Molekülschwingungen und Molekülspektren

Übungsblatt 1

H. Köppel

Wintersemester 2013/14

1. Bei einem elektronischen Übergang im HCl-Molekül ändere sich die Bindungslänge um 0.15 Å. Wie lautet die spektrale Intensitätsverteilung (Poisson-Parameter) bei harmonischer Schwingung mit gleicher Kraftkonstante im elektronischen Anfangs- und Endzustand ($\hbar\omega = 0.36$ eV)? Wie ändern sich Schwingungsfrequenz und Poisson-Parameter bei Deuterierung?

2. Machen Sie sich die spektrale Intensitätsverteilung für zwei unabhängige harmonische Oszillatoren, die jeweils durch eine Poisson-Verteilung beschrieben werden, klar (Frequenzen ω_1 und ω_2, Poisson-Parameter a_1 und a_2) und skizzieren Sie das Zweimoden-Spektrum für $\omega_1 = 2.5\omega_2$ und $a_1 = 2a_2 = 1$.

3. Skizzieren Sie die Lorentz-Kurve

$$L_a(x) = \frac{a/\pi}{a^2 + x^2}$$

und diskutieren Sie deren Form in Abhängigkeit vom Parameter a. Führen Sie die Analyse auch für deren Stammfunktion

$$T_a(x) = \int_{-\infty}^{x} L_a(x')dx'$$

(wie lautet diese?) durch. Vergleichen Sie die im Grenzfall $a \to 0$ auftretende Singularität bzw. Diskontinuität der Kurvenschar der $L_a(x)$ sowie Ihrer Stammfunktionen $T_a(x)$.

4. Beweisen Sie die Identität

$$g(z,\lambda) = e^{2\lambda z - \lambda^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} H_n(z)$$

für die erzeugende Funktion $g(z,\lambda)$ der Hermite-Polynome $H_n(z)$; diese sind durch die Rechenvorschrift (Rodriguez-Formel)

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} \left(e^{-z^2}\right)$$

definiert. Schreiben Sie dazu $e^{-(z+\lambda)^2}$ als Taylorreihe in λ und formen Sie die Entwicklungskoeffizienten geeignet um (incl. Substitution $\lambda \to -\lambda$ an geeigneter Stelle).