

Abgabe am 15.12.2017 in der jeweiligen Übungsgruppe

Besprechung am 22.12.2017, 11-12/12-13 h

Übungsblatt 8

Aufgabe 1:

Das Übergangsdipolmoment für einen Rotationsübergang ist gegeben durch

$$\mu = \langle Y_{l',m'} | \hat{\mu} | Y_{l'',m''} \rangle = \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} Y_{l',m'}(\theta, \varphi)^* \cdot \hat{\mu} \cdot Y_{l'',m''}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi$$

Die Komponenten des elektrischen Dipolmoments, die in Kugelkoordinaten als Funktion von μ_0 , dem Betrag des Vektors und der Winkel Θ und φ geschrieben werden können, lauten:

$$\mu_x = \mu_0 \sin \theta \cos \varphi$$

$$\mu_y = \mu_0 \sin \theta \sin \varphi$$

$$\mu_z = \mu_0 \cos \theta$$

Dabei wurde die Molekülachse auf die z-Achse gelegt. Das Übergangsdipolmoment hat dann die drei Komponenten:

$$\mu_x = \mu_0 \langle Y_{l',m'} | \sin \theta \cos \varphi | Y_{l'',m''} \rangle$$

$$\mu_y = \mu_0 \langle Y_{l',m'} | \sin \theta \sin \varphi | Y_{l'',m''} \rangle$$

$$\mu_z = \mu_0 \langle Y_{l',m'} | \cos \theta | Y_{l'',m''} \rangle$$

Berechnen Sie das Übergangsdipolmoment $\mu = \langle Y_{1,0} | \hat{\mu} | Y_{0,0} \rangle$ und $\mu = \langle Y_{2,0} | \hat{\mu} | Y_{0,0} \rangle$ für die z-Komponente. Können Sie anhand dieser Ergebnisse entscheiden, ob der Übergang erlaubt oder verboten ist?

Die Kugelflächenfunktionen lauten:

$$Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_{2,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

Abgabe am 15.12.2017 in der jeweiligen Übungsgruppe

Besprechung am 22.12.2017, 11-12/12-13 h

Aufgabe 2:

Verwenden Sie einen Computer, um die niedrigsten 25 Rotationsenergieniveaus E_J (in cm^{-1}) für HI (Bindungslänge $R = 1,6 \text{ \AA}$) zu berechnen. Berechnen Sie zusätzlich die zugehörigen relativen (n_J/n_0) und Absoluten (n_J in %) Besetzungszahlen bei 100 K, 298 K und 1000 K. Stellen Sie die Abhängigkeit der Besetzungszahlen von J für jede der drei Temperaturen zeichnerisch dar. Betrachten Sie das Molekül als starren Rotator ($m_H = 1.0078 \text{ u}$; $m_I = 126.9 \text{ u}$; $1\text{u} = 1.6606 * 10^{-27} \text{ kg}$).

Aufgabe 3:

Entwickeln Sie durch Ableiten der relativen Besetzungszahlen n_J/n_0 nach J einen Ausdruck für die Quantenzahl J_{\max} die dem Niveau mit der größten Besetzung entspricht. Berechnen Sie J_{\max} für HI bei 100 K, 298 K und 1000 K. Verwenden Sie hierfür auch die Informationen aus Aufgabe 2.