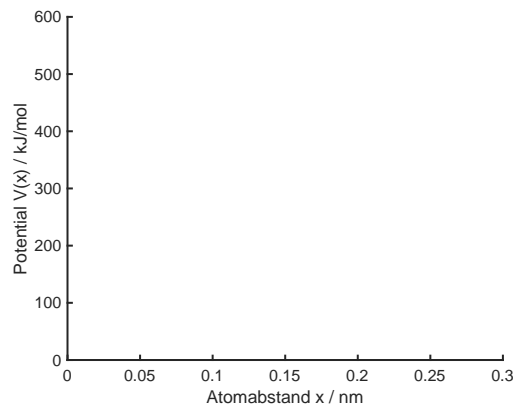


Übungsblatt 7: Das Morsepotential

Aufgabe 1: Harmonischer Oszillator vs. Morsepotential

Skizzieren Sie das Potential eines Harmonischen Oszillators und in das selbe Diagramm das Morsepotential.

- Erklären Sie die Unterschiede der beiden Potentiale bei kleinen und großen Abständen.
- Markieren Sie in Ihrer Skizze die Nullpunktenergie E_0 , Dissoziationsenergiekonstante D_e , die Dissoziationsenergie E_{dis} und den Gleichgewichtsabstand R_{eq} .
- Welche Auswahlregeln gelten für den Harmonischen Oszillator und welche für das Morsepotential?



Aufgabe 2: Das Morsepotential:

Die Wellenzahlen der Schwingungsübergänge $\nu = 0 \rightarrow \nu = 1$ und $\nu = 0 \rightarrow \nu = 2$ von Kohlenstoffmonoxid $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ betragen $\tilde{\nu}_{01} = 2170 \text{ cm}^{-1}$ und $\tilde{\nu}_{02} = 4312 \text{ cm}^{-1}$.

- Für Welchen der beiden Übergänge erwarten Sie im Absorptionsspektrum einen größeren Peak und weshalb?
- Ihnen sind außerdem die Gleichungen (1-2) der Übergänge gegeben. Diese beiden Gleichungen bilden zusammen ein lineares Gleichungssystem (LGS). Bestimmen Sie mit dem LGS und den Werten von $\tilde{\nu}_{01}$ und $\tilde{\nu}_{02}$ die Schwingungsfrequenz ω_0 und die Anharmonizitätskonstante χ_e .

$$\tilde{\nu}_{01} = \frac{\omega_0}{\pi c} \left(\frac{1}{2} - \chi_e \right) \quad (1)$$

$$\tilde{\nu}_{02} = \frac{\omega_0}{\pi c} (1 - 3\chi_e) \quad (2)$$

- Bestimmen Sie aus der Schwingungsfrequenz ω_0 und der Anharmonizitätskonstante χ_e die Kraftkonstante k der Bindung, die Dissoziations-Energie-Konstante D_e sowie die Dissoziations-Energie E_{Dis}

Aufgabe 3: Mehratomige Moleküle und Freiheitsgrade:

Geben Sie die Anzahl der Bewegungsfreiheitsgrade folgender Moleküle an. Geben Sie außerdem an wie viele dieser Freiheitsgrade jeweils Translationsbewegungen, Rotationsbewegungen und Schwingungsbewegungen beschreiben.

1 : H₂2 : CO₂3 : NH₃4 : H₂O: C₆₀