

Aufgabe 2: Anregungsmoden von Molekülen und der Treibhauseffekt**(20 Punkte)**

Das Bindungspotential $V(r)$ des zweiatomigen Moleküls $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ mit der Bindungslänge $r_0 = 0,113 \text{ nm}$ kann für niedrig liegende Schwingungszustände durch die folgende Funktion genähert werden:

$$V(r) = Da^2[r - r_0]^2$$

- a) Berechnen Sie aus der Rückstellkraft im Potential allgemein die „Federkonstante“ der Molekülbindung. (1 Punkt)
- b) Zeigen Sie, dass für die klassische Kreisfrequenz der Vibrationsbewegung der Massen m_C und m_O gilt $\omega_{\text{vib}} = \sqrt{2a^2D/m_r}$. Leiten Sie aus den Bewegungsgleichungen der beiden Massen die Größe m_r her und berechnen Sie diese für das CO-Molekül. (Hinweis: Rechnen Sie mit $R(t) = r(t) - r_0$, also symmetrisch um den mittleren Abstand.) (3 Punkte)
- c) Geben Sie den quantenmechanischen Ausdruck für die Schwingungsenergie E_n als Funktion einer Vibrationsquantenzahl n an. Nehmen Sie $D = 11,22 \text{ eV}$ und $a = 2,26 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$ an und berechnen Sie damit den Energieabstand benachbarter Vibrationsniveaus in CO. (Ersatzlösung: 263 meV) Geben Sie an, welche dieser Schwingungszustände bei $T = 300 \text{ K}$ angeregt sind. (3 Punkte)

Neben der Vibration kann das Molekül auch eine Rotationsbewegung ausführen. Betrachten Sie das Molekül zunächst als starren Rotor mit Rotationsachse senkrecht zur Molekülachse.

- d) Drücken Sie die Rotationsenergie des CO-Moleküls als Funktion der Gesamtdrehimpulsquantenzahl J und des Trägheitsmoments Θ aus. Berechnen Sie die Energieabstände benachbarter Rotationsniveaus mit $|\Delta J| = 1$. (Ersatzlösung: $\Delta E_{\text{rot}} = 600 \mu\text{eV} \cdot (J + 1)$) (3 Punkte)
- e) Weiße elektromagnetische Strahlung werde durch ein Volumen gestrahlt, das mit CO ($T = 300 \text{ K}$) Gas gefüllt ist. Skizzieren Sie das Absorptions-Spektrum im Energiebereich von $260 \text{ meV} < E_{\text{ph}} < 270 \text{ meV}$. Berücksichtigen Sie dabei alle erlaubten Kombinationen von Rotations-Schwingungs-Übergängen für Lichtabsorption mit $\Delta n = +1$. Benennen Sie die Quantenzahlen, die bei den Übergängen involviert sind. (4 Punkte)
- f) Das CO_2 -Molekül ist linear gestreckt. Geben Sie die Anzahl und Entartung der Normal-Schwingungsmoden an und skizzieren Sie diese. (2 Punkte)
- g) Beschreiben Sie den Treibhauseffekt auf der Erde und die Rolle der Treibhausgase hierbei. Begründen Sie, warum CO und CO_2 viel effizientere Treibhausgase sind als z. B. N_2 oder O_2 . (4 Punkte)