

2.1) Überlegen Sie sich, wo im Alltag und in der Wissenschaft Resonanzen eine Rolle spielen.

Wissenschaft: mechanische (schwingende Systeme), elektrische (s. Radioempfang) & akustische Resonanz, NMR, ESR, Absorption, Umlaufzeiten Planeten/Monde, MRT

Alltag: Musikinstrumente, Stimmgabel, Bauwerke (s. Erdbeben), Schaukel

2.2) Was ist eine harmonische Schwingung?

periodische Bewegung, Auslenkung \sin/\cos -Fkt der Zeit $x(t) = A \sin(\omega t + \varphi)$, Rückstellkraft: proportional zur Auslenkung, entgegengesetzt (Hookesches Gesetz) $F = -kx$, Energie: $E_{\text{ges}} = \text{const.}$, pendelt zwischen E_{pot} & E_{kin}

Amplitude $\omega = 2\pi f$ Kreisfrequenz φ Phasenwinkel

2.3) Rekapitulieren Sie die Eigenschaften der Fouriertransformation! \rightarrow Zerlegung Signal $f(t)$ in Frequenzanteile

• Linear $F(a \cdot f + b \cdot g) = a F(f) + b F(g)$, • Stetig, • Faltung: zwei Fkt. durch Fourier-Transformation in Multiplikation, \mathbb{R} überföhrbar

2.4) Wie hängen Dämpfung und spektrale Breite zusammen?

\rightarrow Abbilden einer Schwingung mit der Zeit \rightarrow endliche spektrale Breite

$$\Delta \nu \cdot \tau = \frac{1}{2\pi} \quad \text{bzw.} \quad \Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar \rightarrow \text{Energie-Zeit-Unschärfe}$$

\rightarrow Dämpfung Signal \Rightarrow Verbreiterung Spektrallinie (keine def. Frequenz mehr)

2.5) Wodurch werden die spektralen Lagen von Resonanzen in der Quantenmechanik festgelegt?

\rightarrow diskret gequantelte Energieniveaus $H\psi = E\psi$ } spektrale Lage $\sim \Delta E = E_{\text{angereg.}} - E_{\text{grund}}$
 \rightarrow Resonanzbedingung $h\nu = \Delta E$ bestimmt spektrale Lage

2.6) Wovon hängt die Stärke einer quantenmechanischen Resonanz ab? \rightarrow Wahrscheinlichkeit Übergang zw. zwei Energiezuständen

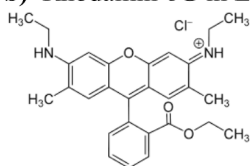
• Übergangsdipolmoment \rightarrow je größer, desto stärker Übergang
 • Auswahlregeln \rightarrow Abhängig von Symmetrie & Typ Übergang

Aufgabe 6

Berechnen Sie für die folgenden Moleküle aus den angegebenen Extinktionskoeffizienten die molekularen Absorptionsquerschnitte und vergleichen Sie diese mit aus den Strukturen abgeschätzten physikalischen Querschnittsflächen der Chromophore. Kommentieren Sie ihr Ergebnis in Bezug auf quantenmechanische Oszillatorstärke (Erlaubtheit des elektronischen Übergangs)

a) Benzol: $\epsilon = 204 \text{ L mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ bei $\lambda = 254 \text{ nm}$

b) Rhodamin 6G in Ethanol: $\epsilon = 1,05 \times 10^5 \text{ L mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ bei $\lambda = 530 \text{ nm}$



$$E(\lambda) = \epsilon(\lambda) c d$$

$$\alpha(\lambda) = (\ln(10) \epsilon(\lambda) c) \quad \alpha: \text{Absorptionskoeffizient}$$

$$\alpha = N \sigma \quad N: \text{Teilchendichte}$$

$$N = \frac{c \cdot N_A}{1000} \quad \sigma: \text{Absorptionsquerschnitt}$$

$$\rightarrow \sigma(\lambda) = \frac{\alpha(\lambda)}{N} = \epsilon(\lambda) \frac{\ln(10) \cdot 1000}{N_A} = 3,823 \cdot 10^{-21}$$

