

**Aufgabe 2: Dynamik kovalenter Moleküle****(20 Punkte)**

- a) Die Grundschrwingungen der kovalenten zweiatomigen Moleküle  $N_2$ ,  $O_2$  und  $F_2$  haben die folgenden Frequenzen:  $f_{N_2} = 70,0$  THz,  $f_{O_2} = 46,7$  THz,  $f_{F_2} = 26,8$  THz. Berechnen Sie die zugehörigen Werte der Kraftkonstanten  $k$ . (4 Punkte)
- b) Deuten Sie den Trend der Kraftkonstanten dieser drei unterschiedlichen Moleküle anhand der jeweiligen Anzahl der p-Elektronen pro Atom. (Ersatzlösung a:  $k_{N_2} = 2050 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$ ;  $k_{O_2} = 1200 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$ ;  $k_{F_2} = 400 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$ ) (3 Punkte)
- c) Skizzieren Sie in einem Bild das harmonische Potenzial  $V(x)$  und das tatsächliche Bindungspotenzial der Moleküle. Begründen Sie die Unterschiede. (3 Punkte)
- d) Berechnen Sie aus der  $O_2$ -Schwingungsfrequenz nach dem Modell des quantenmechanischen harmonischen Oszillators die Nullpunktsenergie und benennen Sie die Ursache dieser Nullpunktschwingung. Bestimmen Sie die Anzahl der Energieniveaus dieses harmonischen Oszillators bis zur Höhe der gemessenen Dissoziationsenergie  $D = 5,12 \text{ eV}$ . (3 Punkte)
- e) Die Quantisierung von Molekülrotationen lässt sich analog zum Bohrschen Atommodell quasi-klassisch über die Quantisierung des Drehimpulses  $L$  als  $L = n\hbar$  beschreiben. Berechnen Sie nach diesem Modell die Rotationsfrequenz  $f$  für ein starres  $O_2$ -Molekül. Bestimmen Sie die Wellenlänge elektromagnetischer Strahlung in diesem Frequenzbereich und benennen Sie den zugehörigen Wellenlängenbereich. Verwenden Sie bei der Rechnung den Atomabstand  $R_0 = 1,21 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ . (5 Punkte)
- f) Für viele zweiatomige Moleküle beobachtet man im infraroten Spektralbereich eine hohe Anzahl von Absorptionslinien. Beschreiben Sie qualitativ, woher diese Linien stammen und erklären Sie, warum diese bei den Molekülen  $N_2$ ,  $O_2$  und  $F_2$  nicht auftreten. (2 Punkte)