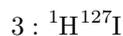
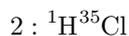


Übungsblatt 6: Harmonischer Oszillator

Aufgabe 1: Harmonischer Oszillator

i) Reduzierte Massen:

Berechnen Sie die reduzierten Schwingungsmassen μ folgender Moleküle



ii) Kraftkonstanten:

Die Schwingungswellenzahlen der Moleküle 1-4 sind wie folgt gegeben:

1 : 4400 cm^{-1}

2 : 2991 cm^{-1}

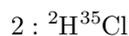
3 : 2308 cm^{-1}

4 : 2575 cm^{-1}

Berechnen Sie aus den gegebenen Schwingungswellenzahlen und den berechneten reduzierten Massen die Kraftkonstanten der Bindungen.

iii) Isotopeneffekt:

Gehen Sie von den gleichen Kraftkonstanten der entsprechenden Isotopen in Aufgabenteil ii) aus und berechnen die Schwingungswellenzahlen folgender Isotope über die neuen reduzierten Massen:



iv) Energieniveaus:

Berechnen E_ν für $\nu = 0$, $\nu = 1$ und $\nu = 2$ für das ${}^1\text{H}{}^{35}\text{Cl}$ -Molekül. Wie skaliert E_ν mit der Quantenzahl ν vgl. Sie auch mit E_n beim Teilchen im Kasten.

v) Besetzungsverhältnis:

Berechnen Sie das Besetzungsverhältnis $\frac{N_1}{N_0}$ der ersten beiden Zustände im Harmonischen Oszillator des ${}^1\text{H}{}^{35}\text{Cl}$ -Moleküls bei den Temperaturen $T = 300 \text{ K}$ (Raumtemperatur), $T = 1000 \text{ K}$ und $T = 5772 \text{ K}$ (Temperatur auf der Sonne).

vi) Übergangsdipolmoment:

In der Vorlesung haben wir bereits gelernt, dass die Bedingung für die Absorption eines Photons (die Energie des Photons muss gleich dem Energieunterschied zweier Energieniveaus sein) eine nötige aber keine hinreichende ist. Mit welcher Formel können Sie bestimmen ob der Energieübergang stattfinden kann. Überlegen Sie außerdem Anhand der in der Abbildung gezeigten Wellenfunktionen ob die Übergänge $\Psi_0 \rightarrow \Psi_1$ und $\Psi_0 \rightarrow \Psi_2$ im Harmonischen Oszillator erlaubt sind.

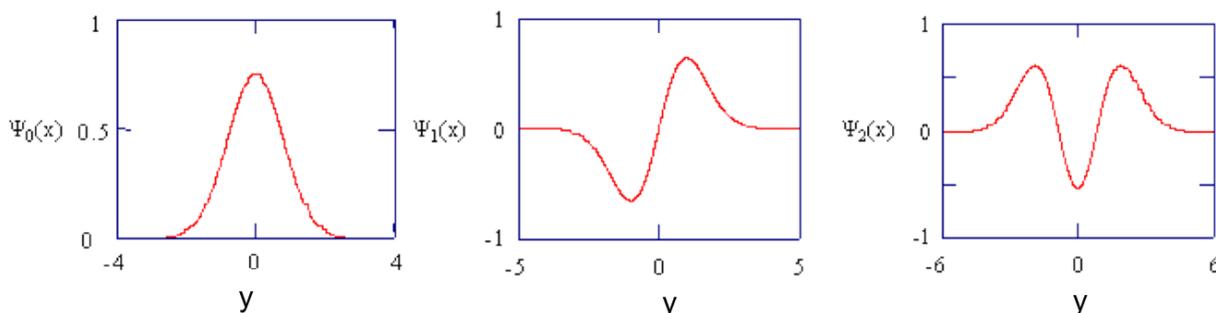


Abbildung 1: Wellenfunktionen Ψ_0 bis Ψ_2 .