$$a) \sigma(254 \text{ nm}) = 3,823 \cdot 10^{-21} \cdot 204 \frac{\text{L}}{\text{mol} \cdot \text{cm}} = 7,80 \cdot 10^{-18} \frac{\text{cm}^2}{\text{molekül}} \rightarrow \text{kleines } F: \text{schwacher Übergang } F \sim 10^{-3}$$

$$\text{physik. Querschnittsfläche } A_{\text{geo}} \approx L \times w \quad L_{\text{Benzol}} \sim 0,7 - 1 \text{ nm}, w_{\text{Benzol}} \sim 0,7 \text{ nm} \rightarrow A_{\text{geo}} \sim 0,5 - 0,7 \text{ nm}^2 \approx 0,5 - 0,7 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2$$

$$\sigma_{\text{Benzol}} \sim A_{\text{geo, Benzol}} \cdot 10^{-4}$$

$$b) \sigma(530 \text{ nm}) = 3,823 \cdot 10^{-21} \cdot 1,05 \cdot 10^5 \frac{\text{L}}{\text{mol} \cdot \text{cm}} = 4,01 \cdot 10^{-16} \frac{\text{cm}^2}{\text{molekül}} \quad F \sim 0,6 - 1,2 \rightarrow \text{starker Übergang}$$

$$L_{\text{Rhodamin}} \sim 1,5 \text{ nm} \quad w_{\text{Rhodamin}} \sim 0,5 - 0,6 \text{ nm} \rightarrow A_{\text{geo}} \sim 0,75 - 0,90 \text{ nm}^2 \approx 7,5 - 9,0 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$$

$$\sigma_{\text{Rhodamin}} \sim A_{\text{geo, Rhodamin}} \cdot 10$$

Aufgabe 7

- a) Zeigen Sie den Weg zur Lösung der Differentialgleichung eines gedämpften harmonischen Oszillators (viskos gedämpftes Federpendel)

$$\frac{d^2x}{dt^2} + 2\rho \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 \cdot x = 0$$

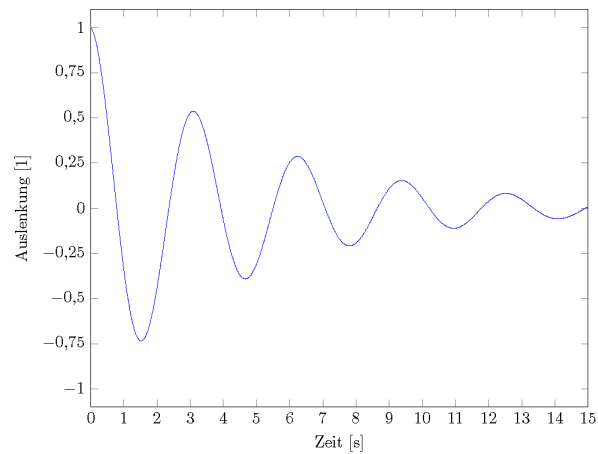
für den Fall der schwachen Dämpfung. Hinweise zur Lösung:

Lösungsfunktion: $x(t) = x_0 \cdot e^{-\rho \cdot t} \cdot \cos(\omega_s \cdot t)$. Bestimmen Sie die Konstante ω_s . Weg: Bestimmen Sie alle Ableitungen für die obige Dgl.

