

## Vorbemerkung

Dies ist ein korrigierter Übungszettel aus dem Modul physik411.

Dieser Übungszettel wurde von einem Tutor korrigiert. *Dies bedeutet jedoch nicht, dass es sich um eine Musterlösung handelt. Weder ich, noch der Tutor implizieren, dass dieses Dokument keine Fehler enthält.*

Alle Übungszettel zu diesem Modul können auf <http://martin-ueding.de/de/university/physik411/> gefunden werden.

Sofern im Dokuments nichts anderes angegeben ist: Dieses Werk von Martin Ueding ist lizenziert unter einer [Creative Commons Namensnennung - Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International Lizenz](#).

[disclaimer]



# physik411 – Übung 7

Gruppe 2 – Florian Seidler

Martin Ueding \*

2013-06-05

Lizenz: CC-BY-SA 3.0 

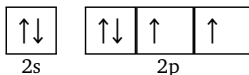
Aufgabe	1	2	3	4	
Punkte	/ 8	/ 12	/ 14	/ 0	 / 34

## 1. Hund'sche Regeln

Die Schalen werden so besetzt, dass zuerst das s-Orbital, dann das p-Orbital gefüllt wird, und dort erst die Spins  $\uparrow$  und dann  $\downarrow$  besetzt werden. Somit ergeben sich die folgenden Belegungen:

### 1a. Sauerstoff

Im Sauerstoff, das 6 Valenzelektronen hat, werden die äußeren Schalen wie folgt besetzt:



Der Gesamtdrehimpuls aus dem p-Orbital sind 4 mal  $\ell = 1$ , also ist  $L = 4$ . Der Spin ist  $S = 3 \uparrow + 1 \downarrow = 1$ . Somit ist  $J = 5$  und  $2s + 1 = 3$ . Dies ist also  ${}^3P_5$  und  $[\text{He}]2s^2 2p^4$ .

Wenn allerdings der Gesamtdrehimpuls  $L$  die Summe der  $m_\ell$  ist, dann ist  $L = 1 + 0 + (-1) + 1 = 1$ . Somit wäre der Drehimpuls  $J = 2$  und die spektroskopische Notation  ${}^3P_2$ .



### 1b. Stickstoff

Besetzung der Schalen:




Analog zum Sauerstoff, allerdings ist hier noch ein Elektron weniger auf einem  $m_\ell = 0$  Platz, also weiterhin  $l = 1$ . Somit ändert sich nur der Spin auf  $S = 3/2$ . Ich erhalte  ${}^4P_{5/2}$  und  $[\text{He}]2s^2 2p^3$ .



\*mu@uni-bonn.de

**1c. Eifel**

Welches Element soll dies sein? 

**1d. Magnetische Quantenzahl**

$m_l$  gibt die  $z$ -Komponente des Gesamtdrehimpulses an. Wenn diese entartet ist, bedeutet dies eine komplette Kugelsymmetrie.

**2. Energieskala der diatomischen Moleküle****2a. Rotationsspektrum**

Die Kraft, die zwischen den beiden Stickstoffmolekülen ist, ist deutlich komplexer, als zwischen Kern und Elektron im Wasserstoffatom. Die Molekülorbitale bilden ein  $sp$ -Hybridorbital und zwei verbleibende  $p$ -Orbitale, die dann in  $\sigma$  und  $\sigma^*$  bzw. zwei  $\pi$ -Bindungen eingehen.

Angenommen, der Drehimpuls für das ganze Molekül ist der gleiche gequantelte Drehimpuls wie für das Elektron selbst. Dann gilt:

$$E(m) = \frac{L^2}{2m}$$

Der Massenunterschied zwischen dem Wasserstoffatom und dem Stickstoffmolekül ist  $\gamma := \mu/m$ , ( $\gamma > 1$ ). Wenn die Masse um den Faktor  $\gamma$  größer wird, so wird der Drehimpuls um den Faktor  $\gamma$  kleiner. Also

$$E_{N_2} = \gamma^{-1} E_H$$

**Umrechnung der Energie** Die reduzierte Masse ist:

$$\mu = \frac{10 \text{ u} \cdot 10 \text{ u}}{20 \text{ u}} = 5 \text{ u}$$



Einsetzen der Konstanten gibt:

