1. **Der starre Rotator:** In vielen Fällen kann ein mehratomiges Molekül als starrer Körper mit dem **Trägheitsmoment *I*** betrachtet werden.

a) Drücken Sie die **klassische Rotationsenergie E_{Rot}** eines mit der **Winkelgeschwinwigkeit** ω um eine **fixe Achse *A*** rotierenden Moleküls als Funktion des Drehimpulses aus.

b) Stellen Sie den kinetischen Energieoperator der Rotationsenergie H_{Rot} mit Hilfe des **Impulsoperators** $P = -i \cdot \hbar \cdot \vec{\nabla}$ dar und geben Sie H_{Rot} explizit in Kugelkoordinaten an.

2. **Rotationsenergien eines starren Moleküls:** Der **Hamiltonoperator eines starren Rotators** lautet $H_{Rot} = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot I_A} \cdot \Delta = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot I_A} \cdot \left[\frac{1}{\sin\vartheta} \cdot \frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]$, die Eigenwertgleichung $H_{Rot}\psi = E_{Rot}\psi$ mit E_{Rot} als **quantenmechanisch erlaubte Rotationsenergien**. I_A ist das Trägheitsmoment des starren Rotators bezogen auf eine Achse *A*.

a) Zeigen Sie mit Hilfe des **Separationsansatzes** $\psi(\vartheta,\varphi) = \Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\varphi)$, dass sich die Eigenwertgleichung in einen nur von φ und einen nur von ϑ abhängigen Teil aufspalten lässt. Lösen Sie die Differentialgleichung für $\Phi(\varphi)$. Welche **Randbedingungen** müssen für eine **physikalisch sinnvolle** Lösung gelten?

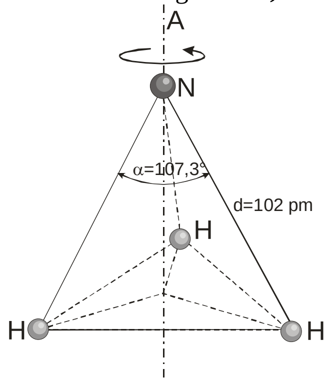
b) Nach durchgeführter Separation ergibt sie für $\Theta(\vartheta)$ die folgende Differentialgleichungleichung: $\frac{1}{\sin\vartheta} \cdot \frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta \frac{d\Theta(\vartheta)}{d\vartheta} \right) + \left(C - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta} \right) \cdot \Theta(\vartheta) = 0$, $C = \frac{2 \cdot I_A \cdot E_{Rot}}{\hbar^2}$ Dies ist die sogenannte **Legendre'sche Differentialgleichung**, welche die Lösungsfunktionen $\Theta_{lm}(\vartheta) = P_l^{|m|}(\cos\vartheta)$ besitzt. Die $P_l^m(x)$ sind wie folgt definiert: $P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \cdot \frac{d^m}{dx^m} \cdot P_l(x), P_l(x) = \frac{1}{2^l \cdot l!} \cdot \frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l$; $x \equiv \cos\vartheta$. **Welche Werte kann *m* gemäss dieser Definition annehmen?** Berechnen Sie explizit $\Theta_{0m}(\vartheta)$ bis $\Theta_{2m}(\vartheta)$, verifizieren Sie diese Funktionen als Lösungen der Legendre'sche Differentialgleichung und versuchen Sie daraus einen **Zusammenhang zwischen *C* und *l* abzuleiten**.

c) Bestimmen Sie aus den vorhergehenden Ergebnissen die **Energieeigenwerte E_{Rot} des starren Rotators**. Was kann man über die Abhängigkeit von E_{Rot} von den Quantenzahlen *l* und *m* aussagen?

Bitte Seite wenden!

3.

Rotationsenergien des Ammoniakmoleküls: Das Ammoniakmolekül (NH_3, siehe Skizze) besteht aus einer nahezu tetraedrischen Anordnung von 3 Wasserstoffatomen und einem Stichstoffatom. Der **Abstand *d* zwischen N und H beträgt 102 pm**, der **Bindungswinkel α zwischen H-N-H beträgt 107,3°.** Die **molare Masse von Wasserstoff** beträgt **M = 1,00794 g/mol**.



a) Bestimmen Sie die **Folge der möglichen Rotationsenergieen** des Ammoniakmoleküls um die **Achse *A*** (siehe Skizze) unter der Annahme, dass es sich um einen starren Körper handelt. Geben Sie die Energien **für *l* = 1, 2, 3** numerisch an.

b) Bestimmen Sie **für *l* = 1, 2, 3** die Winkelgeschwindigkeiten des Moleküles.
(Lösung: $\omega_l = \sqrt{l \cdot (l+1)} \cdot 2.33 \cdot 10^{12}\, rad \cdot s^{-1}$ *)*

4.

Kristallographie: Ein kristalliner Festkörper kann als **periodische Anordnung von Atomen** beschrieben werden. Alle Atompositionen lassen sich durch **Translation der sogenannten Elementarzelle** in die drei Raumrichtungen um einen Satz von **Basisvektoren** konstruieren.

a) Interpretieren Sie die Termini **Elementarzelle**, **primitive Elementarzelle**, **Basisvektor**, **primitiver Basisvektor** und **reziprokes Gitter**.

b) Skizzieren Sie eine **Elementarzelle** eines **kubisch raumzentrierten** und eines **kubisch flächenzentrierten** Gitters. Ermitteln Sie **die primitiven Basisvektoren**.

c) Zeigen Sie, dass das **reziproke Gitter des kubisch flächenzentrierten Gitters kubisch raumzentriert** ist.