- b) Stellen Sie die Lösung

$$x(t) = x_0 \cdot e^{-\rho \cdot t} \cdot \cos(\sqrt{\omega_0^2 - \rho^2} \cdot t) = x_0 \cdot e^{-\rho \cdot t} \cdot \cos(\omega_s \cdot t)$$

im Zeitbereich von 0 bis 15 s für $\omega_0 = 2 \text{ s}^{-1}$, $\rho = 0,2 \text{ s}^{-1}$ und $x_0 = 1$ sowie die einhüllende Exponentialfunktion graphisch dar (z.B. mit Excel).



a)

$$\frac{d^2}{dt^2} x + 2\rho \frac{d}{dt} x + \omega_0^2 x = 0 \quad x(t) = x_0 e^{-\rho t} \cos(\omega_s t)$$

$$\frac{d}{dt} x = x_0 \frac{d}{dt} (e^{-\rho t} \cos(\omega_s t)) = x_0 (-e^{-\rho t} \rho \cos(\omega_s t) - e^{-\rho t} \sin(\omega_s t) \omega_s) = -x_0 e^{-\rho t} (\rho \cos(\omega_s t) + \sin(\omega_s t) \omega_s)$$

$$\frac{d^2}{dt^2} x = \frac{d}{dt} (-x_0 e^{-\rho t} (\rho \cos(\omega_s t) + \sin(\omega_s t) \omega_s)) = \frac{d}{dt} (-x_0 e^{-\rho t} \rho \cos(\omega_s t)) + \frac{d}{dt} (-x_0 e^{-\rho t} \sin(\omega_s t) \omega_s)$$

$$\frac{d}{dt} (-x_0 e^{-\rho t} \rho \cos(\omega_s t)) = -x_0 \rho \frac{d}{dt} (e^{-\rho t} \cos(\omega_s t)) = -x_0 \rho (-e^{-\rho t} \rho \cos(\omega_s t) - e^{-\rho t} \sin(\omega_s t) \omega_s) = x_0 \rho e^{-\rho t} (\rho \cos(\omega_s t) + \sin(\omega_s t) \omega_s)$$

$$\frac{d}{dt} (-x_0 e^{-\rho t} \sin(\omega_s t) \omega_s) = -x_0 \omega_s \frac{d}{dt} (e^{-\rho t} \sin(\omega_s t)) = -x_0 \omega_s (-e^{-\rho t} \rho \sin(\omega_s t) + e^{-\rho t} \cos(\omega_s t) \omega_s) = x_0 \omega_s e^{-\rho t} (\rho \sin(\omega_s t) - \cos(\omega_s t) \omega_s)$$

$$\frac{d^2}{dt^2} x = x_0 \rho e^{-\rho t} (\rho \cos(\omega_s t) + \sin(\omega_s t) \omega_s) + x_0 \omega_s e^{-\rho t} (\rho \sin(\omega_s t) - \cos(\omega_s t) \omega_s) = x_0 e^{-\rho t} (\rho^2 \cos(\omega_s t) + \rho \omega_s \sin(\omega_s t) + \rho \omega_s \sin(\omega_s t) - \omega_s^2 \cos(\omega_s t))$$

$$= x_0 e^{-\rho t} ((\rho^2 - \omega_s^2) \cos(\omega_s t) + 2\rho \omega_s \sin(\omega_s t))$$

$$\Rightarrow x_0 e^{-\rho t} ((\rho^2 - \omega_s^2) \cos(\omega_s t) + 2\rho \omega_s \sin(\omega_s t)) - 2\rho^2 \cos(\omega_s t) - 2\rho \omega_s \sin(\omega_s t) + \omega_0^2 \cos(\omega_s t) = 0$$

$$x_0 e^{-\rho t} \cos(\omega_s t) (\rho^2 - \omega_s^2 - 2\rho^2 + \omega_0^2) = \underbrace{x_0 e^{-\rho t} \cos(\omega_s t)}_{\neq 0} \underbrace{(\rho^2 - \omega_s^2 - 2\rho^2 + \omega_0^2)}_{=0 \text{ wenn } \omega_s = \frac{\pi}{2t} \quad =0 \text{ wenn } \omega_s = \sqrt{\omega_0^2 - \rho^2}} = 0$$

Aufgabe 8

Die Fourier-Transformation ist ein wichtiges Werkzeug in der Spektroskopie und wir werden sie auch in der Vorlesung anwenden. Sie kann z.B. dazu benutzt werden, ein zeitabhängiges Signal $x(t)$ in ein Spektrum $\tilde{x}(\omega)$ mit den Frequenzen ω zu transformieren. Dabei entsprechen charakteristische Periodizitäten jeweils einer Frequenz.

