
Übungsblatt 5: Termine: 29./ 01./ 02. November/Dezember (24 P)

Aufgabe 11: Bestimmung von Potentialparametern (14 P)

Eine oft ganz gute Näherung für Potentialkurven von Molekülen ist ein Morsepotential:

$$V_{\text{morse}}(\mathbf{R}) = D_e \cdot [1 - \exp(-a \cdot (R - R_e))]^2$$

Es wird beschrieben durch die 3 Parameter D_e , R_e , a .

(a) Beschreiben Sie genau (schriftlich!), wie Sie aus spektroskopischen Daten der Schwingungen und Rotationen diese 3 Parameter bestimmen können. (4P)

(b) Führen Sie dann diese Bestimmung für ein O_2 Molekül durch, wenn Ihnen folgende Daten für die ersten 8 Schwingungsniveaus und für die ersten 8 Rotationsniveaus im $v=0$ Zustand gegeben werden. (6P)

v	0	1	2	3	4	5	6	7
E_v	774	2302	3800	5271	6712	8126	9510	10866
J	0	1	2	3	4	5	6	7
	0	2.8547	8.5641	17.1278	28.5455	42.8168	59.9410	79.9174

(Alle Angaben in cm^{-1}).

(c) Zeichnen Sie diese Energieniveaus quantitativ in zwei Figuren und bestimmen Sie die Anharmonizität der Schwingung und die Zentrifugaldehnung der Rotation. (4P)

Aufgabe 12 : Rotationsspektren von BrF. (10P)

(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} .

Bestimmen Sie aus diesen Angaben die Rotationskonstante B_e , das Trägheitsmoment I sowie die Bindungslänge des Moleküls. (4 Punkte)

(b) Bestimmen Sie die spektrale Lage des Rotationsübergangs $J = 9 \rightarrow J = 10$ in

Einheiten der Energie und in Wellenzahlen. (1 Punkt)

(c) Welcher Rotationsübergang besitzt bei Raumtemperatur (298 K) die größte Intensität? (Nehmen Sie hierzu vereinfachend an, dass das Übergangs-Matrixelement des Moleküls nicht explizit von J abhängt.) (4 Punkte)

(d) Bestimmen Sie die Rotationsfrequenz (Einheit: Hz) von $^{79}\text{Br}^{19}\text{F}$ in den Zuständen $J = 0$, $J = 1$ und $J = 10$. (1 Punkt)