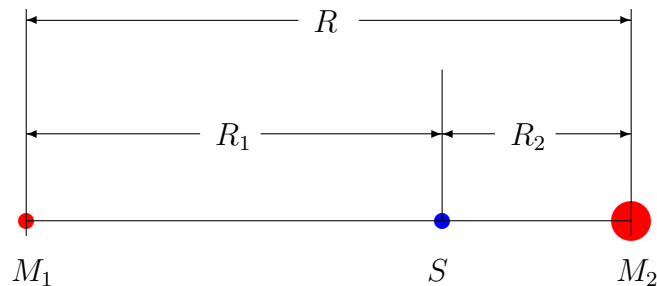
1 Molekülbindung

Ein Molekül bestehe aus zwei Atomkernen A und B und zwei Elektronen.

- Wie lautet der Ansatz für die symmetrische Wellenfunktion in der Molekülorbitalnäherung?
- Zerlegen Sie diese Wellenfunktion in einen Anteil ionischer und einen Anteil kovalenter Bindung.
- Wie ist die relative Spinstellung der Elektronen in diesem Fall? Welches Prinzip liegt dem zugrunde?

2 Molekülrotationen

In der Vorlesung haben wir die Elektronenbewegung von der Kernbewegung absepariert (Born-Oppenheimer-Näherung). Nun wollen wir die Kernbewegung näher betrachten. Zunächst soll der Abstand der beiden Kerne konstant sein. Wir betrachten nur die Rotation des Moleküls.



- Geben Sie das Trägheitsmoment des abgebildeten Moleküls an und bestimmen sie daraus die (klassische) Rotationsenergie des Moleküls.
- Bestimmen Sie aus der klassischen Rotationsenergie die quantenmechanischen Rotationsniveaus. (Ergebnis: $E_{rot} = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2MR_0^2}$)
- Bestimmen Sie dem Energieunterschied zwischen zwei benachbarten Rotationsniveaus die Wellenlänge der elektromagnetischen Strahlung, die benötigt wird um das Molekül vom Anregungszustand J in den Zustand $J + 1$ anzuheben. Geben sie diese Wellenlänge und die zugehörige Energie für das H_2 -Molekül an. (Masse eines H-Atoms: $M_H = 1,67 \cdot 10^{-27}$ kg, Gleichgewichtsabstand $R_0 = 0,742 \text{ \AA}$)

3 Molekülvibration, Molekülspektroskopie

Wir betrachten nun ein Molekül das nicht rotiert ($J=0$), aber dafür ist der Abstand R der beiden Atomkerne nicht mehr konstant. Die Kerne können also gegeneinander schwingen. Die Schrödingergleichung für die Radialbewegung lautet:

$$\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{1}{R^2} \frac{d}{dR} \left(R^2 \frac{dS}{dR} \right) - E_{pot}(R) \right] S(R) = E \cdot S(R) \quad (1)$$

Für die potentielle Energie zwischen den beiden Kernen ist das Morse-Potential eine sehr gute Näherung:

$$E_{pot}(R) = E_{diss} (1 - e^{-a(R-R_0)})^2 \quad (2)$$

Da die Lösung der Schrödingergleichung mit Morse-Potential kompliziert ist, wollen wir uns hier auf die harmonische Näherung beschränken.

- Geben Sie die Entwicklung des Morse-Potentials bis zur 2. Ordnung an, und bringen Sie es auf die Form $E_{pot}(R) \approx \frac{1}{2}k(R - R_0)^2$.
- Geben Sie die Energieeigenwerte für dieses Potential an.
- Berechnen Sie die Anregungsenergien für die harmonischen Energieniveaus fürs H_2 -Molekül (Dissoziationsenergie $E_{diss} = 4.75 \text{ eV}$, $aR_0 = 1,44$).
- Zwischen welche Vibrationsniveaus unterschiedlicher elektronischer Niveaus sind elektromagnetische Übergänge besonders wahrscheinlich?
- Erklären Sie die Funktionsweise eines Wellenlängenschiebers, wie er bei Weißmachern zum Einsatz kommt.

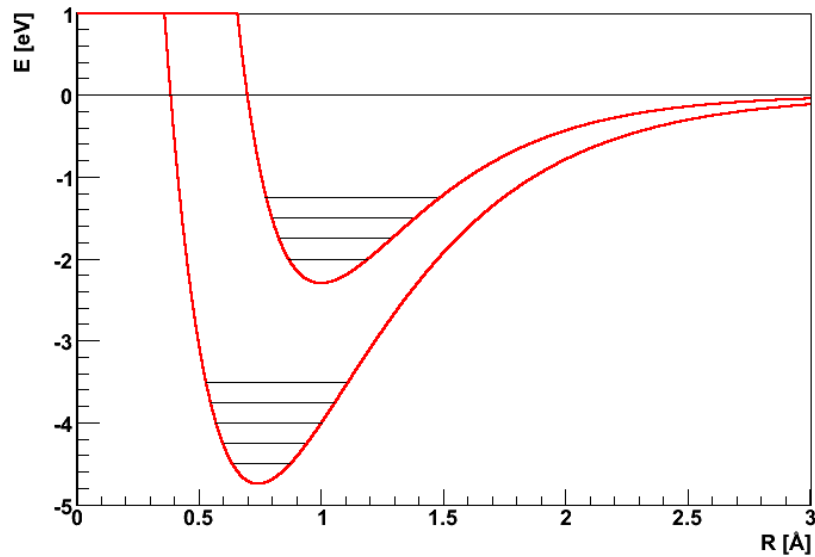


Abbildung 1: elektronische Energieniveaus (rot) mit Vibrationsanregungen (scharz)

4 Maxwell'sche Geschwindigkeitsverteilung

- a) Führen Sie die Maxwell'sche Verteilung für die Teilchenzahl pro Geschwindigkeitsintervall

$$n(v, T)dv = 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv \quad (3)$$

in eine Verteilung $n(E, T)dE$ über.

- b) Berechnen Sie die mittlere Energie $\langle E \rangle$.
(Hinweis: $\int_0^\infty x^{3/2} e^{-x} = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}$)
- c) Welcher Anteil der Teilchen hat eine Energie, die nicht mehr als $\pm 1\%$ vom Energiemittelwert abweicht?
(Hinweis: In diesem Bereich kann $n(E, T)$ als konstant angenommen werden.)