Besprechung am 26.10.2018

Übungsblatt 1

1) Umrechnung von Energien

Rechnen Sie die aufgeführten spektroskopischen Daten in der angegebenen Weise um:

a) Wellenlänge 4 nm in J
b) Frequenz 60 GHz in cm^{-1}
c) Wellenzahl 2000 cm^{-1} in µm
d) Frequenz 400 MHz in m
e) Thermische Energie E = k_B·298 K in eV
f) Wellenzahl 3000 cm^{-1} in meV
g) 1,5 eV in J/Molekül und kJ/mol
h) 1,5 eV in THz
i) 1,5 eV in nm
j) 1,5 eV in μm^{-1}

Geben Sie an, in welchem Spektralbereich des elektromagnetischen Spektrums diese Werte liegen und welcher Art von Übergang sie entsprechen.

2) Zustandssumme und Besetzungsverhältnis

a) Bei NO ist der niedrigste elektronische Zustand 4-fach und der um 0,015 eV darüber liegende Zustand 8-fach entartet. Betrachten Sie NO als ein 2-Niveausystem, dessen Grundzustand dem Energienullpunkt entspricht.
   i. Berechnen Sie die elektronische Zustandssumme für NO bei 400 K.
   ii. Welcher Bruchteil der Moleküle befindet sich bei 400 K im Grundzustand bzw. angeregten Zustand?
   iii. Berechnen Sie die Besetzungswahrscheinlichkeit des Grundzustands für $T \longrightarrow 0$ und für $T \longrightarrow \infty$?

b) Berechnen Sie für T = 100 K das Verhältnis der Besetzungszahlen
   i. zweier Kernzustände im Abstand von ν = 400 MHz
   ii. zweier Vibrationszustände im Abstand von $\tilde{\nu}$ = 1600 cm^{-1}

Besprechung am 26.10.2018

3) Gekoppelte Differenzialgleichungen – ein Beispiel aus der Physik

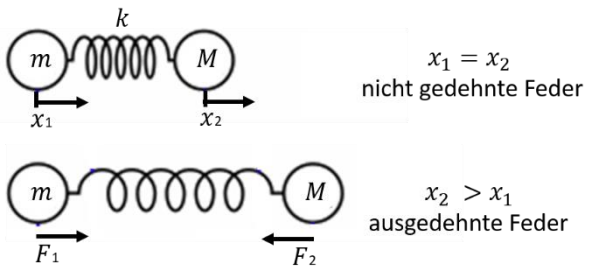
Die Federkraft F wird als linear während der Auslenkung aus dem Gleichgewichtspunkt angenommen (harmonischer Oszillator, Hooke'sche Gesetz). Setzen wir das Hooke'sche Gesetz in das zweite Newtonsche Gesetz

$$F = ma = m\frac{d^2x}{dt^2} = m\ddot{x}$$

ein, erhalten wir die "Schwingungs"-Differenzialgleichung

$$F = m\ddot{x} = -kx$$

Betrachten Sie ein System aus 2 Massen, m und M, die entlang der x-Achse mit einer Feder verbunden sind.



a) Formulieren Sie für das oben beschriebene System das dazugehörige Set von gekoppelten Differenzialgleichungen.

b) Die aus a) erhaltenen Gleichungen sind gekoppelte Wellengleichungen. Zeigen Sie, dass für eine Wellengleichung $\ddot{x} = -\omega^2 x$

$$x(t) = A\sin\omega t + B\cos\omega t$$

eine Lösung ist.

c) Lösen Sie die gekoppelten Differenzialgleichungen (Tipp: Für $\ddot{x}$ verwenden Sie die Wellengleichung, wobei $x_i(t) = A_i\sin\omega t + B_i\cos\omega t$, und lösen Sie das Eigenwert-problem.)

d) Ein Beispiel für ein solches System ist das $^1H^{35}Cl$-Molekül. Die Kraftkonstante kann aus Tabellenwerken entnommen werden. Berechnen Sie die Schwingungsfrequenz $\nu = \omega/2\pi$ der HCl-Bindung.