

Übungsblatt Nr. 6

Aufgabe 1: Rotation in einer Ebene

Die Schrödinger-Gleichung für die Rotation eines Teilchens in einer Ebene lautet (in Polarkoordinaten) wie folgt:

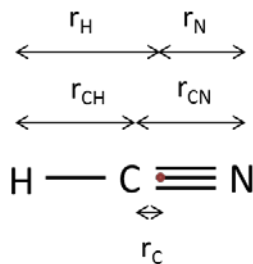
$$-\frac{\hbar^2}{2 m r^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} = E \Psi$$

- Welcher Typ von mathematischer Funktion erfüllt (ganz allgemein) eine Differentialgleichung zweiter Ordnung?
- Berechnen Sie den Eigenwert E der Funktion $\Psi_1 = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \cdot e^{i\phi}$

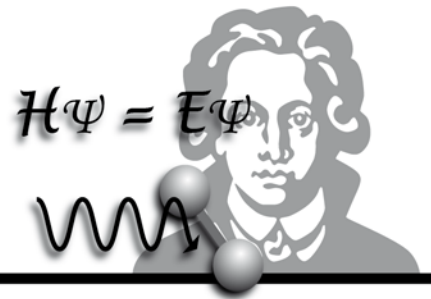
Aufgabe 2: Trägheitsmoment

Berechnen Sie das Trägheitsmoment vom linearen dreiatomigen Molekül H-C≡N mit den Bindungslängen 0,1063 nm für CH und 0,1155 nm für CN unter der Verwendung der relativen Atommassen H = 1 u, C = 12 u und N = 14 u.

Verwenden Sie für den Schwerpunkt: $r_H \cdot m_H + r_C \cdot m_C = r_N \cdot m_N$



• = Schwerpunkt



Übungsblatt Nr. 6

Aufgabe 3: Energieniveaus der Rotation

Die Rotationskonstante B eines Moleküls ist abhängig von seinem Trägheitsmoment I um die Rotationsachse.

$$B = \frac{\hbar}{4 \pi c I}$$

Unter Verwendung der Rotationskonstante können die Energieniveaus der Rotation nach folgender Formel berechnet werden:

$$E_J = h c B J (J + 1) \quad , \text{ wobei } J \text{ die Rotationsquantenzahl darstellt}$$

- Berechnen Sie für ein Molekül mit einem Trägheitsmoment von $B = 0,5 \text{ cm}^{-1}$ die Lage der Energieniveaus $J = 0$ bis $J = 3$.
- Skizzieren Sie diese Energieniveaus in einem Energiediagramm und zeichnen Sie (unter Vernachlässigung der Entartungsgrade) alle möglichen Übergänge ein für die gilt:

$$\Delta J = \pm 1$$

- Bei welchen dieser Übergänge handelt es sich um eine Absorption und bei welchen Wellenzahlen können diese Absorptionen im Spektrum beobachtet werden? Skizzieren Sie das Spektrum.