


Aufgabe 32: Born-Oppenheimer-Näherung (schriftlich, 10 Punkte)

Der Hamiltonoperator für ein System aus zwei Massen M und m mit $M \gg m$ lautet

$$H = \frac{p_1^2}{2M} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}k_1 x_1^2 + \frac{1}{2}k_2 (x_1 - x_2)^2.$$

- a) [3P] Betrachten Sie das Problem zunächst klassisch. Stellen Sie die klassischen Bewegungsgleichungen für x_1 und x_2 auf und bestimmen Sie die Eigenfrequenzen.

Hinweis: Sie können sich überlegen, wie eine mögliche klassische Realisierung des Systems aussieht und davon ausgehend die Bewegungsgleichungen ableiten. Oder Sie fassen den Hamiltonoperator als klassische Hamiltonfunktion auf und stellen die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen auf.

- b) [5P] Benutzen Sie die Born-Oppenheimer-Näherung um die quantenmechanischen Eigenenergien zu bestimmen.

Hinweis: Vernachlässigen Sie dazu zunächst die Bewegung der schweren Masse M und betrachten Sie die Bewegung der leichten Masse m . Danach betrachten Sie die schwere Masse M im zuvor berechneten effektiven Potential.

- c) [2P] Vergleichen Sie die Ergebnisse aus a) und b). Beachten Sie dabei, dass $M \gg m$ gilt.

Aufgabe 33: Moleküldynamik (mündlich, 10 Punkte)

Das Bindungspotential zwischen den beiden Wasserstoffatomen im H_2 -Molekül kann durch das Morse-Potential

$$V(r) = V_0 \left[1 - \exp\left(-\frac{r - r_0}{a}\right) \right]^2 - V_0$$

angenähert werden. Wir verwenden hier die Parameter $r_0 = 0.74 \text{ \AA}$, $a = 0.51 \text{ \AA}$ und $V_0 = 4.75 \text{ eV}$.

- a) [2P] Nähern Sie das Potential für kleine Auslenkungen aus der Ruhelage durch ein Harmonischer-Oszillator-Potential an und bestimmen Sie die Eigenenergien.

Hinweis: Verwenden Sie die reduzierte Masse des H_2 -Moleküls. Es soll zunächst keine Rotation angeregt sein, d. h. $l = 0$.

- b) [1P] Bis zu welchem Schwingungszustand kann das Molekül in dieser Näherung angeregt werden, bevor die Bindung abbricht?

- c) [1P] In jedem Schwingungszustand kann ein Molekül außerdem noch zu Rotationen angeregt werden. Die möglichen Rotationsenergien lauten

$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I} l(l + 1).$$

Dabei ist $I = \mu \langle r \rangle^2$ das Trägheitsmoment des Moleküls, μ die reduzierte Masse und $l \in \mathbb{N}$. Welchen Wert hat $\langle r \rangle$? Wie lauten die Rotationsenergien der möglichen Schwingungszustände?

d) [2P] Betrachten Sie nun die Anharmonizität des Potentials, also seine Abweichung von der quadratischen Parabel. Entwickeln Sie das Potential bis zur Ordnung r^4 um die Ruhelage. Plotten Sie das vollständige Potential und die Näherungen bis zur Ordnung r^2 und r^4 .

e) [3P] Betrachten Sie $\mathcal{O}(r^3)$ und $\mathcal{O}(r^4)$ als Störung des HO-Potentials und berechnen Sie in erster Ordnung Störungstheorie die Schwingungsenergien erneut. Wie viele Anregungszustände sind nun möglich?

Hinweis: $\mathcal{O}(r^3)$ sollte keinen Beitrag leisten.

f) [1P] Die nun auftretende Anharmonizität hat Einfluss auf das Rotationsspektrum jedes Schwingungszustandes. Erläutern Sie dies qualitativ.