

Aufgabe 1 (17)

Die Besetzungsdichte der Energieniveaus eines im thermischen Gleichgewicht befindlichen quantenmechanischen Systems ist durch die Boltzmann-Verteilung gegeben:

$$\frac{N_i}{N_{ges}} = \frac{1}{Z} g_i e^{-\frac{E_i}{kT}}$$

- Berechnen Sie für die Molekülschwingung des Wasserstoffs ($\nu = 4163 \text{ cm}^{-1}$) das Besetzungsverhältnis $N_{(v=1)}/N_{(v=0)}$ bei einer Temperatur von $10 \text{ }^\circ\text{C}$.
- Bestimmen Sie für das Besetzungsverhältnis $N_{(v=1)}/N_{(v=0)}$ die Grenzwerte für $T \rightarrow \infty$ und für $T \rightarrow 0$.
- Wie entwickelt sich die Absorption bzw. die Transmission im IR Spektrum des CO Moleküls für den Grenzwert $T \rightarrow \infty$.

Hinweis: $k = 1.381 \cdot 10^{-23}$ [J/K] Boltzmann-Konstante
 $c = 2.9979 \cdot 10^8$ [m/s] Lichtgeschwindigkeit
 $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ [Js] Planck'sches Wirkungsquantum

Aufgabe 2 (17)

Ein Ar^+ -Ionen Laser emittiert Strahlung bei einer Wellenlänge von $514,50 \text{ nm}$ mit einer Strahlungsleistung von 10 W .

- Berechnen Sie für diesen Laser die Photonenenergie (in [J]) und die Wellenzahl der Strahlung (in $[\text{cm}^{-1}]$).
- Berechnen Sie den Photonenfluss (Zahl der emittierten Photonen pro Sekunde) dieses Lasers.
- Berechnen Sie die Energieaufnahme eines Festkörpers, der die Strahlung des oben genannten Lasers eine Minute lang vollständig absorbiert.

Hinweis: $c = 2.9979 \cdot 10^8$ [m/s] Lichtgeschwindigkeit
 $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ [Js] Planck'sches Wirkungsquantum

Aufgabe 3 (24)

Die ersten 3 Linien von P- und R-Zweig in einem hochaufgelösten Schwingungsspektrum des H^{35}Cl Moleküls in der Gasphase wurden bei folgenden Frequenzen (in THz) gefunden:

P-Zweig: $85.924, 85.249, 84.588$; R-Zweig: $87.126, 87.716, 88.258$.

Sie können alle gefragten Größen in Hz berechnen, wenn nicht explizit anders gefordert.

- Berechnen Sie aus diesen Angaben die Rotationskonstanten des HCl im Schwingungsgrundzustand und im ersten angeregten Schwingungszustand.
- Berechnen Sie die Wellenlänge des rotationslosen Schwingungsübergangs des HCl.
- Berechnen Sie die Frequenzen (in THz) für die R_0 -Linie und die P_1 -Linie im rotationsaufgelösten IR Spektrum des D^{35}Cl .
- Berechnen Sie im rotationsaufgelösten IR-Spektrum des D^{35}Cl die Abstände (in THz) der R_0 und P_2 Linien sowie der R_1 und P_1 Linien.

Hinweis: $c = 2.9979 \cdot 10^8$ [m/s] Lichtgeschwindigkeit
 $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ [Js] Planck'sches Wirkungsquantum
 $M_{\text{H}} = 1.0079$ [g/mol]
 $M_{\text{D}} = 2 \cdot M_{\text{H}}$
 $M_{\text{Cl}} = 35.0$ [g/mol]
 $\mu = 1.661 \cdot 10^{-27}$ [kg] atomare Masseneinheit
 $N_{\text{A}} = 6.022 \cdot 10^{23}$ $[\text{mol}^{-1}]$ Avogadrokonstante

Aufgabe 4 (12)

Die Fundamentalschwingung des HCl findet man bei 2885.9 cm^{-1} , den ersten und zweiten Oberton bei 5668.05 und 8346.98 cm^{-1} .

- Berechnen Sie aus den beiden ersten Werten die Grundfrequenz (in cm^{-1}) und die Anharmonizitätskonstante nach dem Modell des Morse-Potentials.
- Berechnen Sie mit den Resultaten aus a) eine Frequenz (in cm^{-1}) für den zweiten Oberton und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem oben gegebenen experimentellen Wert.

Aufgabe 5 (12)

Gegeben sei die folgende topologische Hückel-Matrix $\underline{\underline{H}}$ und die Koeffizienten \underline{C} eines Molekülorbitals (MO).

$$\underline{\underline{H}}: \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \underline{C}: \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- Geben Sie die Strukturformel des entsprechenden Kohlenwasserstoffs an.
- Berechnen Sie die Hückel-Energie des MOs.

Aufgabe 6 (18)

Die Wellenfunktionen des H-Atoms kann man mit den 3 Quantenzahlen n , l , m_l charakterisieren.

(Legen Sie eine Tabelle an, in deren 1. Spalte die drei oben genannten Quantenzahlen stehen, und in deren 2., 3. und 4. Spalte Sie die Resultate der Aufgaben a), b) und c) eintragen.)

- Notieren Sie die zu den Quantenzahlen gehörenden Operatoren.
- Notieren Sie die zugehörigen Eigenwerte dieser Operatoren.
- Notieren Sie die Wertebereiche der Quantenzahlen.