

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

Seidel/Kühnemuth

Abgabe bis Sonntag 14.12.2025, 24:00 Uhr

Besprechung: Dienstag, 16.12.2025

Wiederholungsfragen:

8.1) Rekapitulieren Sie die Grundsätze der quantenmechanischen Behandlung von Atomen und Molekülen.

8.2) Was versteht man unter dem HOMO-LUMO Konzept?

Aufgabe 32: IR- und Raman-Spektroskopie

a) IR-Spektroskopie

i) Welche Informationen erhält man aus der IR-Spektroskopie?

ii) Warum ist das IR-Spektrum eines Proteins nicht dicht (dicht bedeutet: An jeder Wellenlängenposition gibt es eine Absorption)?

iii) Welche Auswahlregeln/Bedingungen gelten?

b) Raman-Schwingungsspektroskopie

i) Welche Auswahlregeln/Bedingungen gelten?

ii) Was kann ein Vorteil von Resonanz-Raman sein?

Aufgabe 33: Schwingungsspektroskopie von CS₂

a) CS₂ hat folgende Schwingungsenergien: 500 cm⁻¹, 1000 cm⁻¹, 2000 cm⁻¹ (stark gerundet). Welche Schwingungsenergie gehört zu welcher Schwingung (qualitative Begründung)?

b) Welche Schwingungen aus a) sind Raman- und welche IR-aktiv (mit Begründung)?

c) Welche Wärmekapazität erwarten Sie für CS₂ bei sehr hohen Temperaturen unter der Annahme, dass das Molekül stabil bleibt?

Aufgabe 34: Anharmonischer Oszillator

Die Potenzialkurve $V(x)$ des elektronischen Grundzustandes des H₂-Moleküls lässt sich genähert durch ein Morse-Potenzial $V_m(x) = D_e [1 - e^{-a(x-x_0)}]^2$ beschreiben. Die Dissoziationsenergie D_e beträgt 38462 cm⁻¹. Die Größe a errechnet sich aus dieser Energie, der reduzierten Masse m_r sowie der harmonischen Schwingungsfrequenz $\tilde{\nu} = 4181$ cm⁻¹

gemäß $a = \omega_e \sqrt{\frac{m_r}{2D_e}}$.

a) Zeichnen Sie die Potenzialkurve als Funktion der Auslenkung $x-x_0$. Überlagern Sie die Kurve mit dem harmonisch genäherten Potenzial. Dafür benötigen Sie die Kraftkonstante k , diese kann aus den angegebenen Größen berechnet werden.

b) Die Energien der Eigenzustände des Morse-Oszillators sind gegeben durch:

$$E_n = \frac{h\omega_e}{2\pi} \left(n + \frac{1}{2} \right) - x_e \frac{h\omega_e}{2\pi} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \quad \text{mit} \quad x_e = \frac{h\omega_e}{8\pi D_e}$$

- Zeigen Sie, dass sich der energetische Abstand benachbarter Energieniveaus ($n+1$, n) linear mit der Quantenzahl n ändert. *Diese Formel gilt nur für gebundene Zustände.*

- Geben Sie die Anzahl der gebundenen Niveaus des Grundzustands an.

- Vergleicht man das H₂-Molekül in der „Morse-Beschreibung“ mit der harmonischen Beschreibung, für welche Beschreibung ist der mittlere H-H-Abstand größer?

Aufgabe 35: Morse-Potential I

Das HCl-Molekül wird durch ein Morse-Potential mit $D_e = 5,33 \text{ eV}$, $\tilde{\nu} = 2989,7 \text{ cm}^{-1}$ und $x_e \tilde{\nu} = 52,05 \text{ cm}^{-1}$ sehr gut beschrieben. Berechnen Sie die Dissoziationsenergien D_0 von (a) HCl und (b) DCl (unter der Annahme, dass sich das Potential durch die Deuterierung nicht verändert).