

1.) Atomzustände

Titan hat die atomare Konfiguration $[\text{Ar}]3d^24s^2$.

- a) (1 Pkt) Welchen Zustand $^{2S+1}L_J$ hat das Ti-Atom im Grundzustand?
- b) (2 Pkte) Welche Zustände kann es mit der angegebenen elektronischen Konfiguration annehmen?
- c) (1 Pkt) In wieviele Zustände unterschiedlicher Energie werden die unter b) genannten Zustände in einem (nicht zu starken) Magnetfeld aufspalten? (es reicht aus, dies durch eine einfache Formel allgemein zu beschreiben oder es für zwei verschiedene Zustände $^{2S+1}L_J$ explizit anzugeben)

2.) Oszillatorstärke

In einem von einem Elektron besetzten harmonischen Potential ist für den Übergang $n=0 \rightarrow n=1$ die Oszillatorstärke $f = 1$. Dies ist in Übereinstimmung mit der Auswahlregel $\Delta n = \pm 1$, d.h. es ist hier nur dieser Übergang erlaubt (genauer: im dreidimensionalen harmonischen Oszillator bezieht sich dies auf Anregungen in Richtung des Feldvektors des linear polarisierten Lichts; senkrecht dazu kann nicht angeregt werden).

a) (1 Pkt) Bekanntlich ist die Summe der Oszillatorstärken aller erlaubten Übergänge eines Elektrons aus einem gegebenen Zustand 1. Weiter gilt für die Oszillatorstärke einer "Abregung" eines angeregten Zustands (Photonenemission) $f_{ji} = -f_{ij}$. Was bedeutet dies für die Oszillatorstärken der Übergänge $n=1 \rightarrow n=2$, $n=2 \rightarrow n=3$ usw.?

b) (1 Pkt) Ein dreidimensionales harmonisches Potential sei mit 8 Elektronen besetzt. Welche Eielektronenzustände sind damit im Grundzustand besetzt? (diese lassen sich durch die drei Quantenzahlen (n_x, n_y, n_z) beschreiben)

c) (1 Pkt) Welche Eielektronenübergänge sind hier erlaubt bei Anregung mit linear polarisiertem Licht (z.B. in z-Richtung)? (ein Übergang kann nur stattfinden, wenn er erstens dipolerlaubt ist und zweitens die Besetzung der Zustände es zulässt, d.h. man braucht ein Elektron im Anfangs- und ein Loch im Endzustand).

d) (1 Pkt) Wie groß ist die Summe der Oszillatorstärken aller erlaubten Eielektronenübergänge?

$$f = \sum_{n=1}^8 \sum_j f_{i(n),j}$$

3.) Kohlenstoffkette

Lineare Kohlenstoffketten mit konjugierten Doppelbindungen (abwechselnde Einfach- und Doppelbindungen, ein Wasserstoffatom pro Kohlenstoffatom, an den Enden zwei) zeigen aufgrund der delokalisierten π -Elektronen (aus den senkrecht zur Molekülebene stehenden p-Orbitalen der Atome gebildete Zustände) ein Verhalten, welches sich gut mit dem Modell des eindimensionalen Kastens beschreiben läßt, wobei die Länge des Kastens einfach die der Kohlenstoffkette ist (bei N Atomen ist die Länge $N \cdot 1.4 \text{ \AA}$). Der Kasten ist mit einem Elektron pro Atom gefüllt.

a) (1 Pkt) Bei einer Kette mit 8 Atomen sind damit welche Zustände des Kastenpotentials gefüllt?

b) (1 Pkt) Bei welcher Wellenlänge absorbiert dieses Molekül (was ist der Energieunterschied zwischen dem Grund- und dem ersten angeregten Zustand?)

c) (3 Pkte) Bei einer Anregung mit in Richtung der Molekülachse linear polarisiertem Licht $E_0 \cos(\omega t)$ mit Feldstärke $E_0 = 10^6 \text{ V/m}$, wie groß ist die Rabi-Frequenz der Anregung? Tipp: es gilt

$$\int_{-a}^a \sin(nx)x \cos(mx) dx = \frac{a \cos(a(m-n))}{m-n} - \frac{a \cos(a(m+n))}{m+n} - \frac{\sin(a(m-n))}{(m-n)^2} + \frac{\sin(a(m+n))}{(m+n)^2}$$

4.) Edelgas-Molekül

Ein positiv geladenes Argon-Dimer Ar_2^+ ist ein relativ stark gebundenes Molekül, dessen relevanten Molekülorbitale praktisch ausschließlich aus den 3p-Orbitalen der Argonatome gebildet werden.

- a) (1 Pkt) Welche Molekülorbitale (Bezeichnung!) lassen sich aus atomaren p-Orbitalen aufbauen?
- b) (1 Pkt) Wie sind diese bei dem Ar_2^+ gefüllt? Was ergibt sich für ein Molekülzustand?
- c) (2 Pkte) Welche Einelektronen-Anregungen sind innerhalb dieses Ensembles von Zuständen mit linear polarisiertem Licht anregbar? (Auswahlregeln müssen erfüllt sein, und die Besetzung der Zustände muss es zulassen) Wie ist die Bezeichnung dieser angeregten Molekülzustände?

5.) Kinetische Energie bei der Ionisation

Bei der Photoionisation erhält das Elektron nicht die ganze Energie, sondern ein kleiner Teil wird wegen der Impulserhaltung auch auf das Ion übertragen (Rückstoß).

a) (1 Pkt) Wenn ein Wasserstoffatom (IP=13.61 eV) durch ein Photon mit 20 eV Energie ionisiert wird, wie groß ist dann die kinetische Energie von Elektron und Proton im Endzustand?

b) (1 Pkt) Wie groß sind die Impulse der beiden Teilchen, wie vergleicht sich dies mit dem Impuls des absorbierten Photons?

c) (1 Pkt) Die Energie- und Impulsbilanz wäre die gleiche, wenn der Ionisationsvorgang durch Mehrphotonenabsorption in einem starken Laserfeld erfolgen würde. Wie groß wäre in einem Feld von 10^{15} W/cm^2 (entspricht einer Feldstärke von $E_0 = 8.7 \cdot 10^{10} \text{ V/m}$) bei einer Lichtwellenlänge von 800 nm die ponderomotorische Energie eines Protons, also die zeitlich gemittelte kinetische Energie aufgrund der Oszillation im Laserfeld?