

Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II

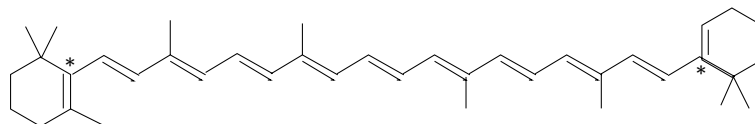
Übungsleiter: Tanja Asthalter · Zimmer 9-356 · Tel. 4464 · e-mail t.asthalter@ipc.uni-stuttgart.de

Übungsblatt 21

8. 1. 2003

Aufgabe 21.1

Die UV-Absorptionsbanden von konjugierten Polyenen lassen sich in recht guter Näherung durch das Modell eines Teilchens in einem eindimensionalen Kasten beschreiben. Die π -Elektronen des Moleküls lassen sich hierbei wie eine Ansammlung von unabhängigen Teilchen in diesem Kasten behandeln, ihre Wellenfunktionen sind diejenigen des Kastenpotentials. Diese Näherung nennt man die *Freie-Elektronen-Molekül-Orbital-Näherung* (FEMO-Näherung). Als Beispiel möge β -Carotin dienen, das u.a. für die Gelbfärbung von Karotten oder (nach dem Abbau des Chlorophylls) des herbstlichen Laubs (mit-)verantwortlich ist:



- a) Berechnen Sie die Kastenlänge für dieses Molekül, wenn der C-C-Abstand 1,4 Å beträgt. Das Elektron bewege sich annähernd längs der Verbindungslinie der beiden mit einem * markierten C-Atome, und der C-C-C-Bindungswinkel betrage 120°.

- b) Berechnen Sie den Erwartungswert des Impulses für das energetisch tiefste Orbital $n = 1$.

Mathematischer Hinweis:

$$\int \sin(ax) \cos(ax) dx = \frac{1}{2a} \sin^2(ax)$$

- c) Wie groß sind Impuls- und Geschwindigkeitsunschärfe der Elektronen in diesem Orbital?

- d) Zeigen Sie, daß die Wellenfunktionen für $n = 1$ und $n = 2$ orthogonal zueinander sind.

Mathematischer Hinweis:

$$\int \sin(ax) \sin(2ax) dx = \frac{\sin(ax)}{2a} - \frac{\sin(3ax)}{6a}$$

- e) Berechnen Sie die Wellenlänge der UV-Absorption. *Hinweis:* Carotin besitzt 22 π -Elektronen (überprüfen Sie dies anhand der obigen Strukturformel!), die in die Zustände der Quantenzahl $n = 1, 2, \dots, 11$ einzufüllen sind. Bei der Absorption wird ein Elektron vom obersten besetzten in das unterste unbesetzte Niveau angehoben.

Aufgabe 21.2

Die normierte Grundzustands-Eigenfunktion ψ_0 eines harmonischen Oszillators mit der reduzierten Masse μ und der Kraftkonstante D lautet

$$\psi_0 = N \cdot e^{-(\sqrt{\mu D} x^2 / 2\hbar)} \quad -\infty \leq x \leq \infty$$

Ist ψ_0 eine Eigenfunktion des Ortsoperators \hat{x} ? Wenn ja, geben Sie den Eigenwert an. Wenn nein, berechnen Sie den entsprechenden Erwartungswert.

Aufgabe 21.3

Die Streckschwingung des H_2 -Moleküls wird im Raman-Spektrum bei einer Wellenzahl von 4400 cm^{-1} beobachtet.

- a) Berechnen Sie die reduzierte Masse und die Kraftkonstante der Bindung.

- b) Wie ändert sich die Wellenzahl bei schwerem Wasserstoff D_2 , wenn die Stärke der Bindung in erster Näherung gleich bleibt?

bitte wenden

Aufgabe 21.4

Der starre Rotator mit raumfreier Achse ist das quantenmechanische Modell für die Rotationspektren.

- a) Geben Sie den Ausdruck für die Energieeigenwerte des starren Rotators an! Berechnen Sie mit Hilfe der Bindungslänge von 129 pm die Frequenz des Übergangs $J = 0 \rightarrow J = 1$ für Chlorwasserstoff H^{35}Cl und H^{37}Cl .
- b) Skizzieren Sie das Energieniveauschema des starren Rotators! Die Auswahlregel für Anregungen lautet $\Delta J = +1$. Da sich nicht alle Moleküle im Rotations-Grundzustand ($J=0$) befinden, können auch Moleküle mit $J=1,2,3 \dots$ weiter angeregt werden. Zeichnen Sie 3 mögliche Anregungen in Ihr Energieniveauschema ein.

Die Übungen sind im PDF-Format erhältlich unter <http://www.ipc.uni-stuttgart.de/~tanja/pcuebungen.html> .