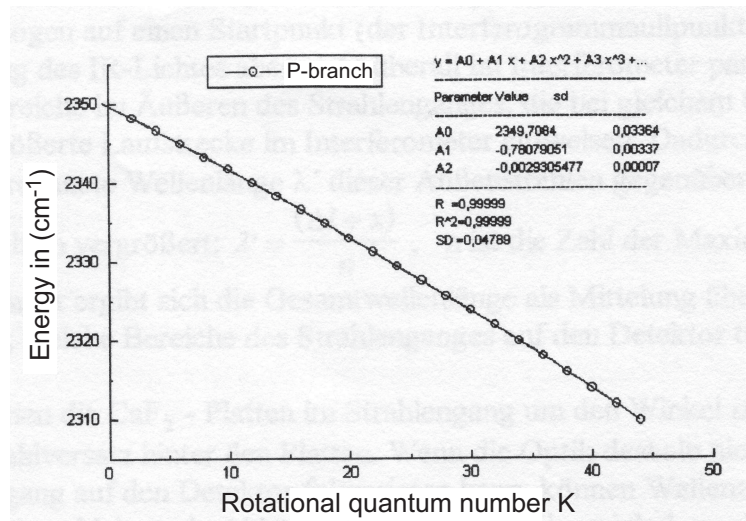


Abgabe bei der Vorlesung oder per E-Mail an: fidder@physik.fu-berlin.de

vor Donnerstag 03.07.2008, 12h30.

Aufgabe 10–1 (1 + 1 + 1 Punkte)

- (a) In dieser Grafik ist gegeben die Auswertung von dem Rotationsvibrationspektrum von CO_2 , mit der Formel $\Delta E = hc\bar{\nu} - K(B' + B) + K^2(B' - B)$.



- Berechnen Sie für Kohlendioxid die Rotationskonstanten B und B'.
- (b) Berechnen Sie den Abstand R_{CO} für CO_2 für die beiden Niveaus $v = 0$ und $v = 1$ aus B und B'.
- (c) Berechnen Sie die erwartete Isotopenverschiebung von $^{13}CO_2$ im Vergleich zu $^{12}CO_2$, und vergleichen Sie hierzu das Verhältnis

$$\frac{\nu_{^{12}CO_2}}{\nu_{^{13}CO_2}} = \frac{2349cm^{-1}}{2282cm^{-1}} = 1.03. \quad (1)$$

Aufgabe 10–2 (2 Punkte)

Zeigen Sie, dass für einen nicht-starren Rotator die Position des Minimums des effektiven Potentials

$$V_{eff}(R) = V_M(R) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{K(K+1)}{R^2}, \quad (2)$$

wobei

$$V_M(R) = D_e[e^{-2\alpha(R-R_0)} - 2e^{-\alpha(R-R_0)}], \quad (3)$$

genähert werden kann durch:

$$R_{min} = R_0 + \frac{\hbar^2 K(K+1)}{2\mu\alpha^2 R_0^3 D_e}. \quad (4)$$

Aufgabe 10–3 (1 Punkt)

Das Verhältnis zwischen den Besetzungen der Rotationsenergieniveaus $k = K$ und $k' = 0$ ist gegeben durch:

$$\frac{N_k}{N_0} = (2K+1)e^{-BhcK(K+1)/k_B T}. \quad (5)$$

Leiten Sie einen Ausdruck her, der zeigt, wie die Werte k für das Niveau mit der höchsten Besetzung von der Temperatur abhängen.

Aufgabe 10–4 (2 Punkte)

Welche relativen Bindungsenergien erwarten Sie für die homonuklearen zweiatomigen Moleküle N_2 , O_2 , O_2^+ , O_2^- und O_2^{2-} ? Welche Moleküle sind diamagnetisch, welche paramagnetisch? (Diskussion!)

Aufgabe 10–5 (2 Punkte)

Welche der folgenden Atomorbitale können aufgrund ihrer Symmetrieeigenschaften für Linearkombinationen zu Molekülbindungsorbitalen verwendet werden, wenn die Molekülachse die z -Achse ist: (a) s und p_z , (b) s und p_x , (c) p_x und p_x , und (d) d_{xz} und p_x . Skizzieren Sie dazu die einzelnen Orbitale.