

Besprechung am 25.11.2016

Übungsblatt 5

Aufgabe 1 – Anharmonischer Oszillator, Obertöne

Die Schwingungsübergänge des Moleküls $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ wurden spektroskopisch untersucht. Für den Übergang $\tilde{\nu}_{1\leftarrow 0}$ wurde eine Wellenzahl von $1876,06\text{ cm}^{-1}$ gefunden, der erste Oberton ($\tilde{\nu}_{2\leftarrow 0}$) liegt bei $3724,20\text{ cm}^{-1}$. Betrachten Sie das System als anharmonischen Oszillator, dem ein Morse-Potential zu Grunde liegt:

$$\varepsilon_v = \frac{E_v}{hc} = \left(v + \frac{1}{2}\right) \tilde{\nu}_e - \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 \tilde{\nu}_e x_e \quad [\text{cm}^{-1}] .$$

- Skizzieren Sie die Potentiale des harmonischen und anharmonischen Oszillators (Morse-Potential) in ein und dasselbe Diagramm. Markieren Sie Nullpunktsenergie, Dissoziationsenergie und den Gleichgewichtsabstand im Schwingungsgrundzustand. Welche Eigenschaften eines realen Moleküls werden im Morse-Potential im Vergleich zum harmonischen Oszillator berücksichtigt?
- Leiten Sie einen allgemeinen Ausdruck für die Energiedifferenz (in cm^{-1}) zwischen einem energetisch höher gelegenen Schwingungsenergieniveau ε_v und dem Schwingungsgrundzustand ε_0 her.
- Berechnen Sie die Schwingungskonstante $\tilde{\nu}_e$ des anharmonischen Oszillators, die Anharmonizitätskonstante x_e , die Nullpunktsschwingungsenergie ε_0 und die Kraftkonstante k der Bindung.
- Berechnen Sie für den energiereichsten gebundenen Zustand des Morsepotentials ν_{max} und $E(\nu_{max})$. Bestimmen Sie daraus die Dissoziationsenergie D_0 von NO.

Aufgabe 2 – Heiße Bande

Die Schwingungskonstante des Iod-Moleküls beträgt $\tilde{\nu}_e = 215\text{ cm}^{-1}$ und die Anharmonizitätskonstante $x_e = 0,003$. Wie groß ist bei 200 K und bei 500 K die Intensität der heißen Bande im Vergleich zur Grundzustandsabsorption?

Besprechung am 25.11.2016

Aufgabe 3 – Molekülschwingungen, Isotopeneffekt

- a) Wie viele Normalschwingungen weisen die folgenden Moleküle auf: HBr, O₂, OCS, SO₂, BCl₃, HC≡CH, CH₄, CH₃Cl. Geben Sie jeweils die Anzahl der symmetrischen und asymmetrischen Valenzschwingungen sowie der Deformationsschwingungen an.
- b) Schätzen Sie mit Hilfe der Tabelle die Wellenzahl der Schwingungen für C-D, O-D und C=S ab.

Molekülgruppe	Wellenzahl / cm ⁻¹
O-H	3600
C-H	3300
C=O	1750

- c) Erklären Sie, warum man die C=O-Streckschwingung eines Aldehyds im IR-Spektrum als starke Absorption beobachtet, während die Absorption einer C=C-Schwingung bei Alkenen normalerweise sehr schwach ist.