$$\tilde{x}(\omega) = F(x(t)) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{-i\omega t} dt$$

Zur Einstimmung und Auffrischung der Kenntnisse aus der Mathe-Vorlesung veranschaulichen Sie sich bitte die Bedeutung dieser Funktion anhand des folgenden Problems:

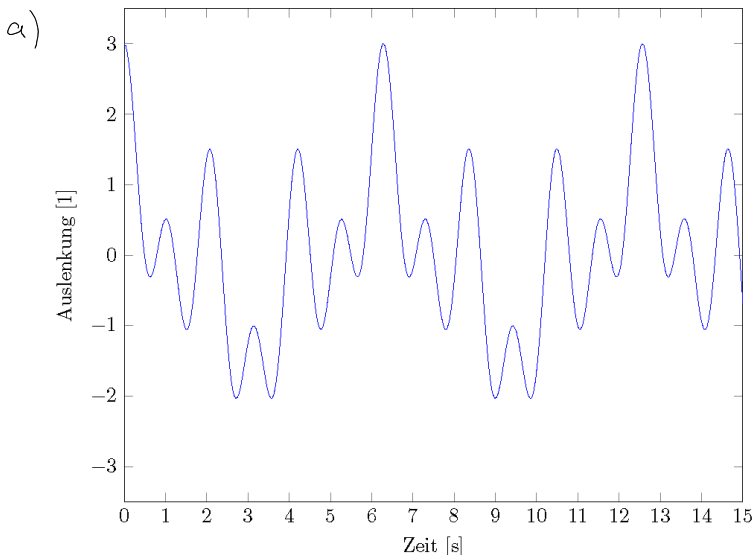
Gegeben ist folgende zeitabhängige Auslenkung $x(t)$ eines schwingungsfähigen Systems:

$$x(t) = \cos(s^{-1} t) + \cos(3 s^{-1} t) + \cos(6 s^{-1} t).$$

- a) Stellen Sie die Funktion graphisch dar (z.B. mit Excel).

- b) Geben Sie die Fouriertransformierte (Realteil) der Funktion an. Hierbei ist keine Rechnung nötig.

- c) Welche Einheit hat die Fouriertransformierte?



b) $\omega = \{1; 3; 6\}$

c) $[s^{-1}]$

Aufgabe 9

Formulieren Sie das Lambert Beer'sche Gesetz mit dem molaren dekadischen Extinktionskoeffizienten ϵ [$\text{cm}^{-1} \text{M}^{-1}$] als stoffspezifische Konstante. Bei einer in der Physik häufig benutzten Variante dieses Gesetzes wird der Absorptionsquerschnitt σ [cm^2] eingesetzt. Bitte geben Sie diese Formulierung an. Welche anschauliche Bedeutung hat σ (1 Satz)? Wie werden ϵ und σ ineinander umgerechnet?

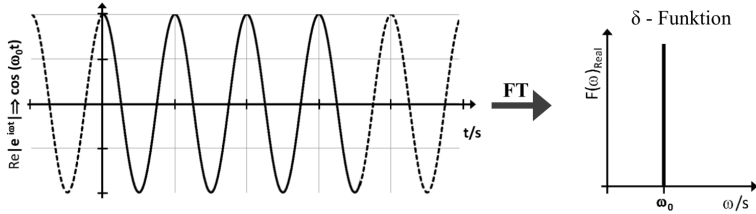
$$E(\lambda) = \epsilon(\lambda) \cdot c \cdot d = \sigma \cdot N \cdot d \quad \Rightarrow \quad \sigma = \frac{\epsilon \cdot c}{N}; \quad \epsilon = \frac{\sigma \cdot N}{c}$$

