

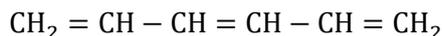


Übungsblatt Nr. 10

Ausgabe: 28.06.2018

Aufgabe 1: Teilchen im Kasten

Nehmen Sie an, dass die π -Elektronen im Hexatrienmolekül frei beweglich seien.



$$\text{C} - \text{C} \quad 1.54 \text{ \AA}$$

$$\text{C} = \text{C} \quad 1.35 \text{ \AA}$$

Betrachten Sie das Molekül als eindimensionalen Kasten, der die Länge des Moleküls plus die Längen einer Einfachbindung hat. Das Molekül besitzt 6 π -Elektronen und nur zwei von ihnen können das gleiche Energieniveau besetzen (Pauli-Prinzip).

- Bestimmen Sie die Energie des höchsten besetzten Niveaus (HOMO).
- Bestimmen Sie die Energie des niedrigsten unbesetzten Niveaus (LUMO).
- Bestimmen Sie die Differenz der beiden Niveaus. Im UV/Vis-Spektrum des Moleküls wurde ein Absorptionsmaximum bei $\lambda = 268 \text{ nm}$ beobachtet. Vergleichen Sie Ihre Berechnung mit dem experimentellen Wert.

Aufgabe 2: Rotationsspektroskopie

- Die Wellenzahl der Rotationsübergänge $J = 1 \leftarrow J = 0$ wurden für HCl und DCl ($\cong {}^2\text{HCl}$) gemessen. Für ${}^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ beträgt der Wert 20.8784 cm^{-1} und für ${}^2\text{H}^{35}\text{Cl}$ 10.7840 cm^{-1} .

Die genauen Atommassen betragen

$$1.007825 \text{ u für } {}^1\text{H}$$

$$2.0140 \text{ u für } {}^2\text{H}$$

$$34.96885 \text{ u für } {}^{35}\text{Cl}$$

Ist der Bindungsabstand von HCl genauso groß wie von DCl? (Verwenden Sie dazu das Modell des starren Rotators)

- Das Rotationsspektrum von ${}^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ zeigt gleiche Besetzung der Ausgangsniveaus, die für die beiden Absorptionslinien bei 104.39 cm^{-1} und 229.66 cm^{-1} verantwortlich sind. Berechnen Sie die Temperatur des Gases bei der das Spektrum aufgenommen wurde.
- Betrachten Sie nun das Modell des nicht-starren Rotators. Für das obige ${}^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ werden die Absorptionslinien für $J = 11 \leftarrow J = 10$ bei 226.74 cm^{-1} beobachtet. Bestimmen Sie die Zentrifugaldehnungskonstante unter Verwendung der Rotationskonstante aus Teilaufgabe a). Welche Bindungskraftkonstante können Sie demnach HCl zuordnen?