Abgabe am 01.12.2017 in der jeweiligen Übungsgruppe

Besprechung am 08.12.2017, 11-12/12-13 h

Übungsblatt 6

Aufgabe 1 (Grundschwingung von HBr)
Die Grundschwingung von $H^{75}Br$ liegt bei $\nu_0 = 2.63 * 10^3\ cm^{-1}$ und der Gleichgewichtsabstand beträgt $R_0 = 141\ pm$. Bestimmen Sie den quadratischen Mittelwert der Auslenkung $\sqrt{\langle x^2 \rangle}$ des Moleküls im Grundzustand ($\nu = 0$).

Wie groß ist damit die prozentuale Variation des Abstandes R_0 während der Schwingung?

Aufgabe 2 (Dissoziationsenergie von HCl)
Die Schwingungsenergieniveaus von HCl liegen bei folgenden Wellenzahlen $\tilde{\nu}_0 = 1481.86\ cm^{-1}$, $\tilde{\nu}_1 = 4367.50\ cm^{-1}$, $\tilde{\nu}_2 = 7149{,}04\ cm^{-1}$, $\tilde{\nu}_3 = 9826.48\ cm^{-1}$, $\tilde{\nu}_4 = 12399.80\ cm^{-1}$.

Wie groß ist die Dissoziationsenergie (in eV) dieses Moleküls?

Hinweis: Nehmen Sie an, dass das Molekül durch ein Morsepotential beschrieben werden kann und verwenden Sie folgenden Ausdruck für die Energien:

$$\mathrm{E}_\nu = \left(\upsilon + \frac{1}{2}\right) \cdot h \cdot \nu_{vib} - \left(\upsilon + \frac{1}{2}\right)^2 \cdot h \cdot \nu_{vib} \cdot \chi_e$$

Wobei χ_e die Anharmonizitätskonstante ist.

Aufgabe 3 (Schwingungsfrequenzen von Wasser)

Um für das nicht-lineare Wassermolekül die Normalmoden zu berechnen, wählt man geschickter Weise der Symmetrie des Moleküls an, gepasste Koordinaten $(\delta r_1, \delta r_2, r_e \delta\alpha)$, wobei δr_1 und δr_2 jeweils die Änderung der Bindungsabstände zwischen H und O bedeutet und $\delta\alpha$ die Änderung des Winkels zwischen H-O-H ist. Der Gleichgewichtsbindungsabstand ist $r_e = 98\ pm$ und der Gleichgewichtswinkel $\alpha_e = 104.5^o$.

Das Potential V kann in diesen Koordinaten beschrieben werden als:

$$V = \frac{k_r}{2}(\delta r_1^2 + \delta r_2^2) + \frac{k_\alpha}{2}(r_e \delta\alpha)^2 + k_{rr}\delta r_1 \delta r_2 + k_{r\alpha} r_e \delta\alpha(\delta r_1 + \delta r_2)$$

In diesem neuen Koordinatensystem können die Schwingungseigenfrequenzen aus den drei Eigenwerten λ_i der Matrix $\boldsymbol{K} = \boldsymbol{GF}$ bestimmt werden (mit $\omega_i^2 = -\lambda_i$). Geben Sie die drei Schwingungsfrequenzen von Wasser (in Wellenzahlen cm^{-1}) an.

Abgabe am 01.12.2017 in der jeweiligen Übungsgruppe

Besprechung am 08.12.2017, 11-12/12-13 h

$$\boldsymbol{F} = \begin{bmatrix} k_r & k_{rr} & k_{r\alpha} \\ k_{rr} & k_r & k_{r\alpha} \\ k_{r\alpha} & k_{r\alpha} & k_\alpha \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{G} = -\begin{bmatrix} \mu_H + \mu_O & \mu_O\, cos\alpha_e & -\mu_O\, sin\alpha_e \\ \mu_O\, cos\alpha_e & \mu_H + \mu_O & -\mu_O\, sin\alpha_e \\ -\mu_O\, sin\alpha_e & -\mu_O\, sin\alpha_e & 2\mu_H + 2\mu_O(1 - cos\alpha_e) \end{bmatrix}$$

$$k_r = 84.5\, nN\text{Å}^{-1};\ k_{rr} = -0.9\, nN\text{Å}^{-1};\ k_{r\alpha} = 2.6\, nN\text{Å}^{-1};\ k_\alpha = 7.6\, nN\text{Å}^{-1}$$

$$\mu_H = 0.992\, u^{-1};\ \ \mu_O = 0.0625\, u^{-1};\ u = 1.66 * 10^{-27}\, kg;$$