$$\Delta E = 1,49 \text{ meV}$$

Dies entspricht einer Frequenz von:



$$f = 0,36 \text{ THz}$$

Mit  $k = \omega/c$  und  $\omega = 2\pi f$  erhalte ich die Wellenzahl:

$$k = 75,6 \text{ rad cm}^{-1}$$

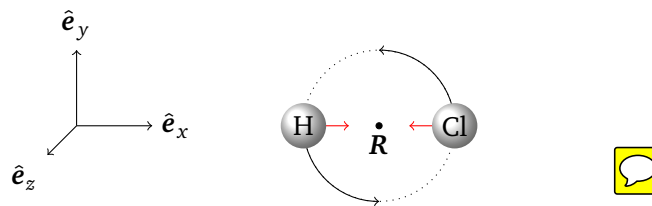


Abbildung 1: Bewegung in einer Ebene. Die anziehende Kraft (rot) hält die Bewegung in dieser Ebene.

## 2b. Schwingungsspektrum

Hier fehlen noch Inhalte.



**Umrechnung der Energie** Bis auf die **Wurzel** ist die Rechnung die gleiche, wie oben auch.

$$\Delta E = 143 \text{ meV}, \quad f = 34,5 \text{ THz}, \quad k = 7220 \text{ rad cm}^{-1}$$

## 2c. Elektronische Übergänge

Das Stickstoffatom ist vergleichbar groß mit dem Wasserstoffatom, und dort sind die Übergangsenergien einige eV. Beim Stickstoff sind die Übergangsenergien ähnlich groß. Das Stickstoffmolekül ist etwas kleiner als doppelt so groß, daher sollten die Energien auch in der gleichen Größenordnung liegen, wenn man das ganze als harmonischen Oszillator betrachtet.



## 2d. Born-Oppenheimer-Näherung

Die Born-Oppenheimer-Näherung besagt, dass wenn die Kerne langsam genug sind, sich die Elektronen instantan daran anpassen und wie in einem effektiven Potential bewegen.

Wenn das Molekül den gleichen Drehimpuls wie die einzelnen Elektronen hat, dann müssen die Kerne sich um den Faktor  $\mu$  langsamer bewegen. Der Abstand ist vergleichbar zu den Atomen, nur sind die Atomkerne um den Faktor  $\mu$  schwerer. Mit  $\mu = 9110$  kann durchaus davon ausgegangen werden, dass die Näherung erfüllt ist.



# 3. Infrarotspektroskopie eines heteronuklearen Moleküls

## 3a. Zentralpotential

Die Rotation in einem klassischen Keplerproblem muss in einer Ebene stattfinden, so wie in Abbildung 1. Falls dies nicht der Fall ist, so wie in Abbildung 2, würde die Zentralkraft die beiden Körper in die Ebene ziehen. Die Bewegung wäre nicht stabil kann daher nicht der sich einstellende Gleichgewichtszustand sein.

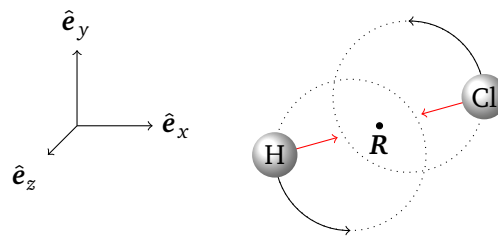


Abbildung 2: Bewegung in zwei Ebenen. Die anziehende Kraft (rot) zieht die Teilchen aus ihren Ebenen heraus. Dies ist so nicht stabil.

### 3b. Rotationspektrum



Mit der Näherung  $mr^2 \approx mr_0^2 =: I$  ist der Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2I} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 (r - r_0)^2$$

Der Abstand der Energien im Drehimpuls, also dem mittleren Term, sind für  $J$  und  $J - 1$ :

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{rot}} &= \frac{\hbar^2}{2I} (J(J+1) - (J-1)J) \\ &= \frac{\hbar^2}{2I} (J^2 + J - (J^2 - J)) \\ &= \frac{\hbar^2}{2I} 2J \\ &= \frac{\hbar^2}{I} J \end{aligned}$$

Für den Abstand zwischen  $J$  und  $J + 1$  erhalte ich anstelle von  $J$  den Faktor  $-J + 3/2$ . Macht das einen Unterschied? Der Abstand wächst linear, somit ist nur die erste Linie von der nächsten um den auf dem Aufgabenblatt gegebenen Faktor  $\hbar^2/I$  getrennt.



