

Übung zur Atom- und Molekülphysik C. Laubschat

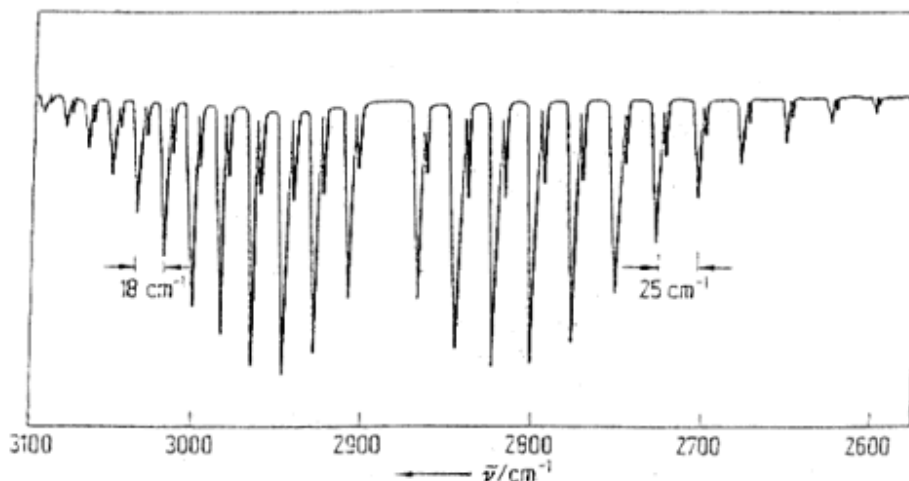
17) Rotationsschwingungsspektrum von CO₂:

Die Abbildung zeigt ein Rotationsschwingungsspektrum von HCL (Aufspaltung in Haupt- und Satellitenlinien durch Cl³⁵ und Cl³⁷). Bei Anregung einer Molekülschwingung ändert sich gleichzeitig die Rotationsquantenzahl L um $\Delta L = \pm 1$ (+1: R-Zweig, -1: P-Zweig). Für die Übergangsenergien gilt bei Vernachlässigung der Rotationsschwingungskopplung:

$$\Delta E = \hbar\omega_{\text{OSC}} + L_e(L_e+1) B_e - L_a(L_a+1) B_a,$$

wobei ω_{OSC} die Kreisfrequenz der Schwingung, $B = \hbar^2/2I$, $I = \sum r_i^2 M_i$ das Trägheitsmoment sowie die Indizes a und e die unterschiedlichen Werte von B und L im Anfangs- und Endzustand bedeuten.

- i. Bestimmen Sie B_a und B_e und daraus den mittleren Abstand der Atome. Warum ist $B_e < B_a$?
- ii. Bestimmen Sie aus dem Spektrum ω_{OSC} und daraus die Kraftkonstante der Bindung.



18) Molekülschwingungen und -rotation:

Für das O₂-Molekül findet man eine Dissoziationsenergie E_{diss} von 498 kJ/mol (thermochemisch), einen mittleren Kernabstand R_0 von 120,7 pm (EXAFS) und für die Energie der niedrigsten Schwingungsübergänge einen Wert von 1556 cm⁻¹ (Raman). Wie groß ist die Amplitude der Grundschiwingung, wenn man ein MORSE-Potential der Form $U(R) = E_{\text{diss}}(1 - \exp[-a(R-R_0)^2])$ ansetzt? Vergleichen Sie ferner die Energie der Schwingungs- mit der der zu erwartenden Rotationsübergänge!

19) MO-Schema für CO₂:

Diskutieren Sie die Bindungsverhältnisse in CO₂

- i. im Bild delokalisierte MO's und
- ii. im Bild bizenstrischer MO's.

Skizzieren Sie ein Schema der Orbitalenergien.