

Teilaufgabe 3: Rotations-Schwingungs-Spektrum

(30 Punkte)

An HCl-Gas mit isotopenreinem ^{35}Cl werde bei Zimmertemperatur (300 K) ein Absorptionsspektrum im Infraroten aufgenommen. Beobachtet werden zwei Absorptionsbanden, die aus vielen äquidistanten Einzellinien bestehen. Die Mittenfrequenz liegt bei $\nu_s = 8,66 \cdot 10^{13}$ Hz. Die Einzellinien, in die jede der Banden aufgespalten ist, haben den Abstand $\Delta\nu = 6 \cdot 10^{11}$ Hz.

Berechnen Sie

- die Energie E_s der beiden untersten Schwingungsniveaus, (3 Punkte)
- das Verhältnis der Besetzungszahlen dieser beiden Niveaus, (2 Punkte)
- das Trägheitsmoment Θ des Moleküls, (3 Punkte)
- den Gleichgewichtsabstand r_0 der Atome, (4 Punkte)
- die Kraftkonstante k der Molekülbindung! (3 Punkte)
- Skizzieren Sie das Spektrum $I(\nu)$ und begründen Sie den Intensitätsverlauf! (5 Punkte)

Die potentielle Energie kann als Funktion des Abstandes r zwischen den Atomen durch folgende Beziehung beschrieben werden:

$$V(r) = V_0 \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right]$$

- Skizzieren Sie den Verlauf des Potentials. Geben Sie (mit Begründung) die Bedeutung von V_0 und a an! (4 Punkte)
- Tragen Sie in die gleiche Skizze zum Vergleich den Verlauf des Potentials ein, den man in der harmonischen Näherung zu Grunde legt, und begründen Sie die Unterschiede! (2 Punkte)
- Berechnen Sie den Zusammenhang der Größen V_0 und a mit dem Gleichgewichtsabstand r_0 und der Kraftkonstanten k der Molekülbindung. (4 Punkte)
(Hinweis: Entwickeln Sie das oben angegebene Potential in eine Taylorreihe nach $(r - r_0)$ bis zur benötigten Ordnung. Als Zahlenwerte für Gleichgewichtsabstand und Kraftkonstante können Sie die Näherungen $r_0 = 0,135$ nm und $k = 480$ N/m verwenden.)

- 5 -

Teilaufgabe 3: Zweiatomiges Molekül mit Morse-Potential

(30 Punkte)

Die potentielle Energie eines zweiatomigen Moleküls mit der reduzierten Masse M in Abhängigkeit des Kernabstands r werde durch das Morse-Potential

$$V(r) = D \cdot (1 - \exp(-a(r - b)))^2$$

beschrieben.

- Skizzieren Sie das Potential und bestimmen Sie den Gleichgewichtsabstand r_0 ! (4 Punkte)
- Bestimmen Sie den Energieabstand zwischen den niedrigsten Rotationsenergien (Formel)! (6 Punkte)
- Nähern Sie das Potential für niedrige Energien durch ein Potential eines harmonischen Oszillators an und bestimmen Sie die zugehörigen Energien und den Energieabstand (Formel)! (6 Punkte)
- Bestimmen Sie die Dissoziationsenergie (Formel)! Berücksichtigen Sie dabei die quantenmechanische Nullpunktsenergie! (4 Punkte)
- Zeigen Sie, dass für die Übergangsenergien $(\nu = 1, J) \rightarrow (\nu = 0, J + 1)$ (P-Zweig) und $(\nu = 1, J) \rightarrow (\nu = 0, J - 1)$ (R-Zweig) einer kombinierten Rotations-Schwingungs-Anregung gilt:

$$\Delta E_{rot/vib}^P = \hbar \sqrt{\frac{2Da^2}{M} - \frac{2\hbar^2(J+1)}{Mr_0^2}}$$

$$\Delta E_{rot/vib}^R = \hbar \sqrt{\frac{2Da^2}{M} + \frac{2\hbar^2 J}{Mr_0^2}}$$

- Das Kochsalzmolekül $^{23}\text{Na}^{35}\text{Cl}$ hat eine Dissoziationsenergie $E_D = 410$ kJ/mol. Die niederenergetischste Linie des R-Zweigs hat eine Frequenz von $\nu_R = 6,4562 \cdot 10^{13}$ Hz, die höchstenergetische des P-Zweigs $\nu_R = 6,4557 \cdot 10^{13}$ Hz. Berechnen Sie daraus alle Parameter des Morsepotentials für dieses Molekül! (5 Punkte)

(5 Punkte)