

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 Gleichgewichtsbindungslänge von HI beträgt 161 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 cm^{-1} , b) 4138.32 cm^{-1} , c) 2990.95 cm^{-1} , d) 2648.98 cm^{-1} , e) 2308.09 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 NO .