



Begleitend zum 9. Seminar am 20. 6. 2008

Aufgaben:

- 1) Das $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ -Molekül kann durch ein Morsepotenzial, $V(r) = D_e \{1 - \exp[-a(r - r_e)]\}^2$, mit $a = (k_e/2D_e)^{1/2}$ und den Konstanten $D_e = 7.41 \times 10^{-19} \text{ J}$ und $k_e = 516.3 \text{ Nm}^{-1}$ beschrieben werden. Die Energieniveaus für das Morsepotenzial berechnen sich nach der Formel $E_n = h\nu \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{(h\nu)^2}{4D_e} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2$. Die Frequenz ν ist gleich $8.97 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$. Berechnen Sie die vier niedrigstem Energieniveaus. Berechnen Sie die Grundfrequenz ν_0 des Übergangs $n=0 \rightarrow n=1$ und die Frequenzen der ersten drei Obertöne der Schwingung. Wie groß ist der relative Fehler, wenn man die ersten drei Obertonfrequenzen als $2\nu_0$, $3\nu_0$, und $4\nu_0$ annimmt?
- 2) Zeigen Sie, dass die Funktion $\exp(-\beta x^2)$ die Schrödingergleichung für den quantenmechanischen harmonischen Oszillator erfüllt. Welchen Beschränkungen unterliegt β ? Wie groß ist die Energie E ?
- 3) Die Kraftkonstante für das Molekül H^{19}F beträgt 966 Nm^{-1} . Berechnen Sie die Nullpunktenergie der Schwingung dieses Moleküls für ein harmonisches Potenzial. Berechnen Sie die Lichtfrequenz, die nötig ist, um dieses Molekül aus dem Grundzustand in den ersten angeregten Zustand anzuregen.
- 4) Wie groß ist die Geschwindigkeit eines Photoelektrons, das durch Strahlung der Energie 21.22 eV (He-Lampe) aus einem Molekül entfernt wurde, wenn die Ionisierungsenergie des entsprechenden Orbitals 12 eV beträgt?