

# Übungsblatt 9

## zur PC III Vorlesung (Lehramt) SS 2012

Ausgabe: 03.07.12    Rückgabe 10.07.12

### Aufgabe1 (4 Punkte)

(a) Berechnen Sie die atomaren Termsymbole für alle möglichen Energieniveaus (Singulett und Triplett –Zustände) für ein He (Helium Molekül) und skizzieren Sie sie in einem Diagramm. Welche Übergänge sind nach dem Stand der Auswahlregeln erlaubt?

(b) Ein Wasserstoff-Molekül kann drei angeregte Zustände haben:

$(1s\sigma_g 2s\sigma_g)$ ,  $(1s\sigma_g 2p\sigma_g)$  and  $(1s\sigma_g 2p\pi_u)$ . Bestimmen Sie das molekulare Termsymbole für jeden Fall (nur Singulett Zustand).

### Aufgabe2 (4 Punkte)

(a) Durch die elektronische Anregung wird auch der Gleichgewichtsabstand der Kerne verändert. Bestimmen Sie den Franck-Condon-Faktor in Abhängigkeit der Differenz des Gleichgewichtsabstands  $\Delta R$  für einen (0,0)-Übergang. die Kraftkonstante  $k$  ist für beide elektronische Zustände gleich.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \text{ (Gaussian Integral)}$$

$$\psi_{v=0} = \left( \frac{\alpha}{\pi^{1/2}} \right)^{1/2} \cdot e^{-\alpha^2 x^2 / 2}$$

(b) Zeichnen Sie das Franck-Condon-Diagramm für den Fall, dass der elektronisch angeregte Zustand wesentlich größer als der Kernabstand ( $R_{ex} \gg R_{eq}$ ) ist. Was schließen Sie daraus?

### Aufgabe3 (4 Punkte)

Berechnen Sie das elektrische Übergangsdipolmomentintegral für den Übergang 1s -> 3pz in einem Wasserstoff-Atom.

$$\int_0^{\infty} x^j e^{-\alpha x} dx = \frac{j!}{\alpha^{j+1}}$$

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

$$\psi_{3pz} = \frac{1}{\sqrt{648\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left( 4 - \frac{2Zr}{3a_0} \right) \left( \frac{2Zr}{3a_0} \right) e^{-Zr/3a_0} \cos\theta$$