

Aufgabe 10.1 - 4 Pkt.

Gegeben sei ein Ensemble von gleichartigen Atomen, welche idealisiert durch zwei nicht entartet Energielevel 1 und 2 (mit statistischen Gewichten $g_1 = g_2 = 1$) beschrieben werden. Dabei gelte $E_1 \ll E_2$. Die Atome seien so präpariert, dass zum Zeitpunkt $t = 0$ gelte: $N_1(t = 0) = 0$ und $N_2(t = 0) = N_0$, d.h. alle Atome sollen sich im angeregten Zustand befinden (vollständige Besetzungsinversion). Zum Zeitpunkt $t = 0$ werde eine praktisch monochromatische Laserstrahlung (Dauerstrichlaser) mit der spektralen Energiedichte w_ν mit der Resonanzfrequenz des Übergangs 2 nach 1 eingeschaltet. Die N_0 Atome befinden sich immer im Laserstrahl (Idealisierung!) und ihre Geschwindigkeiten seien extrem klein (ebenfalls Idealisierung).

(a) Die möglichen Übergangswahrscheinlichkeiten und damit die Änderungen der Besetzungszahlen $N_1(t)$ und $N_2(t)$ der beiden Zustände pro Zeiteinheit sind durch die Einsteinkoeffizienten A_{21}, B_{21} und B_{12} gegeben. Stellen Sie Ratengleichungen auf, welche die zeitliche Änderung der Besetzungszahlen $N_1(t)$ und $N_2(t)$ beschreiben.

(b) Berechnen Sie die zeitliche Änderung der Besetzungszahlen $N_1(t)$ und $N_2(t)$.

(c) Das besetzungsinvertierte Atomensemble soll die Laserstrahlung verstärken. Berechnen Sie $\Delta N(t) = N_2(t) - N_1(t)$ und skizzieren Sie diese Lösungsfunktionen (nehmen sie dafür folgende Zahlenwerte: $A = 1, B = 1, w_\nu = 5, N_0 = 1$). Wann tritt Verstärkung auf?

(d) Berechnen Sie ΔN (analytisch) für folgende Fälle: $t = 0, t = \infty, w_\nu = 0, w_\nu$ sehr groß bei $t = \infty$.

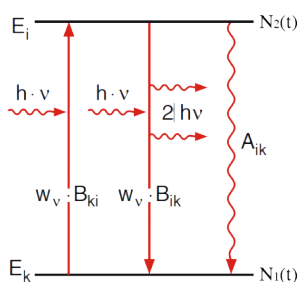


Figure 1: Skizze des Problems.

Lösung(sansatz): (a)

$$\frac{dN_2}{dt} = -N_2(A + w_\nu B) + N_1(w_\nu B)$$

$$\frac{dN_1}{dt} = +N_2(A + w_\nu B) - N_1(w_\nu B)$$

Aufgabe 10.2 - 2 Pkt.

Das Bindungspotential einfacher Moleküle und Festkörper kann oft durch das sogenannte Lennard-Jones Potential (siehe Abbildung) beschrieben werden. Dieses hat die Form

$$U(r) = -Ar^{-n} + Br^{-m}.$$

Der Abstand r_0 entspricht der Bindungslänge, die Energie U_0 der Bindungsenergie (siehe Abbildung).

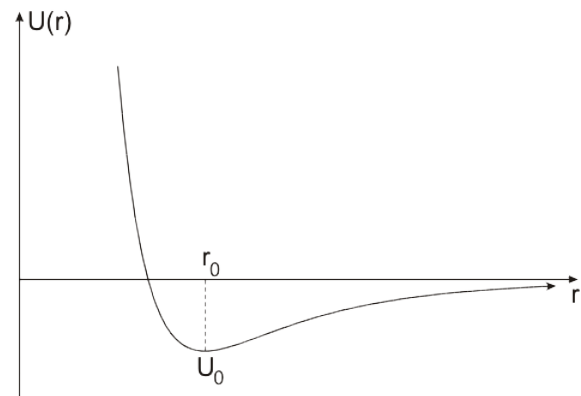


Figure 2: Skizze des Problems.

