



Übungsblatt 7 - Moleküle

Abgabe: 28.05.2010 (bis 12:00 in Briefkasten auf N3)

Besprechung: 31.05.2010 und 02.06.2010

1. *Trägheitsmomente*

Berechnen Sie die Hauptträgheitsmomente

- (a) des linear gebundenen CO₂ Moleküls ($d_{\text{CO}} = 116.3 \text{ pm}$)
- (b) des H₂O Moleküls ($d_{\text{OH}} = 95.7 \text{ pm}$, $\alpha = 105^\circ$)
- (c) von schwerem Wasser D₂O ($d_{\text{OD}} = 94.2 \text{ pm}$, $\alpha = 104^\circ$)

2. *Starrer Rotator*

Betrachten Sie einen starren Rotator mit Trägheitsmoment J .

- (a) Drücken Sie die Gesamtenergie (d.h. die Hamiltonfunktion H) durch den Gesamtdrehimpuls \vec{L} aus.
- (b) Finden Sie den zugehörigen Hamiltonoperator.
- (c) Lösen Sie das quantenmechanische Eigenwertproblem.

3. *Morsepotential*

Bestimmen Sie die Parameter des Morsepotentials

$$V(r) = V_0 (1 - e^{-\alpha(r-r_0)})^2$$

des CO Moleküls. Aus einem Experiment sei ihnen bekannt, dass die Dissoziationsenergie 11.5 eV beträgt. Weiterhin wurde aus dem Rotationspektrum eine Frequenz von 4.01 cm^{-1} und aus einem Schwingungsspektrum eine Frequenz von 2107 cm^{-1} ermittelt.