Absorptionsquerschnitt Teilchendichte

Absorptionsquerschnitt: Fläche, auf die das Licht trifft & absorbiert wird

Aufgabe 10

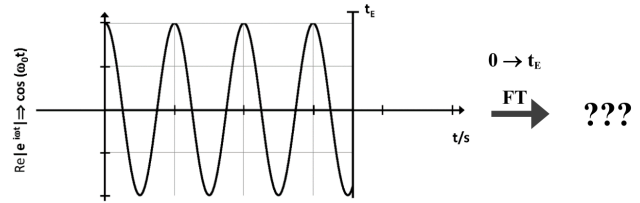
Eine elektromagnetische Welle der Kreisfrequenz ω_0 , $A(t) = A_0 \cdot e^{i\omega_0 t}$, ohne zeitlichen Anfang und Ende hätte ein exakt monochromatisches Spektrum (δ -Funktion).



Da es eine solche Welle nicht gibt, sind streng genommen alle Wellen polychromatisch. Dies lässt sich über Fouriertransformation zeigen. Hierzu betrachten wir das zeitliche Verhalten einer Welle, die nur im Intervall $0 \leq t \leq t_E$ ungleich null ist (siehe Zeichnung).

$$\begin{aligned} \tilde{X}(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{t_E} A(t) e^{-i\omega t} dt \\ \tilde{X}(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{t_E} A_0 e^{i\omega_0 t} e^{-i\omega t} dt = \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{t_E} e^{i(\omega_0 - \omega)t} dt \\ &= \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{i(\omega_0 - \omega)} (e^{i(\omega_0 - \omega)t_E} - 1) = \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{i(\omega_0 - \omega)} (e^{i\omega_0 t_E} - 1) \\ &= \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{i(\omega_0 - \omega)} (\cos((\omega_0 - \omega)t_E) + i \sin((\omega_0 - \omega)t_E) - 1) \\ &= \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{i(\omega_0 - \omega)} (\cos((\omega_0 - \omega)t_E) - 1) + \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin((\omega_0 - \omega)t_E)}{\omega_0 - \omega} \\ &= \underbrace{\frac{A_0}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{i(\omega_0 - \omega)} (\cos((\omega_0 - \omega)t_E) - 1)}_{\text{Imaginärteil}} + \underbrace{\frac{A_0}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin((\omega_0 - \omega)t_E)}{\omega_0 - \omega}}_{\text{Realteil}} \end{aligned}$$

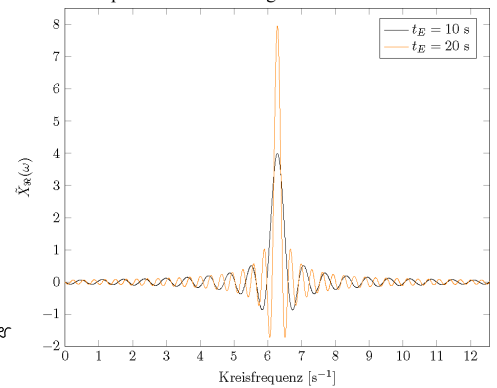
→ Erhöhung Zeitintervall → geringere Periodendauer
→ höhere Frequenz
→ größere Amplitude



Errechnen Sie die Fouriertransformation gemäß

$$\tilde{X}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{t_E} A(t) \cdot e^{-i\omega t} dt$$

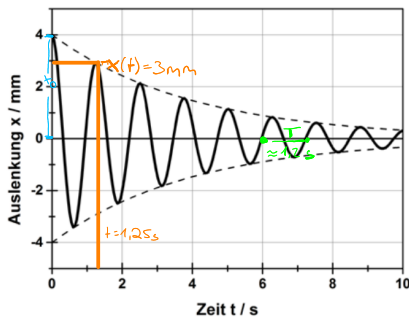
Separieren Sie den Realteil der Fouriertransformierten, der eine Funktion von ω und t_E ist. Nutzen Sie dazu $e^{ix} = \cos(x) + i \cdot \sin(x)$. Stellen Sie das Ergebnis für $\omega_0 = 2\pi \text{ s}^{-1}$, $A_0 = 1$ und $t_E = 10 \text{ s}$ bzw. 20 s graphisch dar. Interpretieren Sie das Ergebnis.



