

## Übung 5

Abgabe: Dienstag, 2. Dezember 2003

### Aufgabe 1

Mit Röntgenstrahlen können einzelne Anionen aus einem ionischen Kristallgitter herausgeschlagen werden; wird in der so entstandenen Lücke ein Elektron eingefangen, so entsteht aus weiter unten einsichtigen Gründen ein sogenanntes *Farbzentrum* (Abb. 1). Für einen kubischen Kristall wie etwa bei Kaliumjodid kann ein solches Elektron in erster Näherung als Quanton in einem *würfelförmigen Kasten* mit undurchdringlichen Wänden aufgefaßt werden.

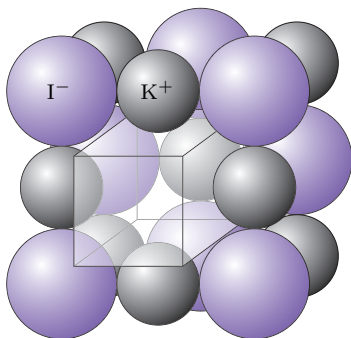


Abbildung 1: Farbzentrum in einem Kaliumjodid-Kristall

- 1.1 Bei einem Kaliumjodid-Kristall beträgt die Seitenlänge des kubischen Kastens  $L = 7 \text{ \AA}$ . Wie groß ist die Energiedifferenz zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand eines Elektrons in diesem Kasten?
- 1.2 Bei welcher Wellenlänge wird durch den Übergang zwischen diesen beiden Zuständen elektromagnetische Strahlung absorbiert? Welche Farbe hat der Kristall unter der Annahme, daß *nur* bei dieser Wellenlänge Licht absorbiert wird?

### Aufgabe 2

Die Abhängigkeit der potentiellen Energie  $V(r)$  einer zweikernigen Molekel wie CO vom Kernab-

stand  $r$  läßt sich in guter Näherung durch das sogenannte *Morse-Potential* wiedergeben:

$$V(r) = D_e hc \left(1 - e^{-a(r-r_e)}\right)^2. \quad (1)$$

Dabei sind  $D_e$ ,  $r_e$  und  $a$  molekelspezifische Konstanten. Für eine CO-Molekel gilt

$$\begin{aligned} D_e &= 90\,530 \text{ cm}^{-1} \\ r_e &= 1,1283 \text{ \AA} \\ a &= 2,33 \text{ \AA}^{-1}. \end{aligned}$$

- 2.1 Was ist die physikalische Bedeutung der Größen  $r_e$  und  $D_e$ , wenn man die Kernbewegung als klassisch betrachtet?
- 2.2 Ist das Verhalten des Morse-Potentials für  $r \rightarrow 0$  realistisch?

Für kleine Auslenkungen von der Gleichgewichtslage kann man das Morse-Potential durch eine Parabel – d. h. das Potential eines harmonischen Oszillators – annähern (Abb. 2):

$$V(r) \approx \frac{1}{2} f \cdot (r - r_e)^2 \quad \text{für } r \approx r_e. \quad (2)$$

- 2.3 Wie muß man die „Federkonstante“  $f$  wählen, damit das Morse-Potential (1) für  $r \approx r_e$  in Gleichung (2) übergeht? (*Hinweis*: Taylor-Entwicklung um den Punkt  $r = r_e$ .)  
Wie groß ist die daraus folgende Vibrationsfrequenz von CO, wenn man die Kernbewegungen als klassisch betrachtet?

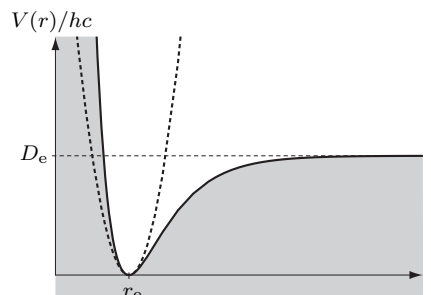


Abbildung 2: Potentielle Energie  $V(r)$  einer zweikernigen Molekel in Abhängigkeit vom Kernabstand  $r$ . Die ausgezogene Kurve stellt das Morse-Potential dar und die gestrichelte Kurve dessen Annäherung durch ein parabelförmiges Potential.