

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I: Teil 1, Quantenmechanik (Modul A8)

Blatt 8

Aufgabe 19: *Kreisbewegung eines Elektrons*

Verwenden Sie die Lösungen der Schrödingergleichung für die Bewegung eines Teilchens auf einer kreisförmigen Bahn, um ein einfaches Modell für Benzol zu untersuchen. Bestimmen Sie hierzu unter Verwendung des experimentellen Resultats, dass Benzol bei $3.92 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ eine Absorptionsbande besitzt (diese kann einem HOMO-LUMO-Übergang zugeordnet werden), den effektiven 'Kreisradius' der π -Elektronen.

Beurteilen Sie das Ergebnis hinsichtlich der Werte für Einfachbindungslängen (1.54 Å), bzw. Doppelbindungslängen (1.35 Å).

Aufgabe 20: *Rotierendes zweiatomiges Molekül*

Ein rotierendes zweiatomiges Molekül lässt sich näherungsweise durch das Modell des starren Rotators beschreiben, wenn man annimmt, dass die beiden Kerne im Gleichgewichtsabstand R_0 fixiert sind.

Der starre Rotator besitzt folgenden Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \frac{\hat{l}^2}{2I} \quad (1)$$

mit dem Trägheitsmoment $I = \mu R_0^2$ und der reduzierten Masse μ .

1. Wie lauten die Eigenwertgleichungen des starren Rotators? Wie heißen die entsprechenden Eigenfunktionen?
2. Bestimmen Sie für das Molekül $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ die ersten drei Rotationsenergien in Einheiten von cm^{-1} (Gleichgewichtsabstand $R_0 = 1.128 \times 10^{-10} \text{ m}$). Bestimmen Sie ferner die Wellenzahl des Photons für den Übergang vom ersten zum zweiten angeregten Rotationszustand. In welchem Wellenbereich liegt dieser Übergang?
3. Geben Sie die Formel für die Wellenzahl eines Übergangs $l \rightarrow l + 1$ als Funktion des Trägheitsmoments an.

4. Berechnen Sie aus den experimentellen Daten für Rotationsübergänge des HCl (Tabelle) eine mittlere Rotationskonstante

$$B = \frac{h}{8\pi^2 I_C} \quad (2)$$

und daraus den Gleichgewichtsabstand R_0 .

Übergang $l \rightarrow l + 1$	Wellenzahl (cm^{-1})
3 \rightarrow 4	83.03
4 \rightarrow 5	104.10

Hinweis: $\mu_{CO} = 1.145 \times 10^{-26}$ kg, $\mu_{HCl} = 1.622 \times 10^{-27}$ kg