



Übungsblatt Nr. 11

Ausgabe: 05.07.2018

Aufgabe 1: Normalschwingungsmoden

Bestimmen Sie die Anzahl der Schwingungsfreiheitsgrade folgender Moleküle:

HBr, Cl₂, H₂O, CO₂, CH₄, NH₃, CO, HCN

Welche der genannten Moleküle zeigen ein Absorptions-Schwingungsspektrum?

Skizzieren Sie die Normalschwingungsmoden von HCN sowie von H₂O.

Aufgabe 2: Anharmonischer Oszillator

Die Schwingungsniveaus von NaI liegen bei $E_0 = 2.83684 \cdot 10^{-21} \text{J}$ und $E_1 = 8.48828 \cdot 10^{-21} \text{J}$. Betrachten Sie das System als anharmonischen Oszillator, dem ein Morsepotential zu Grunde liegt.

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_0 - \chi_e \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar\omega_0$$

- Berechnen Sie die Schwingungskonstante ω_0 des anharmonischen Oszillators, sowie die Anharmonizitätskonstante χ_e .
- Bei welchen Wellenzahlen erwarten Sie jeweils den Grundschantungsübergang sowie den 1. Oberton?
- Bestimmen Sie die Tiefe des Potentials E_e und die Dissoziationsenergie E_d des Moleküls.
- Skizzieren Sie die Potentiale des harmonischen und anharmonischen Oszillators (Morsepotential) in ein und dasselbe Diagramm. Zeichnen Sie jeweils schematisch die zugehörigen Energieniveaus.
- Nennen Sie zwei Eigenschaften eines realen Moleküls, die im Morsepotential im Vergleich zum harmonischen Oszillator berücksichtigt werden.