

Besprechung am 24.11.2023

Übungsblatt 5

1) Übergangsdipolmoment

Zwischen welchen der folgenden Wellenfunktionen darf ein elektrischer Dipolübergang stattfinden?

$$\psi_1(x) = \sin(x) \quad \psi_2(x) = \cos(x) \quad \psi_3(x) = x^3 \cdot e^{-x^2} \quad \psi_4(x) = e^{-\sin^2(x)}$$

2) Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators

Bestimmen Sie bei welcher Auslenkung die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des HF Moleküls ($k = 966 \text{ N/m}$ und $\mu = 1.5775 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$) im Schwingungsgrundzustand 50 % des maximalen Wertes ist. Nehmen Sie dabei das Modell eines harmonischen Oszillators an.

3) Harmonischen Oszillators

Das IR-Spektrum von $^{35}\text{Cl} \ ^{19}\text{F}$ zeigt eine Absorption bei $\tilde{\nu} = 783,35 \text{ cm}^{-1}$ für den Übergang $\nu = 1 \rightarrow 2$. Nehmen Sie für die Rechnungen das Modell des harmonischen Oszillators an.

- Berechnen Sie die Kraftkonstante k der ClF Bindung.
- Berechnen Sie die Verschiebung der Absorption, wenn ^{35}Cl durch ^{37}Cl ausgetauscht wird.