
Übungsblatt 6: Termine: 06./ 08./ 09. Dezember (13 P)

Aufgabe 13: Elektronische Anregungen I (9 P)

Eine Näherung für Potentialkurven von Molekülen ist das Morsepotential:

$$V_{\text{morse}}(R) = D_e \cdot [1 - \exp(-a \cdot (R - R_e))]^2 + V_0$$

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

Für das Li_2 -Molekül hat man folgende Parameter:

Grundzustand: $D_e=0.838\text{eV}$, $a=6.74 \cdot 10^9 \text{ 1/m}$ $R_e=228.16 \text{ pm}$ $V_0=0 \text{ eV}$.

Angeregter Zustand: $D_e=0.223\text{eV}$, $a=8.385 \cdot 10^9 \text{ 1/m}$ $R_e=278.28 \text{ pm}$ $V_0=1.0082 \text{ eV}$.

- Zeichnen Sie quantitativ die beiden Potentialkurven in ein gemeinsames Diagramm. (2P)
- Wie groß ist die Rotationskonstante B_e im Grundzustand und im angeregten Zustand für die Moleküle ${}^7\text{Li}{}^7\text{Li}$ und ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$? (1P)
- Entwickeln Sie eine harmonische Näherung für die Potentialkurve im Grundzustand und im angeregten Zustand. Wie groß ist die erwartete Schwingungsenergie $\hbar\omega_0$ im Grundzustand und im angeregten Zustand für die Moleküle ${}^7\text{Li}{}^7\text{Li}$ und ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$? (3P)
- Bei welcher Wellenlänge (im Vakuum) liegt der Übergang $v'=0$ nach $v''=0$ in den beiden Molekülen? (1P)
- Bei welcher Wellenlänge erwartet man den Übergang von $v'=0$ nach $v''=1$ (in Absorption) in den beiden Molekülen? (2P)

Rechnen Sie für c), d) e) jeweils nur in harmonischer Näherung.

Aufgabe 14 : Elektronische Anregungen II (4 P)

Ein Molekül habe für einen elektronischen Übergang bei $\lambda = 230 \text{ nm}$ eine

Extinktion $\epsilon=11600 \text{ cm}^2/\text{mol}$.

a) Nach einer Weglänge $x=10$ cm ist die Lichtintensität bei 230 nm auf $I(x)/I_0 = 10^{-3}$ abgefallen. Berechnen Sie mit dem Lambert-Beer-schen Gesetz die Konzentration der Moleküle in mol/liter. (3P)

b) In welcher energetischen Distanz befinden sich in etwa die beiden beteiligten Potentialkurven? (1P)