(a) Man berechne die Konstanten A und B als Funktionen von r_0 und U_0 .

(b) Man approximiere in der Nähe von r_0 das Lennard-Jones-Potential mit Hilfe eines Oszillatorpotentials und gebe die Federkonstante C des Oszillators an.

Lösung: (a) $A = \frac{U_0 \cdot r_0^n}{(\frac{n}{m} - 1)}$, $B = \frac{U_0 \cdot r_0^m}{(1 - \frac{n}{m})}$, (b) $C = -\frac{n \cdot m \cdot U_0}{r_0^2}$

Aufgabe 10.3 - 3 Pkt.

(a) Wie kommt die Lücke im Spektrum bei $1/\lambda = 2885.90 \text{ cm}^{-1}$ zustande? Was ist die Energie des ersten angeregten Vibrationszustandes?

(b) Berechnen Sie den mittleren Kernabstand R_e des HCl-Moleküls.

(c) Bei genauer Betrachtung fällt auf, dass die Absorptions-Peaks eine Substruktur (Dopplepeak) haben. Wie erklären Sie sich dies?

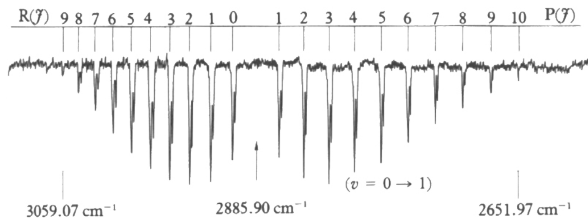


Figure 3: Skizze des Problems.

Lösung: (a) 0.359 eV, (b) 1.3 Å

Aufgabe 10.4 - 2 Pkt.

Es wird die Rotationsschwingungsbande des CO-Moleküls untersucht. Für die erste Linie des P-Zweiges werde die Wellenzahl 2165.4 cm^{-1} , für die erste Linie des R-Zweiges die Wellenzahl 2173.0 cm^{-1} gemessen. Berechnen sie aus diesen Angaben

(a) die Oszillationsfrequenz

(b) das Trägheitsmoment

(c) den Gleichgewichtsabstand des CO-Moleküls.

Hinweis: $h\nu = E_{v',J'} - E_{v'',J''}$, wobei $E_{v,J} = \left(v + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{J(J+1)\hbar^2}{2MR_e^2}$

R-Linien:

$$\Delta v = v' - v'' = +1 \quad \text{und} \quad \Delta J = J' - J'' = +1$$

P-Linien:

$$\Delta v = v' - v'' = +1 \quad \text{und} \quad \Delta J = J' - J'' = -1$$

Lösung: (a) $f = 6.5076 \cdot 10^{13} \text{ Hz}$, (b) $I = 1.47 \cdot 10^{-46} \text{ kgm}^2$, (c) $R_e = 113.6 \text{ pm}$

Aufgabe 10.5 - 3 Pkt.

(a) Beschreiben Sie ein sp -Hybridorbital entlang der z -Achse aus den Wellenfunktionen

$$\psi_{2s} = \frac{1}{2\sqrt{2}a_0^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) \cdot e^{-r/(2a_0)}$$

und

$$\psi_{2p_z} = \frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{3/2}} \left(\frac{r}{a_0}\right) \cdot e^{-r/(2a_0)} \cos\vartheta$$

(b) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeitsdichte bei $r = a_0$?

(c) Wie groß ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im $2s$ - und $2p_z$ -Orbital bei $r = a_0$?

Lösung: (b) Für $r = a_0$ und $\vartheta = 0$:

$$|\psi_{\pm}|^2 = \frac{1}{8}a_0^{-3}e^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{6}}\right]^2 = 0.156 \cdot e^{-1}a_0^{-3}$$

Für $r = a_0$ und $\vartheta = \pi$: $|\psi_{\pm}|^2 =$

$$\frac{1}{8}a_0^{-3}e^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{\sqrt{6}}\right]^2 = 0.0112 \cdot e^{-1}a_0^{-3}$$

(c) $2s$: $\frac{1}{8}e^{-1}a_0^{-3}$, $2p_z$: $\frac{1}{24}e^{-1}a_0^{-3}$