

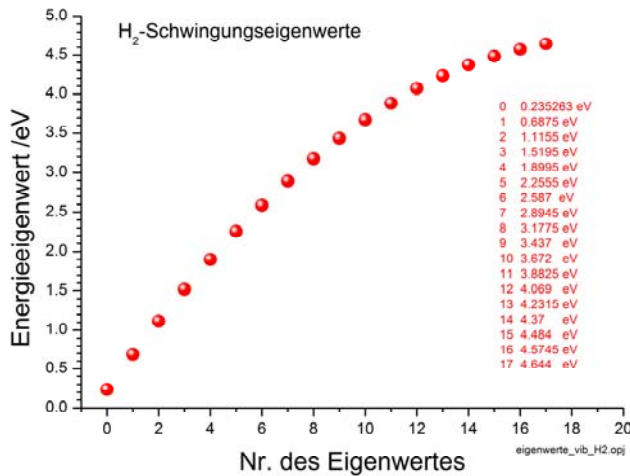
Übungsblatt 3: Termine: 15./ 17./ 18. November (24 P)

Aufgabe 5: (6P)

Aus der Lösung der Schrödinger-gleichung für die Kernschwingung des H₂-Moleküls ergeben sich folgende 18 Eigenwerte (in eV):

v	0	1	2	3	4	5	6	7	8
E _{vib} /eV	0.23526	0.6875	1.1155	1.5195	1.8995	2.2555	2.587	2.8945	3.1775
v	9	10	11	12	13	14	15	16	17
E _{vib} /eV	3.437	3.672	3.8825	4.069	4.2315	4.37	4.484	4.5745	4.644

Die Quantenzahl v numeriert die Schwingungsniveaus durch.



Man erkennt deutlich den nichtlinearen Zusammenhang zwischen der Quantenzahl v und den Eigenwerten.

Für eine Morsepotential erwartet man theoretisch den Zusammenhang:

$$E_{\text{vib}}(v) = \hbar\omega \cdot \left(v + \frac{1}{2}\right) - \frac{(\hbar\omega)^2}{4 \cdot E_d} \cdot \left(v + \frac{1}{2}\right)^2$$

a) Bestimmen Sie aus den Daten mit einer geeigneten nichtlinearen Anpassung die besten Werte für $\hbar\omega$ und E_d . (4P)

b) Stellen Sie diese Anpassung an die Daten in einem Diagramm quantitativ dar. (4P)

Aufgabe 6: Rotationsspektren und Isotopieeffekt (8 Punkte)

(a) Bestimmen Sie für die beiden Isotopomere $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ (Wasserstoffatom ^1H und Chloratom des Isotops mit rel. Massenzahl 35) und $^1\text{H}^{37}\text{Cl}$ die Frequenzen und zugehörigen Wellenlängen für die Rotationsübergänge

$J = 0 \rightarrow J = 1$ und $J = 4 \rightarrow J = 5$. Der Atomabstand der H-Cl-Bindung beträgt

$R = 0.12745 \text{ nm}$. (4 Punkte)

(b) Wie groß ist der Frequenzshift zwischen den jeweils gleichartigen Übergängen der o.g. Isomere des HCl-Moleküls? (2 Punkte)

(c) Wie groß ist die Rotationsenergie im Zustand $J = 5$ für H^{35}Cl und H^{37}Cl ?

Geben Sie das Ergebnis von $E_{\text{rot}} = hc \tilde{\nu}$ in $[\text{cm}^{-1}]$ sowie E_{rot} in $[\text{eV}]$ an. (2 Punkte)

Aufgabe 7: Rotationsspektrum (8P)

a) Das Rotationsspektrum des zweiatomigen Moleküls $^{79}\text{Br}^{19}\text{F}$ zeigt in Absorption eine Serie nahezu äquidistanter Linien im relativen Abstand von 0.71433 cm^{-1} . Wie groß sind dann die Rotationskonstante B , das Trägheitsmoment I und die Bindungslänge R_e ? (2P)

b) Bestimmen Sie die spektrale Lage des Überganges $J=9 \rightarrow J = 10$ in Energieeinheiten und Wellenzahlen. (2P)

c) Welcher Rotationsübergang besitzt bei $T=298\text{K}$ die größte Intensität? (2P)

(Nehmen Sie thermisches Gleichgewicht an, und nehmen Sie an, dass die Übergangsmatrixelemente nicht explizit von J abhängen). (4P)