

Abgabe am 17.11.2017 in der jeweiligen Übungsgruppe

Besprechung am 24.11.2017, 11-12/12-13 h

## Übungsblatt 4

### Aufgabe 1 (Harmonischer Oszillator)

Für  $HI$  kann die Schwingung der Atome um ihre Gleichgewichtposition mit dem harmonischen Oszillator mit der Masse  $m_H$  und der Kraftkonstante  $k = 313.8 \text{ Nm}^{-1}$  modelliert werden. (Wegen dem sehr großen Unterschied zwischen den Massen von  $H$ - und  $I$ -Atomen wird hier der Beitrag von  $I$ -Atom zur reduzierten Schwingungsmasse vernachlässigt. Es gilt daher  $\mu = m_H$ .) Die Gleichgewichtbindungslänge von  $HI$  beträgt  $161 \text{ pm}$ . Zeichnen Sie die Bindungslängenwahrscheinlichkeitsverteilung für die Zustände mit den Quantenzahlen a)  $n = 0$ , b)  $n = 1$  und c)  $n = 2$ . Bestimmen Sie die Nullpunkte für diese Verteilungen.

### Aufgabe 2 (Schwingung zweiatomiger Moleküle)

Berechnen Sie die reduzierte Schwingungsmasse für die folgenden Moleküle:

- a)  $^1\text{H}_2$ , b)  $^1\text{H}^{19}\text{F}$ , c)  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ , d)  $^1\text{H}^{81}\text{Br}$ , e)  $^1\text{H}^{127}\text{I}$ .

Die Schwingungswellenzahlen von diesen Molekülen betragen:

- a)  $4400.39 \text{ cm}^{-1}$ , b)  $4138.32 \text{ cm}^{-1}$ , c)  $2990.95 \text{ cm}^{-1}$ , d)  $2648.98 \text{ cm}^{-1}$ , e)  $2308.09 \text{ cm}^{-1}$ .

Berechnen Sie für die oben genannten Moleküle die Bindungskraftkonstante  $k$ . Berechnen Sie zudem die Schwingungswellenzahlen für die Moleküle  $^2\text{H}_2$ ,  $^2\text{H}^{127}\text{I}$  und  $^1\text{H}^{129}\text{I}$ .

### Aufgabe 3 (Morse-Potential)

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

$$E_n = hc\tilde{\nu}_e \left( \left( n + \frac{1}{2} \right) - x_e \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 \right)$$

zu Grunde liegt:

- Skizzieren Sie das Morse-Potential. Markieren Sie Nullpunktenergie, Dissoziationsenergie und den Gleichgewichtsabstand im Schwingungsgrundzustand. Welche Eigenschaften eines realen Moleküls werden im Morse-Potential im Vergleich zum harmonischen Oszillator berücksichtigt?
- Leiten Sie einen allgemeinen Ausdruck für die Energiedifferenz zwischen einem energetisch höher gelegenen Schwingungsenergieniveau  $E_n$  und dem Schwingungsgrundzustand  $E_0$  her.
- Berechnen Sie die Schwingungskonstante  $\tilde{\nu}_e$  des anharmonischen Oszillators, die Anharmonizitätskonstante  $x_e$ , die Nullpunktsschwingungsenergie  $E_0$  und die Kraftkonstante  $k$  der Bindung.
- Berechnen Sie für den energiereichsten gebundenen Zustand des Morsepotentials  $n_{max}$  und  $E(n_{max})$ . Bestimmen Sie daraus die Dissoziationsenergie  $D_0$  von  $\text{NO}$ .