

Lösung zu Übung 5

Aufgabe 1

1.1 Grundzustand: $n_x = n_y = n_z = 1$

1. angeregte Zust.:
 $n_x = 2, n_y = n_z = 1$ oder
 $n_x = 1, n_y = 2, n_z = 1$ oder
 $n_x = n_y = 1, n_z = 2$

$$\Delta E = E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2} (1^2 + 1^2 + 2^2 - 1^2 - 1^2 - 1^2)$$

$$= 3,68 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

1.2 $\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = 540 \text{ nm}$ (grün-gelb)

⇒ Kristall ist rotviolett

Aufgabe 2

2.1 r_e : Kernabstand im Gleichgewicht

D_e : Dissoziationsenergie (klassisch)

2.2 $\lim_{R \rightarrow 0} V(r) = D_e hca (1 - e^{-ar})^2 < \infty$

Eigentlich sollte $\lim_{r \rightarrow 0} V(r) = \infty$ gelten wegen der Coulomb-Abstößung der Kerne. Allerdings gilt z.B. für H_2^+ :

$V(0) = 4500 \text{ kJ mol}^{-1}$ (sehr hoch!)

2.3 $V(r) \approx V(r_e) + V'(r_e)(r - r_e) + \frac{1}{2} V''(r_e)(r - r_e)^2 + \dots$

$V(r) = \dots = 2D_e hca e^{-a(r-r_e)} (1 - e^{-a(r-r_e)})$
 $\Rightarrow V'(r_e) = 0$

$V''(r) = \dots = -2D_e hca^2 e^{-a(r-r_e)} \cdot (1 - 2ae^{-a(r-r_e)})$

$V(r) \approx \frac{1}{2} \cdot \underbrace{2D_e hca^2}_{=f} (r - r_e)^2$

Schwingungsfrequenz:

$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{f}{\mu}} = \dots = 6,59 \cdot 10^{13} \text{ Hz}$