

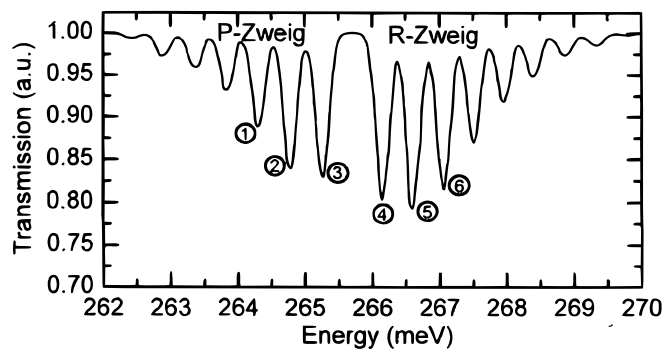
Aufgabe 2: Rotations-Vibrations-Spektroskopie von Kohlenmonoxid (20 Punkte)

Das Bindungspotential $V(R)$ des zweiatomigen Moleküls CO kann als Funktion des Kernabstands R näherungsweise in Form eines Morse-Potentials beschrieben werden:

$$V(R) = D_e \left[1 - e^{-a(R-R_e)} \right]^2$$

- a) Skizzieren Sie $V(R)$ qualitativ und tragen Sie die Größen R_e und D_e in Ihre Skizze ein. (2 Punkte)
- b) Nähern Sie das Bindungspotential quadratisch um sein Minimum und zeigen Sie, dass für die klassische Kreisfrequenz der Vibrationsbewegung $\omega_{\text{vib}} = \sqrt{2a^2 D_e / m_r}$ gilt, wobei m_r die reduzierte Masse bezeichnet. (3 Punkte)
- c) Geben Sie den quantenmechanischen Ausdruck für die Schwingungsenergie E_{vib} als Funktion einer Vibrationsquantenzahl v an. Nehmen Sie $D_e = 11,22 \text{ eV}$ und $a = 2,24 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$ an und berechnen Sie damit die Energie, die zur Dissoziation des Moleküls im Vibrationsgrundzustand nötig ist. (4 Punkte)
- d) Geben Sie qualitativ an, wie sich der mittlere Kernabstand sowie die Quantisierungsenergie der Vibrationszustände mit zunehmender Quantenzahl v im anharmonischen Morse-Potential ändern. (1 Punkt)
- e) Neben der Vibration kann das Molekül auch eine Rotationsbewegung ausführen. Betrachten Sie das Molekül zunächst als starren Rotator und drücken Sie die Rotationsenergie in klassischer Näherung als Funktion des Bahndrehimpulses L und des Trägheitsmoments Θ aus. Zeigen Sie durch Ersetzen von L durch den zugehörigen quantenmechanischen Operator, dass die Rotationsenergie von der Drehimpulsquantenzahl J wie folgt abhängt:
- $$E_{\text{rot}} = BJ(J+1), \text{ wobei } B = \hbar^2 / (2\Theta) \quad (2 \text{ Punkte})$$
- f) Geben Sie an, welche Auswahlregeln bezüglich J für reine Rotationsübergänge gelten und begründen Sie diese kurz physikalisch. (2 Punkte)
- g) Skizzieren Sie für die beiden Vibrationsniveaus $v = 0$ und $v' = 1$ jeweils die vier niedrigsten Rotationszustände und zeichnen Sie alle erlaubten Rotations-Schwingungs-Übergänge für Lichtabsorption ($\Delta v = +1$) ein. Ordnen Sie die nummerierten Linien des untenstehenden experimentell gemessenen Absorptionsspektrums von CO den von Ihnen gezeichneten Übergängen zu. (4 Punkte)

Fortsetzung nächste Seite!



- h) Geben Sie einen physikalischen Grund an, weshalb die diskreten Rotations-Schwingungs-Übergänge in obiger Abbildung nicht exakt äquidistant sind, und erläutern Sie diesen kurz. (2 Punkte)