

1. Molekül-Rotationspektren

- a) Kann beim He-Gas ein Rotationsspektrum gemessen werden? Erkläre!
- b) Wie gross ist die mittlere kinetische Energie (in Vielfachen von kT) pro Sauerstoffmolekül O_2 , wenn neben den translatorischen auch die rotatorischen Freiheitsgrade angeregt sind?
- c) Ist ein Übergang vom dritten Rotationsniveau ins erste möglich? Argumentiere!
- d) Um wieviel unterscheiden sich die Wellenlängen der Übergänge vom zweiten ins erste Rotationsniveau (reiner Rotationsübergang) beim $C^{12}O$ und beim $C^{14}O$ Molekül? Beachte, C^{12} ist das normale Kohlenstoffatom, während C^{14} ein Kohlenstoff Isotop mit zwei zusätzlichen Neutronen ist. Benutze dazu den Gleichgewichtsabstand $r_{CO} = 0.113 \text{ nm}$ sowie die molaren Massen von $M_O = 16 \text{ g/Mol}$ und $M_{C^{12}} = 12 \text{ g/Mol}$.

2. Morse-Potential

Die Bindung zwei-atomiger Moleküle kann gut durch das Morse-Potential beschrieben werden:

$$V(x) = D_e \cdot \left[1 - e^{-a(x-r_0)} \right]^2 - D_e \quad .$$

Benutze:

$$M_C = 12 \text{ g/Mol}, M_{O_2} = 16 \text{ g/Mol}, D_e = 11.226 \text{ eV}, a = 3.257 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}, r_0 = 113 \text{ pm}$$

- a) Zeige, dass r_0 der Gleichgewichtsabstand ist! Wie tief ist das Potential Minimum?
- b) Berechne $V(x)$ für $x \rightarrow \infty$.
- c) Berechne die Federkonstante des Moleküls im Gleichgewichtszustand. Mache dazu eine Taylorentwicklung des Morse-Potentials um $x = r_0$ und vergleiche mit dem harmonischen Potential.

d) Berechne die Schwingungsfrequenz des CO-Moleküls im Grundzustand.

e) Die Energieniveaus des Morse-Potentials können wie folgt berechnet werden:

$$E_{n,Morse} = E_{n,harmonisch} - \frac{[h\nu_0(n+1/2)]^2}{4D_e}. \quad \text{Bestimme die Quantenzahl } n \text{ bei welcher } E_{n,Morse} < E_{n-1,harmonisch}.$$

3. Dynamik eines Spins im äusseren Magnetfeld

Aus der Vorlesung sind zur Darstellung des Elektronenspins die Spinwellenfunktionen bekannt:

$$\psi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\psi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Analog zur Schrödingergleichung für Orstwellenfunktionen kann man die Schrödingergleichung für Spinnwellenfunktionen aufstellen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{e}{m} \vec{B} \hat{s} \psi \quad \text{mit } \hat{s} = (\hbar/2) \vec{\sigma}$$

Die stationären Lösungen sind dann durch die folgenden Eigenwertgleichungen gegeben:

$$E\psi_s = \frac{e}{m} \vec{B} \hat{s} \psi_s \quad \text{mit } \psi_s = \alpha\psi_{\uparrow} + \beta\psi_{\downarrow}$$

a) Finde für den Fall eines zeitunabhängigen Magnetfeldes in x-Richtung die Eigenzustände und Eigenwerte.

Der Spin befinde sich nun in einem Magnetfeld $\vec{B} = \vec{B}_0 + \vec{B}_s(t)$, das sich aus einem sogenannten Haltefeld in z-Richtung $\vec{B}_0 = (0, 0, B_0)$ und einem zeitveränderlichen Anteil $\vec{B}_s(t) = (B_{s,x}(t), B_{s,y}(t), 0)$ zusammen setzt. Das $\vec{B}_s(t)$ -Feld rotiere mit der sogenannten Larmorfrequenz $\omega_0 = e/m \cdot B_0 = 2/\hbar \cdot \mu_B \cdot B_0$ um die z-Achse:

$$B_{s,x}(t) = B_s \cos(\omega_0 t) \quad \text{und} \quad B_{s,y}(t) = B_s \sin(\omega_0 t).$$

Zum Zeitpunkt $t = 0$ sei $\psi(0) = \psi_{\uparrow}$.

- b) Löse die zeitabhängige Schrödingergleichung für die Spinwellenfunktionen und berechne die Zeitentwicklung der Erwartungswerte $\langle \hat{s}_x \rangle$, $\langle \hat{s}_y \rangle$ und $\langle \hat{s}_z \rangle$. Skizziere das Ergebnis.

Hinweis: Benutze den Ansatz

$$\psi(t) = a(t)e^{-i\omega_0 t/2}\psi_\uparrow + b(t)e^{+i\omega_0 t/2}\psi_\downarrow$$

- c) Wenn der Spin im Magnetfeld zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand ψ_\uparrow ist, nach welcher Zeit ist er dann im Zustand ψ_\downarrow ?