*Besprechung am 16.12.2022*

# Übungsblatt 7

## 1) Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators

Bestimmen Sie bei welcher Auslenkung x die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des HF-Moleküls (k = 966 $\frac{N}{m}$ und μ = 1.5775·$10^{-27}$ kg) im Schwingungsgrundzustand 50 % des maximalen Wertes (x = 0) ist. Betrachten Sie dazu die Wellenfunktionen aus der Lösung der Schrödinger-Gleichung für den harmonischen Oszillator?

## 2) Schwingungsspektroskopie

Die Bindung des Bromwasserstoffs ($^{1}H$ $^{79}Br$) hat eine Kraftkonstante k mit 412 N/m. Nehmen Sie für die Rechnungen das Modell des harmonischen Oszillators an.

a) Berechnen Sie die Energie [$cm^{-1}$], bei der die Schwingung v = 2 → 3 auftritt.
b) Bestimmen Sie die Verschiebung der Absorption, wenn $^{79}Br$ durch $^{81}Br$ ersetzt wird (gehen Sie davon aus, dass die Kraftkonstante unverändert bleibt).

## 3) Morse - Potential

Die Schwingungsübergänge des Moleküls $^{14}N^{16}O$ wurden spektroskopisch untersucht. Für den Übergang [(n = 0) → (n = 1)] wurde eine Wellenzahl von 1876,06 $cm^{-1}$ gefunden, der erste Oberton [(n = 0) → (n = 2)] liegt bei 3724,20 $cm^{-1}$. Betrachten Sie das System als anharmonischen Oszillator, dem ein Morse – Potential mit den Energieniveaus

$$E_n = hc\tilde{\omega}_0\left(\left(n+\frac{1}{2}\right) - \chi_e\left(n+\frac{1}{2}\right)^2\right)$$

zu Grunde liegt.

a) Skizzieren Sie das Morse – Potential. Markieren Sie Nullpunktsenergie, Dissoziationsenergie und den Gleichgewichtsabstand im Schwingungsgrundzustand. Welche Eigenschaften eines realen Moleküls werden im Morse – Potential im Vergleich zum harmonischen Oszillator berücksichtigt?
b) Leiten Sie einen allgemeinen Ausdruck für die Energiedifferenz zwischen einem energetisch höher gelegenem Schwingungsenergieniveau $E_n$ und dem Schwingungsgrundzustand $E_0$ her.
c) Berechnen Sie die Schwingungskonstante $\tilde{\omega}_0$ des anharmonischen Oszillators, die Anharmonizitätskonstante $\chi_e$ und die Nullpunktsschwingungsenergie $E_0$.
d) Berechnen Sie für den energiereichsten gebundenen Zustand des Morsepotentials $n_{max}$ und $E(n_{max})$. Bestimmen Sie daraus die Dissoziationsenergie $D_0$ von NO.