### 3c. Trägheitsmoment

Der Abstand von 11 Schritten ist  $260 \text{ rad cm}^{-1}$ . Somit ist der Abstand von einem Schritt zum nächsten  $\Delta k = 23 \text{ rad cm}^{-1}$ . Mit  $\Delta \omega = \Delta kc$ , sowie  $\Delta \omega \hbar = E = \hbar^2/I$  erhalte ich:

$$I = \frac{\hbar}{\Delta kc} = 1,49 \times 10^{-46} \text{ kg m}^2$$



### 3d. Bindungslänge

Aus  $I = \mu r_0^2$  und der reduzierten Masse

$$\mu^{-1} = \frac{1}{1 \text{ u}} + \frac{1}{36 \text{ u}} = 37/36 \text{ u}$$

kann ich den Bindungsradius schreiben als:

$$r_0 = \sqrt{I\mu^{-1}} = 3,04 \times 10^{-10} \text{ m}$$



Daraus folgt die Bindungslänge:

$$2r_0 = 11.5a_0$$

### 3e. Schwingungsfrequenz

Mit  $k = 2885 \text{ rad cm}^{-1}$  in der Mitte kann ich schreiben:

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{kc}{2\pi} = 13,8 \text{ THz}$$



### 3f. Isotopischer Effekt

Die höhere Linie hat leicht höhere Wellenzahlen, also auch höhere Frequenzen. Bei einer Feder gilt mit Federkonstante  $D$  und Masse  $m$ :

$$\omega = \sqrt{\frac{D}{m}}$$

Die Höhere Frequenz gehört also zu einer kleineren Masse. Damit ist die höhere, linke Linie vom Isotop  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ .



## 4. Einstein-Modell der Licht-Materie-Wechselwirkung

### 4a. QED-Prozesse

Der Term ① trägt positiv zur Bilanz bei, es ist also die Absorption. Je mehr Energie vorhanden ist, und desto mehr Atome im Grundzustand sind, desto mehr Atome werden angeregt.

Term ② hängt noch von der Energiedichte ab, jedoch von der Anzahl der angeregten Zustände. Außerdem trägt er negativ zur Bilanz bei, so dass es die stimulierte Emission ist.

Term ③ ist die spontane Emission, da hier nur die Anzahl der angeregten Zustände drin ist, und der Term negativ eingeht.



#### 4b. Einsteinkoeffizienten

Im Gleichgewichtsfall mit  $\dot{N}_a = \dot{N}_g = 0$  werden die beiden Differentialgleichungen zu einer Differentialgleichung:

$$\begin{aligned} AN_e &= B\rho (N_g - N_e) \\ \frac{A}{B} &= \rho \frac{N_g - N_e}{N_e} \\ \frac{A}{B} &= \rho \left( \frac{N_g}{N_e} - 1 \right) \\ \frac{A}{B} \frac{1}{\rho} &= \frac{N_g}{N_e} - 1 \end{aligned}$$

Da es sich um einen Zustand im thermischen Gleichgewicht handelt, kann die Verteilung auch durch die Boltzmann-Verteilung angegeben werden. Die Energiedifferenz zwischen den beiden Zuständen ist  $\Delta E = h\nu$ . [Wikipedia, 2013]

$$\begin{aligned} \frac{A}{B} \frac{1}{\rho} &= \exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1 \\ \frac{A}{B} \frac{c^3}{8\pi h\nu^3} \left( \exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1 \right) &= \exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1 \\ \frac{A}{B} \frac{c^3}{8\pi h\nu^3} &= 1 \\ \frac{A}{B} &= \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \end{aligned}$$

Dies hängt nicht mehr von der Temperatur ab.



#### Literatur

[Wikipedia, 2013] Wikipedia (2013). Einsteinkoeffizienten. <http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Einsteinkoeffizienten&oldid=117039806>.