

**Übungen zur Vorlesung
Struktur der Materie – Spektroskopie-Teil**

Aufgabe 9:

- a) Geben Sie die Definition eines symmetrischen Kreisels an.
- b) Nennen Sie das Kriterium zur Unterscheidung von oblatem und prolatem Kiesel.
- c) Geben Sie die Rotationsenergie für den starren symmetrischen Kiesel als Funktion seiner Quantenzahlen an.
- d) Geben Sie die Auswahlregel für Rotationsübergänge im symmetrischen Kiesel an.
- e) Geben Sie an, welche der Rotationskonstanten aus dem MW-Spektrum des symmetrischen Kreisels abgelesen werden können.

Aufgabe 10:

- a) Notieren Sie die Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators.
- b) Skizzieren Sie das IR Spektrum eines harmonischen Oszillators.
- c) Berechnen Sie aus der Schwingungswellenzahl (4163 cm^{-1}) des H_2 Moleküls die Kraftkonstante der Bindung.

Aufgabe 11:

- a) Nennen Sie die Auswahlregeln für die Schwingungsspektroskopie.
- b) Geben Sie die Zahl der Normalschwingungen der Moleküle N_2O und NO_2 an.
- c) Machen Sie Vorschläge für die Strukturen dieser Moleküle und geben Sie an, welche der Schwingungen dieser Moleküle jeweils IR-aktiv sind.
- d) Die IR-Spektren der Moleküle N_2O und NO_2 zeigen beide drei Fundamentalschwingungen im IR-Spektrum. Schließen Sie damit auf die Struktur der Moleküle.
- e) Wiederholen Sie b., c. und d. mit dem Molekülpaar H_2O und CO_2 und vergleichen Sie die Resultate.

Aufgabe 12:

- a) Geben Sie die Energieeigenwerte des anharmonischen Oszillators mit Morse-Potential als Funktion der Quantenzahl an.
- b) Notieren Sie die Schrödingergleichung dieses anharmonischen Oszillators.
- c) Skizzieren Sie das IR Spektrum eines anharmonischen Oszillators.
- d) Berechnen Sie aus den Wellenzahlen des ersten und zweiten Obertons des HCl Moleküls, die bei 5668.0 cm^{-1} und 8347.0 cm^{-1} liegen, die Frequenz ν und die Anharmonizitätskonstante x_e für die Energieeigenwerte des Morsepotentials.
- e) Berechnen Sie die Anzahl der Schwingungszustände des HCl Moleküls mit den Daten aus d).
- f) Berechnen Sie die Dissoziationsschwelle des HCl Moleküls mit diesen Daten.
- g) Berechnen Sie die Dissoziationsenergie für DCl mit der Anharmonizitätskonstanten wie in f) und einer Frequenz ν des DCl , die Sie aus ν des Teils d) unter Anpassung der reduzierten Masse berechnen.