

Besprechung am 06.12.2019

Übungsblatt 7

1) Der anharmonische Oszillator

Für Iodwasserstoff ($^1\text{H}-^{127}\text{I}$) misst man eine Grundschriftungsfrequenz von 2230 cm^{-1} und eine Dissoziationsenergie von 32478 cm^{-1} .

- Berechnen Sie die Nullpunktsenergie des Moleküls und die Kraftkonstante der H-I-Bindung.
- Welches Intensitätsverhältnis der „heißen Bande“ ($\nu = 1 \rightarrow 2$) zur Grundschriftungsbande ($\nu = 0 \rightarrow 1$) erwartet man bei einer Temperatur von 287.8 K ($k_{\text{B}}T/hc \approx 200\text{ cm}^{-1}$)?
- Bei welcher Wellenzahl wird der erste Oberton ($\nu = 0 \rightarrow 2$) angeregt?

2) Einsteinkoeffizienten

Wie ändert sich das Verhältnis der Einstein-Koeffizienten für spontane und stimulierte Emission für den Schwingungsübergang $\nu = 0 \rightarrow 1$ von Iodwasserstoff, wenn Wasserstoff durch Deuterium ersetzt wird?

3) Übergangsdipolmoment

Die Grundschriftung des $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ -Moleküls findet bei einer Wellenzahl von 2142 cm^{-1} statt.

Betrachten Sie das Molekül als einen harmonischen Oszillator und berechnen Sie die Größe des Übergangsdipolmoments für den oben genannten Übergang. (Hinweis: $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$)