

Aufgabe 22 (schriftlich): Moleküldynamik

(12 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) 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) Bis zu welchem Schwingungszustand kann das Molekül in dieser Näherung angeregt werden, bevor die Bindung abbricht.

- c) Außer den Schwingungszuständen kann ein Molekül 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 $l \in \mathbb{N}$.

Wie lauten die Rotationsenergien der möglichen Schwingungszustände?

- d) 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) 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. Wie viele Anregungszustände sind nun möglich?

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

- f) Die nun auftretende Anharmonizität hat einen Einfluss auf das Rotationsspektrum. Bestimmen Sie erneut die Rotationsenergien jedes Schwingungszustands.

Hinweis: Sie benötigen die Schwingungszustände in erster Ordnung Störungstheorie. Gehen Sie hierbei aber in der Entwicklung des Potentials nur bis zur Ordnung r^3 .

Aufgabe 23 (mündlich): Tight-Binding-Methode

(6 Punkte)

Betrachten Sie ein zweidimensionales, quadratisches Gitter mit dem Atomabstand a . Berechnen Sie hierfür die Energie im Tight-Binding-Modell. Dabei sollen nur Wechselwirkungen bis zum übernächsten Nachbarn berücksichtigt werden mit

$$\tilde{\lambda}(\vec{R}) = \begin{cases} -t_1 & \text{falls } \vec{R} \text{ nächster Nachbar-Vektor} \\ t_2 & \text{falls } \vec{R} \text{ übernächster Nachbar-Vektor} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$\tilde{\lambda}(\vec{R})$ ist hier wie in der Vorlesung definiert.

- a) Berechnen Sie die Dispersionsrelation $\varepsilon(\vec{k})$, mit $\vec{k} = (k_x, k_y)$.

- b) Plotten Sie diese entlang der Linien $(0,0) \rightarrow (\frac{\pi}{a}, 0)$, $(\frac{\pi}{a}, 0) \rightarrow (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$, und $(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}) \rightarrow (0,0)$ für

(i) $t_1 = 0.25 \text{ eV}$ und $t_2 = 0$,

(ii) $t_1 = 0.25 \text{ eV}$ und $t_2 = 0.1t_1$.

Aufgabe 24 (mündlich): Weihnachtsaufgabe

(5 Punkte)

Stellen Sie in einem Satz dar, welche Beiträge zur Physik mit folgenden Namenspaaren in Zusammenhang stehen:

- a) Franck-Hertz
- b) Hartree-Fock
- c) Stefan-Boltzmann
- d) Davisson-Germer
- e) Clebsch-Gordan
- f) Bethe-Weizsäcker
- g) Debye-Scherrer
- h) Born-Oppenheimer
- i) Heitler-London
- j) Wigner-Seitz

Frohe Weihnachten!