



## 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 CO<sub>2</sub> Moleküls ( $d_{\text{CO}} = 116.3 \text{ pm}$ )
- (b) des H<sub>2</sub>O Moleküls ( $d_{\text{OH}} = 95.7 \text{ pm}$ ,  $\alpha = 105^\circ$ )
- (c) von schwerem Wasser D<sub>2</sub>O ( $d_{\text{OD}} = 94.2 \text{ pm}$ ,  $\alpha = 104^\circ$ )

### 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  $4.01 \text{ cm}^{-1}$  und aus einem Schwingungsspektrum eine Frequenz von  $2107 \text{ cm}^{-1}$  ermittelt.