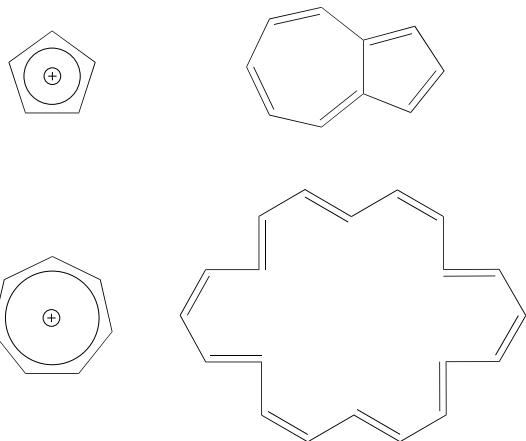


## Übung 7

Abgabe: Dienstag, 16. Dezember 2003

### Aufgabe 1

Welche der folgenden Molekeln sind planar?



### Aufgabe 2

In der Kernresonanzspektroskopie mißt man – auf indirekte Weise – das Magnetfeld am Ort der untersuchten Kerne. Durch den Einfluß der Elektronenhülle um den Kern unterscheidet sich dieses lokale Magnetfeld  $\mathbf{B}_{\text{loc}}$  geringfügig von dem von außen angelegten Magnetfeld  $\mathbf{B}$ . Bei Benzol wird ein Großteil dieser Änderung des lokalen Feldes dadurch verursacht, daß im zyklischen  $\pi$ -Elektronensystem Ringströme entstehen, die ihrerseits ein zusätzliches, induziertes Magnetfeld  $\mathbf{B}_{\text{ind}}$  erzeugen (Abb. 1).

Um dieses induzierte Magnetfeld  $\mathbf{B}_{\text{ind}}$  zu berechnen, betrachten wir die  $\pi$ -Elektronen als Teilchen auf einem Ring in der  $(x, y)$ -Ebene mit Radius  $R = 1,4 \text{ \AA}$ . Das äußere Magnetfeld  $\mathbf{B}$  sei homogen und stehe senkrecht zur Ringebene:  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ . In einem solchen Magnetfeld ist der Operator für die  $z$ -Komponente des Elektronendrehimpulses nicht mehr  $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$  wie in der Vorlesung, sondern

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{2} e B R^2.$$

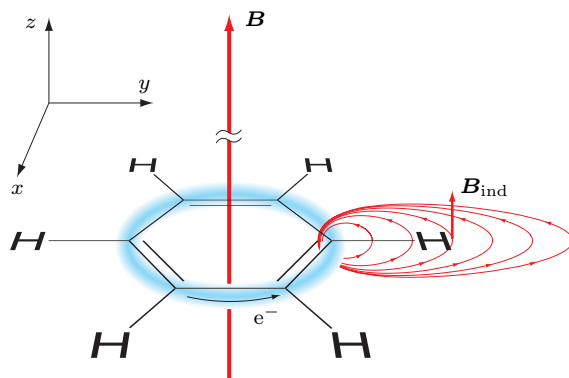


Abbildung 1: Benzolmolekel in einem homogenen Magnetfeld  $\mathbf{B}$ . Dieses Magnetfeld erzeugt einen Kreisstrom im  $\pi$ -Elektronensystem, welcher ein zusätzliches Magnetfeld  $\mathbf{B}_{\text{ind}}$  induziert.

2.1 Wie lautet der Hamiltonoperator eines Elektrons auf einem Ring mit Radius  $R$  in einem Magnetfeld  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ ?

2.2 Man zeige, daß die in der Vorlesung hergeleiteten Energie-Eigenfunktionen für das Elektron auf einem Ring *ohne* Magnetfeld,

$$\Psi_M(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iM\varphi}, \quad M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

auch Eigenfunktionen des Hamiltonoperators aus 2.1 sind. Wie groß sind die entsprechenden Eigenwerte? Was hat sich gegenüber einem System ohne Magnetfeld geändert?

2.3 Welchen Wert für  $L_z$  (falls es ihn gibt) haben diejenigen Energie-Eigenfunktionen, die beim Benzol im Grundzustand besetzt sind?

Hat ein Elektron auf einem Ring den Drehimpuls  $L_z$ , so erzeugt es außerhalb des Rings ein Magnetfeld  $\mathbf{B}_e = (0, 0, B_e)$ , das auf der Ringebene im Abstand  $r$  vom Ringzentrum näherungsweise gegeben ist durch

$$B_e = \frac{\mu_0 e L_z}{8\pi m_e} \frac{1}{r^3},$$

wobei  $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ N A}^{-2}$  die Permeabilität des Vakuums bezeichnet.

**2.4** Wie groß ist am Ort eines Wasserstoffkerns das *gesamte*, von allen  $\pi$ -Elektronen verursachte Magnetfeld  $\mathbf{B}_{\text{ind}}$  unter der Annahme, daß es sich aus den Beiträgen der Einzelelektronen additiv zusammensetzt? Der C–H-Abstand beträgt 1,1 Å.

**2.5** Wie groß ist die durch

$$\mathbf{B}_{\text{loc}} = (1 - \sigma)\mathbf{B},$$

definierte Abschirmkonstante  $\sigma$  für einen Wasserstoffkern? Der experimentelle Wert ist  $\sigma = -1,5 \cdot 10^{-6}$  in *flüssiger Phase*. Wie könnte man eventuelle Diskrepanzen mit dem berechneten Wert erklären?