

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I: Teil 1, Quantenmechanik (Modul A8)

Blatt 6

Aufgabe 15: *Harmonischer Oszillator.*

Die Schwingung eines $^{14}\text{N}-^{16}\text{O}$ -Moleküls kann grob als harmonischer Oszillator behandelt werden.

1. Die harmonische Kraftkonstante für das Molekül beträgt $D = 1536 \text{ N/m}$. Wie groß ist
 - (a) die Nullpunktsenergie in eV,
 - (b) die Anregungsenergie für einen $v = 0 \rightarrow v = 1$ Übergang im IR-Spektrum (in cm^{-1}) in der harmonischen Näherung?
2. Man sagt, dass die harmonische Näherung gut ist, falls $k_B T \ll \hbar\omega$. Bei welchen Temperaturen bräche diese demnach zusammen?
3. Die Intensität für einen Übergang $v = 0 \rightarrow v = 1$ im IR-Spektrum ist proportional zu

$$I_{10} \propto |\langle \psi_0 | \mu | \psi_1 \rangle|^2, \quad (1)$$

wobei $\psi_{0,1}$ harmonische Oszillatorfunktionen sind und μ das Dipolmoment $\mu(x)$ des Moleküls ist (nicht mit der reduzierten Masse verwechseln!). Beweisen Sie, dass der Übergang *verboten* ist, falls $\mu = \text{const.}$

Aufgabe 16: *Anharmonischer Oszillator.*

Das vibrierende OH-Radikal kann näherungsweise als Morse-Oszillator mit

$$V(x) = D_e [1 - e^{-\beta x}]^2 \quad (2)$$

beschrieben werden, mit $D_e = 5.43 \text{ eV}$ und $\beta = 2.25 \text{ \AA}^{-1}$.

1. Berechnen Sie die harmonisch genäherte Schwingungsfrequenz für OH und OD.
2. Berechnen Sie die Anharmonizitätskonstante x_e für OH und OD.
3. Berechnen Sie mit den Ergebnissen aus 1. und 2. die fundamentalen Schwingungsfrequenzen im IR-Spektrum für OH und OD, sowie die ersten Obertöne ($E_2 - E_0$).

4. Wie groß ist die *messbare* Dissoziationsenergie D_0 für OH bzw OD?
Wie viele gebundene Zustände (mit $E_v < D_e$) gibt es für OH
und OD?