

Übungsblatt 1

Aufgabe 1 – Umrechnung von Energien

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

- a) 0,15 nm in Hz
- b) 3650 cm^{-1} in μm
- c) 500 nm in eV
- d) $E = k_B \cdot 298\text{ K}$ in cm^{-1}
- e) 400 MHz in m
- f) 25 cm^{-1} in Hz
- g) 1 eV in J/Molekül, J/mol, Hz, m, cm^{-1}

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

Aufgabe 2 – Besetzungszahlen

Die Energie eines bestimmten Übergangs entspricht einem Betrag von $4,005 \cdot 10^{-22}$ J/Molekül. Das betrachtete System befindet sich im thermischen Gleichgewicht. Wie viele von insgesamt 1000 Teilchen besetzen den angeregten Zustand bei den folgenden Temperaturen:

- a) 20 K
- b) 200 K
- c) 2000 K

Wie wäre die Lösung, wenn die Energie des Übergangs 8-mal so hoch wäre?

Aufgabe 3 – Dipolmomente

- a) Welche der folgenden Moleküle haben
- (i) ein Mikrowellen-(Rotations-)spektrum,
 - (ii) ein Infrarot-(Schwingungs-)spektrum
- HBr, Cl₂, H₂O, CH₄, (Z)-1,2-Dichlorethen, (E)-1,2-Dichlorethen
- b) Warum ist CO₂ ein Treibhausgas?
- c) Das permanente Dipolmoment von Toluol beträgt bei Raumtemperatur $\mu = 0,4$ D. Schätzen sie daraus die Dipolmomente von *o*-, *m*- und *p*-Xylol ab.

Aufgabe 4 – Quantenmechanik

Zum Lösen von Rechnungen in der Quantenmechanik ist es notwendig Integrale von Wellenfunktionen zu lösen. Was für eine Erkenntnis erhält man aus der Lösung folgender Integrale, bzw. was ist ihre Bedeutung:

- a) $\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle = 1$
- b) $\langle \Psi_n | \Psi_m \rangle = 0$ für $m \neq n$
- c) $\hat{o} \Psi_n = P \Psi_n$ mit $\hat{o} = \text{Operator}$ & $P = \text{Eigenwert}$

Betrachten sie c) und nehmen sie an das es sich bei \hat{o} um die Vorschrift $\frac{d}{dx}$ handelt.

Welche der folgenden Funktionen ist eine Eigenfunktion und wie lautet der entsprechende Eigenwert:

- i) $\Psi_n(x) = k$
- ii) $\Psi_n(x) = kx$
- iii) $\Psi_n(x) = \cos(kx)$
- iv) $\Psi_n(x) = e^{ikx}$