

## 9. Übungsblatt zur Vorlesung SMKS-1 (WS 25/26)

Seidel/Kühnemuth

Abgabe bis Sonntag 4.1.2026, 24:00 Uhr

Besprechung: Dienstag, 6.1.2026

### Wiederholungsfragen:

9.1) Wo liegen die Grenzen des HOMO-LUMO-Konzepts?

9.2) Was bestimmt die Stärke von elektronischen Übergängen?

9.3) Rekapitulieren Sie die Nomenklatur der Elektronenkonfigurationen von Atomen und Molekülen.

9.4) Benennen Sie die elektronischen Zustände des  $H_2$  Moleküls im Grundzustand und in Zuständen mit einem angeregten Elektron und geben die Besetzung der MO an. Begründen Sie zudem die energetische Abfolge der Zustände.

### Aufgabe 36: Harmonischer Oszillator

Die Kraftkonstante  $k$  der Bindung im Molekül CO beträgt 1860 N/m. Berechnen Sie die Wellenzahl des Übergangs in  $cm^{-1}$  im Rahmen der harmonischen Näherung. Skizzieren Sie Rotationsstruktur des Übergangs. Zeichnen Sie maßstäblich die Wahrscheinlichkeitsdichten für die Auslenkung aus der Gleichgewichtslage (Betragsquadrat der Wellenfunktion) für den Grundzustand. Lesen Sie aus dem Diagramm die typische Auslenkung (Halbwertsbreite) ab.

### Aufgabe 37: Morse-Potential II

Das Morse-Potential

$$V_m(x) = h \cdot c \cdot D_e [1 - e^{-a(x-x_0)}]^2$$

ist als einfache Darstellung der wahren Potentialkurve von Molekülen von großer Bedeutung. Für RbH wurde experimentell  $\tilde{\nu} = 936,8 \text{ cm}^{-1}$  und  $x_e \tilde{\nu} = 14,15 \text{ cm}^{-1}$  bestimmt. Zeichnen Sie die Potentialkurve um den Gleichgewichtsabstand  $x_0 = 236,7 \text{ pm}$  von 50 pm bis 800 pm. Untersuchen Sie dann, wie die Rotation eines Moleküls seine Bindung schwächt, indem Sie die kinetische Energie der Rotation berücksichtigen und

$$V^* = V + hcBJ(J + 1)$$

mit

$$B = \frac{\hbar}{4\pi c \mu x^2}$$

auftragen. Zeichnen Sie diese Kurven für  $J = 40, 80$  und  $100$  in dasselbe Diagramm ein, und beobachten Sie, wie die Dissoziationsenergie durch die Rotation beeinflusst wird (Verwenden Sie  $B = 3,020 \text{ cm}^{-1}$  am Gleichgewichtsabstand, das macht die Rechnung wesentlich einfacher).



### Aufgabe 38: Lichtdruck (Wiederholung)

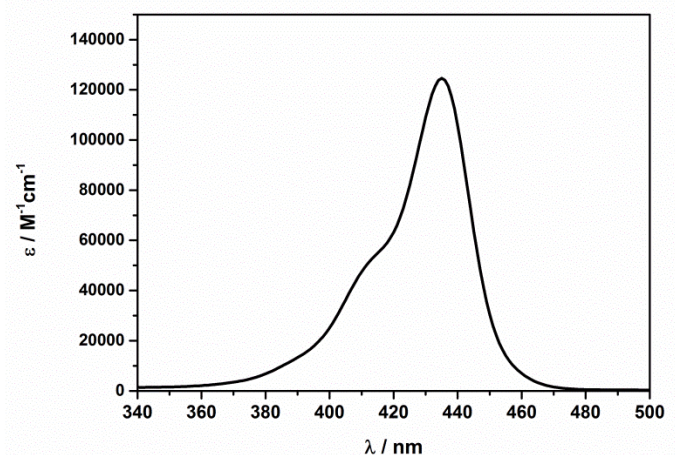
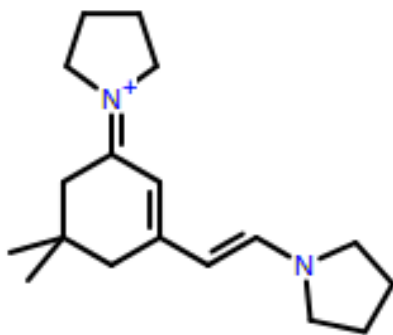
Ein Glühwürmchen mit der Masse 5,0 g emittiert mit einer Leistung von 0,1 W rotes Licht mit einer Wellenlänge von 650 nm in eine Richtung.

a) Auf welche Geschwindigkeit hat es nach 10 Jahren beschleunigt, wenn es frei im Raum schwebt (und diese Tortur überlebt)?

b) Nehmen Sie an das Glühwürmchen verwandele sich in eine Feuerfliege, die in 1-s-Intervallen leuchtet, während sie mit einer Geschwindigkeit von 0,1 m/s fliegt. Welche zusätzliche Geschwindigkeit verleiht ihr das 1 s lang dauernde Leuchten? Vernachlässigen Sie jegliche Reibungseffekte mit der Luft.

### Aufgabe 39: Das Molekül als Kasten

Die linke Abbildung zeigt ein Cyanin. Schätzen Sie basierend auf typischen Bindungslängen die Konjugationslänge dieses Cyanins ab. Berechnen Sie dann basierend auf dem Teilchen im Kasten Modell den HOMO-LUMO-Abstand des Moleküls und dessen langwelligste Absorption. Vergleichen Sie dies mit dem experimentellen Absorptionsspektrum (rechts).



### Aufgabe 40 Innere Konversion

Eine wässrige Lösung eines Fluoreszenzfarbstoffes ( $T = 20^\circ\text{C}$ ) absorbiert im Durchschnitt  $10^8$  Photonen pro Molekül bei einer Anregungswellenlänge von 490 nm. Fluoreszenz erfolgt bei 525 nm mit einer Quanteneffizienz von  $\phi_F = 0.9$ . Welche Konzentration muss die Lösung haben, um sich dabei um  $1^\circ\text{C}$  zu erwärmen (adiabatischer Aufbau)? Wie stark tragen die einzelnen Prozesse zur Erwärmung bei?