



Physikalische Chemie 2/ Theoretische Chemie 1

Übungsblatt Nr. 9

WS 2011/12

Aufgabe 29 - Drehimpuls-Kommutatoren (max. 3 Pkte.)

- a) Wie berechnet man klassisch den Drehimpuls \vec{l} eines Teilchens mit der Masse m , das im Abstand r um eine Achse rotiert? Bestimmen Sie die Drehimpuls-Komponenten l_x , l_y und l_z .
- b) Bestimmen Sie die Drehimpuls-Operatoren \hat{l}_x , \hat{l}_y und \hat{l}_z . Ersetzen Sie dafür die Orts- und Impulskomponenten im klassischen Ausdruck aus Teilaufgabe a) durch Operatoren.
- c) Berechnen Sie den Kommutator $[\hat{l}_x, \hat{l}_z]$.
Verwenden Sie dafür die Gleichungen

$$\begin{aligned}[A + B, C + D] &= [A, C] + [A, D] + [B, C] + [B, D] \\ [AB, CD] &= A(C[B, D] + [B, C]D) + ([A, C]D + C[A, D])B.\end{aligned}$$

Welche (analogen) Beziehungen gelten für $[\hat{l}_y, \hat{l}_z]$ und $[\hat{l}_x, \hat{l}_y]$?

- d) Berechnen Sie den Kommutator $[\hat{l}^2, \hat{l}_z]$. Verwenden Sie dafür zusätzlich die Gleichung

$$[A^2, C] = A[A, C] + [A, C]A,$$

und die Ergebnisse von c).

- e) Stellen Sie den Betrag sowie die x-, y- und z-Komponente des Drehimpulses schematisch dar.

Aufgabe 30 - Rotationsspektroskopie (max. 3 Pkte.)

Der erste Rotationsübergang eines Moleküls HX ist bei 16.93 cm^{-1} . Das deuterierte Molekül DX hat den ersten Rotationsübergang bei 8.57 cm^{-1} .

- a) Um welches Element handelt es sich bei X? Nehmen Sie an, dass die Bindungslängen sich bei der Deuterierung und während der Rotation nicht wesentlich ändern.
- b) Wie groß ist die Bindungslänge des Moleküls HX?
- c) Skizzieren und vergleichen Sie die Lage der Energieniveaus für die Modellsysteme „Starrer Rotator“ und „Harmonischer Oszillator“. Wie viele Banden erwarten Sie im Rotationsspektrum bzw. Schwingungsspektrum (Auswahlregeln $\Delta J = \pm 1$ bzw. $\Delta v = \pm 1$)?