

1. Atomabstand und Schwingungsfrequenz in Molekülen*

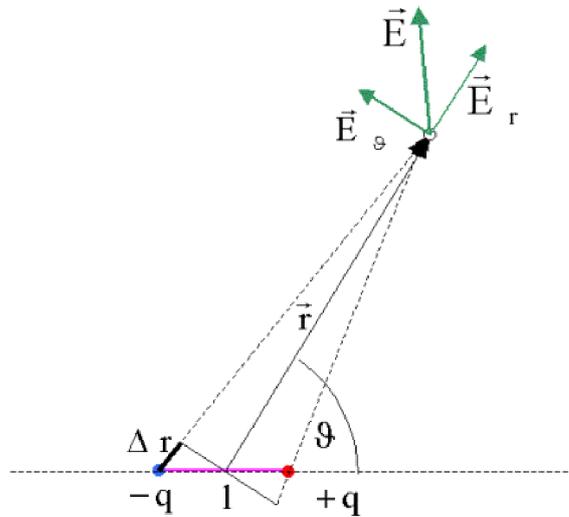
1.1 Schwingungen

- (a) Die charakteristische Rotationsenergie B des N_2 -Moleküls beträgt $2,48 \cdot 10^{-4}$ eV. Berechne damit den Abstand der Stickstoffatome im Molekül.
- (b) Der Abstand der Atome im O_2 -Molekül ist in Wirklichkeit etwas grösser als der in Beispiel 38.3 in Tipler angenommene Wert von 0,1 nm, und die charakteristische Rotationsenergie beträgt nicht $2,59 \cdot 10^{-4}$ eV, sondern $1,78 \cdot 10^{-4}$ eV. Berechne damit den Abstand der Sauerstoffatome im Molekül.
- (c) Die Kraftkonstante des HF-Moleküls beträgt 970 N/m. Welche Schwingungsfrequenz hat das HF-Molekül?

1.2 Rotationen

- a) Kann beim He-Gas ein Rotationsspektrum gemessen werden? Erkläre!
- b) Wie gross ist die mittlere kinetische Energie (in Vielfachen von kT) pro Sauerstoffmolekül O_2 , wenn neben den translatorischen auch die rotatorischen Freiheitsgrade angeregt sind?
- c) Ist ein Übergang vom dritten Rotationsniveau ins erste möglich? Argumentiere!
- d) Um wieviel unterscheiden sich die Wellenlängen der Übergänge vom zweiten ins erste Rotationsniveau (reiner Rotationsübergang) beim $C^{12}O$ und beim $C^{14}O$ Molekül? Beachte, C^{12} ist das normale Kohlenstoffatom, während C^{14} ein Kohlenstoff Isotop mit zwei zusätzlichen Neutronen ist. Benutze dazu den Gleichgewichtsabstand $r_{CO} = 0.113$ nm sowie die molaren Massen von $M_O = 16$ g/Mol und $M_{C^{12}} = 12$ g/Mol.

2. Van der Waals Wechselwirkung



Das elektrische Potential einer Ladung q ist gegeben durch

$$\phi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{r}. \quad (1)$$

- (a) Berechne das Potential $\phi(r, \theta)$ eines Dipols $\vec{p} = q \cdot \vec{l}$ unter Verwendung der Näherung $l \ll r$, bzw. $\Delta r \ll r$.
- (b) Berechne die Radialkomponente, die Azimutalkomponente und den Betrag des elektrischen Feldes $\vec{E}(r, \theta)$ eines Dipols mittels

$$\vec{E}(r, \theta) = -\vec{\nabla}\phi(r, \theta) = -\frac{\partial\phi}{\partial r}\vec{e}_r - \frac{1}{r}\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\vec{e}_\theta. \quad (2)$$

Ein Atom mit Dipol \vec{p}_1 kann in einem anderen Atom einen Dipol $\vec{p}_2 = \alpha E_1$ induzieren, wobei α die Polarisierbarkeit des Atoms, und r die Distanz zwischen beiden Atomen ist.

- (c) Zeige unter Verwendung von $U = -\vec{p} \cdot \vec{E}$ wie die Wechselwirkungsenergie U_{VdW} zwischen \vec{p}_1 und \vec{p}_2 von r abhängt.

3. Morse-Potential

Die Bindung zwei-atomiger Moleküle kann gut durch das Morse-Potential beschrieben werden:

$$V(x) = D_e \cdot \left[1 - e^{-a(x-r_0)}\right]^2 - D_e \quad .$$

Benutze:

$$M_C = 12 \text{ g/Mol}, M_{O_2} = 16 \text{ g/Mol}, D_e = 11.226 \text{ eV}, a = 3.257 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}, r_0 = 113 \text{ pm}$$

- a) Zeige, dass r_0 der Gleichgewichtsabstand ist! Wie tief ist das Potential Minimum?
- b) Berechne $V(x)$ für $x \rightarrow \infty$.
- c) Berechne die Federkonstante des Moleküls im Gleichgewichtszustand. Mache dazu eine Taylorentwicklung des Morse-Potentials um $x = r_0$ und vergleiche mit dem harmonischen Potential.
- d) Berechne die Schwingungsfrequenz des CO-Moleküls im Grundzustand.
- e) Die Energieniveaus des Morse-Potentials können wie folgt berechnet werden:
 $E_{n,Morse} = E_{n,harmonisch} - \frac{[h\nu_0(n+1/2)]^2}{4D_e}$. Bestimme die Quantenzahl n bei welcher $E_{n,Morse} < E_{n-1,harmonisch}$.