

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie für LA Chemie (Modul VM11)

Blatt 6

Aufgabe 17: *Harmonischer Oszillator.*

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

- Die harmonische Kraftkonstante für das Molekül beträgt $D = 1536 \text{ N/m}$. Wie groß ist
 - die Nullpunktsenergie in eV,
 - die Anregungsenergie für einen $v = 0 \rightarrow v = 1$ Übergang im IR-Spektrum (in cm^{-1}) in der harmonischen Näherung?
 - Welcher Wellenlänge (in nm) entspricht dieser Übergang?(Hinweis: Verwenden Sie vereinfachend $m_{\text{N}} = 14u$ und $m_{\text{O}} = 16u$ mit $u = 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg}$.)
- Wie lautet die Auswahlregel für IR-Übergänge in einem Molekül, das in doppelt-harmonischer Näherung (Wellenfunktionen harmonisch, Dipolmoment linear) behandelt wird? Gilt diese Auswahlregel strikt?
- Man sagt, dass die harmonische Näherung gut ist, falls $k_{\text{B}}T \ll \hbar\omega$. Bei welchen Temperaturen bräche diese demnach zusammen?

Aufgabe 18: *Schwingungen in mehratomigen Molekülen.*

- Wieviele Schwingungsfreiheitsgrade besitzen (i) H_2O , (ii) CH_4 , (iii) Acetylen, (iv) C_{60} ?
- Eine Berechnung der Schwingungswellenzahlen des Wassermoleküls ergibt für die drei Fundamentalschwingungen 1654 , 3280 und 3490 cm^{-1} . Berechnen Sie (unter der vereinfachenden Annahme, dass es sich um harmonische Schwingungswellenzahlen handele), die Nullpunktsenergie in cm^{-1} , kJ/mol , kcal/mol und eV .
- Eine Kalorie ist definiert als diejenige Wärmemenge, die benötigt wird, um (unter bestimmten, hier nicht interessierenden Bedingungen) die Temperatur in einem Gramm (flüssigem) Wasser um ein Grad Celsius zu erhöhen. Falls die oben berechnete Nullpunktsenergie schlagartig in verfügbare Energie umgewandelt werden könnte, um wieviel Grad Celsius würde sich demnach (unter der Idealisierung, dass die oben erwähnten "bestimmten Bedingungen" weiterhin existieren würden) Wasser aufheizen?