

Übungsblatt 4: Termine: 22./ 24./ 25. November (18 P)

Aufgabe 8: (5P)

Das Jodmolekül  $I_2$  hat folgende Werte der Schwingung:  $\bar{\nu}_e = 215 \text{ cm}^{-1}$  und die Anharmonizitäts-Konstante ist  $\chi_e = 0.003$ .

$$E_{\text{vib}}(v) = hc \cdot \nu_e \cdot (v + \frac{1}{2}) - \chi_e \cdot hc \cdot \nu_e \cdot (v + \frac{1}{2})^2$$

Bestimmen Sie die das Intensitätsverhältnis der Schwingungsübergänge  $v = 1 \rightarrow 2$

und  $v = 0 \rightarrow 1$  bei den beiden Temperaturen  $T=10 \text{ °C}$  und  $T=200 \text{ °C}$  (im thermischen Gleichgewicht).

Aufgabe 9: Polarisierbarkeit von Molekülen ( 5P)

Bei hochsymmetrischen Molekülen wie  $H_2$ ,  $N_2$ ,  $O_2$ , und  $CO_2$  kann man durch ein äußeres elektrisches Feld  $\underline{E}$  ein induziertes Dipolmoment erzeugen. Es gilt:

$$\underline{P}_{\text{ind}} = \underline{\underline{\alpha}} \cdot \epsilon_0 \cdot \underline{E}_{\text{loc}} \quad \text{Dabei ist } \underline{\underline{\alpha}} \text{ der Tensor der Polarisierbarkeit.}$$

Bei linearen Molekülen genügt es, die beiden Komponenten  $\alpha_{\perp}$  und  $\alpha_{\parallel}$  zu betrachten. Die eine Komponente ist senkrecht zur Molekülachse, die andere parallel dazu.

a) Welche physikalischen Einheiten besitzen Polarisierbarkeit  $\alpha$  und Dipolmoment  $p$  ? (1P)

b) Die folgende Tabelle zeigt Werte für  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$ . Wie groß sind die induzierten Dipolmomente für ein einzelnes Molekül in einem sonst leeren Plattenkondensator (Spannung 100 kV, Plattenabstand 10cm)? (4P)

	$\alpha_{\parallel}$	$\alpha_{\perp}$	$\langle \alpha \rangle$ (mittlere Polarisierbarkeit)
$H_2$	$10.7 \cdot 10^{-30}$	$7.66 \cdot 10^{-30}$	$9.93 \cdot 10^{-30}$
$O_2$			$20.1 \cdot 10^{-30}$
$CO_2$	$82.9 \cdot 10^{-30}$	$40.2 \cdot 10^{-30}$	

Aufgabe 10 Permanentes Dipolmoment von Molekülen ( 8P)

Das H<sub>2</sub>O Molekül besitzt auf Grund seiner gewinkelten Symmetrie ein Dipolmoment von  $p_{\text{perm}} = 1.844 \text{ Debye} = 6.152 \cdot 10^{-30} \text{ C}\cdot\text{m}$ .

a) Wie groß ist in einem Feld von  $E = 1 \text{ MV/m}$  die potentielle Energie eines Dipols mit Ausrichtung in Feldrichtung und entgegen der Feldrichtung? (2P)

b) Wie groß ist die mittlere Orientierung eines Ensembles von H<sub>2</sub>O Molekülen im Feld von  $1 \text{ MV/m}$  bei einer Temperatur von  $T = 300 \text{ K}$  ? Sie sollen also den mittleren Winkel  $\theta$  zwischen der Richtung des Dipolmomentes und der Feldrichtung berechnen. (6P)