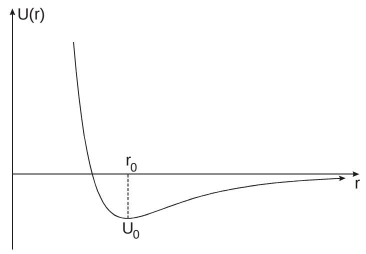
1. Die Wellenlänge der von einer Röntgen-Röhre erzeugten K_α-Strahlung wird zu λ **= 0,18 nm** gemessen.

a) Welches chemische Element dient als Anodenmaterial? *(Lösung: Kobalt (Z = 27))*
b) Welche Beschleunigungsspannung ***U*** muß an die Röhre mindestens angelegt werden, damit die charakteristische Strahlung mit der angegebenen Wellenlänge entsteht? *(Lösung: U = 6,9 kV)*
c) Wie groß muß die Beschleunigungsspannung mindestens sein, damit alle Röntgen-Linien angeregt werden? *(Lösung: U > 9,2 kV)*

2. **Näherung realistischer Potentiale mit dem Oszillatorpotential:** Das Bindungspotential einfacher Moleküle und Festkörper kann oft durch das sogenannte **Lennard-Jones Potential** (siehe Abbildung) beschrieben werden. Dieses hat die Form $U(r) = -Ar^{-n} + Br^{-m}$. Der **Abstand** $\boldsymbol{r_0}$ entspricht der **Bindungslänge**, die **Energie** $\boldsymbol{U_0}$ der **Bindungsenergie** (siehe Abbildung).



a) Man berechne die **Konstanten** ***A*** und ***B*** als Funktionen von $\boldsymbol{r_0}$ und $\boldsymbol{U_0}$.
(Lösung: $A = \dfrac{U_0 r_0^n}{\frac{n}{m} - 1}$, $B = \dfrac{U_0 r_0^m}{1 - \frac{m}{n}}$ *)*
b) Man approximiere in der **Nähe von** r_0 das Lennard-Jones-Potential mit Hilfe eines **Oszillatorpotentiales** und gebe die **Federkonstante *C* des Oszillators** an. *(Lösung:* $C = -\dfrac{nmU_0}{r_0^2}$ *)*
c) Für ein Wasserstoffmolekül gilt ***n* = 6** und ***m* = 12** Die Bindungsenergiebeträgt $\boldsymbol{U_0}$ **= -4,7 eV** und der Bindungsabstand $\boldsymbol{r_0}$ **= 0,75 Å.** Man bestimme die **Schwingungsfrequenz *f* und die Grundzustandsenergie** $\boldsymbol{E_1}$ **eines Elektrons** in diesem Oszillatorpotential. Weiters bestimme man die **Energie und Frequenz** des **ersten angeregten** Zustandes. Ist die **Oszillatornäherung** in diesem Fall **gerechtfertigt**? *(Lösung: E_1 = 5,5 eV)*

<u>Bitte Seite wenden!</u>

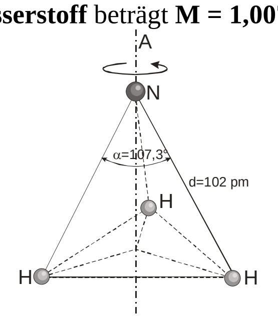
3. **Rotationsenergien eines starren Moleküls:** Der **Hamiltonoperator eines starren Rotators** lautet $\boldsymbol{H_{Rot}} = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot I_A} \cdot \Delta = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot I_A} \cdot \left[\frac{1}{\sin\vartheta} \cdot \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]$, die Eigenwertgleichung $\boldsymbol{H_{Rot}}\psi = E_{Rot}\psi$ 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?

4. **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.
(<u>Lösung</u>: $\omega_l = \sqrt{l \cdot (l+1)} \cdot 2.33 \cdot 10^{12}\, rad \cdot s^{-1}$*)*