Aufgabe 11

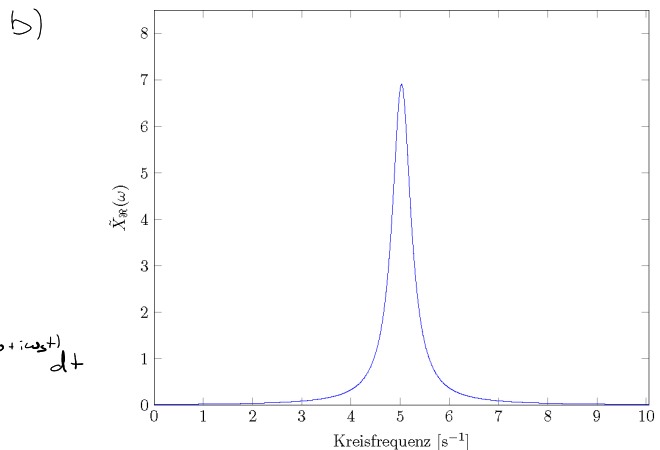
Das Diagramm zeigt den zeitlichen Verlauf der Auslenkung $x(t)$ bei einer gedämpften Schwingung.

- a) Lesen Sie aus dem Diagramm folgende Größen ab: Amplitude x_0 , Kreisfrequenz ω_s , Dämpfungskonstante ρ , Kreisfrequenz der ungedämpften Schwingung ω_0 .
- b) Zeichnen Sie ein Diagramm des Realteils der Fourier-Transformierten von $x(t)$ (korrekter Verlauf der Funktion, keine Skizze).
- c) Mit welcher Zeitkonstante klingt die Gesamtenergie des Oszillators im Mittel ab? Zu welchen Zeitpunkten ist die Abnahme der Energie besonders groß?



a) $x_0 = 4 \text{ mm}$
 $\omega_s = \frac{2\pi}{T} = \frac{2\pi}{1.25} = 5.024 \text{ s}^{-1}$
 $\rho = -\frac{\ln(x(t)/x_0)}{t} = -\frac{\ln(3/4)}{1.25} = 0.230 \text{ s}^{-1}$
 $\omega_0 = \sqrt{\omega_s^2 - \rho^2} = \sqrt{(5.024 \text{ s}^{-1})^2 - (0.230 \text{ s}^{-1})^2} = 5.015 \text{ s}^{-1}$

b) $x(t) = x_0 e^{-\rho t} \cos(\omega_s t)$
 $\tilde{X}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty x(t) \cdot e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty x_0 e^{-\rho t} \cos(\omega_s t) e^{-i\omega t} dt$
 $= \frac{x_0}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty e^{-\rho t} \frac{1}{2} (e^{-i\omega_s t} + e^{i\omega_s t}) e^{-i\omega t} dt = \frac{x_0}{2\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty e^{-\rho t} (e^{-(\rho + i(\omega - \omega_s))t} + e^{-(\rho + i(\omega + \omega_s))t}) dt$
 $= \frac{x_0}{2\sqrt{2\pi}} \left[\frac{1}{\rho + i(\omega - \omega_s)} + \frac{1}{\rho + i(\omega + \omega_s)} \right] = \frac{x_0}{2\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\rho + i\omega}$
 $= \frac{x_0}{2\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\rho + i\omega} \left(\frac{\rho - i\omega + i\omega_s}{\rho - i\omega + i\omega_s} \right) = \frac{x_0}{2\sqrt{2\pi}} \frac{\rho - i\omega + i\omega_s}{\rho^2 - (\omega - \omega_s)^2}$
 $\tilde{X}_R(\omega) = \frac{x_0}{2\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{\rho}{\rho^2 - (\omega - \omega_s)^2}$



c) $2\rho = \frac{1}{\tau} \rightarrow \tau = \frac{1}{2\rho} = \frac{1}{2 \cdot 0.230 \text{ s}^{-1}} = 2.17 \text{ s}$
 Abnahme Energie maximal an Wendepunkt