

Übungsblatt 6

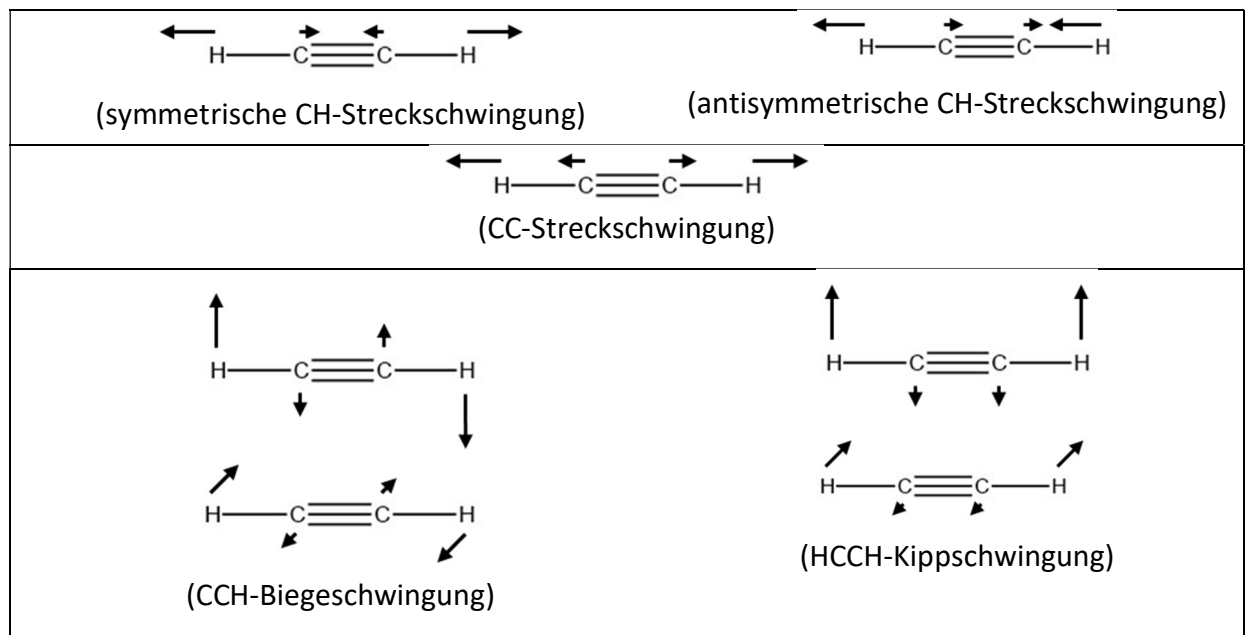
1) Anharmonischer Oszillator

Das Infrarotspektrum von $^1\text{H}^{127}\text{I}$ zeigt ein Signal für die Grundschiwingung bei $\tilde{\nu}_{10} = 2230 \text{ cm}^{-1}$ und ein zweites Signal (erster Oberton) bei $\tilde{\nu}_{20} = 4380 \text{ cm}^{-1}$. Nehmen Sie das Modell des Morse-Potentials für die Rechnungen an.

- Berechnen Sie die Anharmonizitätskonstante χ_e
- Berechnen Sie die Dissoziationsenergie E_{Diss} [cm^{-1}] des Moleküls, wobei die Tiefe des Potentials gegeben ist als $D_e = \frac{\hbar\omega_0}{4\chi_e}$.
- Berechnen Sie, bei welchem Wert der Quantenzahl v das Molekül dissoziiert. (*Hinweis:* Sie erhalten eine quadratische Gleichung, die sich am einfachsten nach $v+\frac{1}{2}$ auflösen lässt.)

2) Normalschwingungen von Acetylen

Welche der folgenden Normalschwingungen von Acetylen sind Infrarot-aktiv und welche sind Raman-aktiv?



1) Freiheitsgrade

Bestimmen Sie die Anzahl der Freiheitsgrade der folgenden Moleküle und geben Sie an, wie viele davon auf Translation, Rotation und Schwingung entfallen.

- He
- N_2
- H_2O
- CO_2
- CH_4