

Experimentalphysik IV

Abzugeben am 11.05.2015

5. Übung

5.1

- Wie sind die Atome der Moleküle Methan, Ethan, Ethen und Ethin im Raum angeordnet? Zeichnen Sie eine Skizze und geben sie näherungsweise die Bindungswinkel an.
- Wie unterscheiden sich cis-1,2-Dichlorethen und trans-1,2-Dichlorethen in ihrer räumlichen Struktur? Gibt es Unterschiede in den physikalischen Eigenschaften?
- Erläutern Sie das Franck-Gordon-Prinzip!
- Skizzieren Sie den Unterschied zwischen einem bindenden und einem antibindenden Molekülorbital. Wie unterscheiden sie sich energetisch?

5.2

Vor allem im Fall organischer Moleküle werden Bindungen häufig durch Hybridisierungen beschrieben. Zu diesem Zweck werden alle entarteten Orbitale von Valenzelektronen der an der Bindung beteiligten Atome linear kombiniert. Im folgenden gehe man von wasserstoffähnlichen Wellenfunktionen zur Hauptquantenzahl $n = 2$, also von 2s- und 2p-Zuständen aus.

- Bestimmen Sie die Punkte maximaler Ladungsdichte von sp -hybridisierten Elektronen. Gehen Sie von Wellenfunktionen der Form

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_s \pm \psi_p) \quad (1)$$

aus mit $\psi_s \propto (1 - \gamma r) \exp(-\gamma r)$ sowie $\psi_{p_i} \propto \gamma x_i \exp(-\gamma r)$, ($x_i = x, y, z$), und maximieren Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte als Funktion des Ortes.

- Vergleichen Sie das Ergebnis aus (a) mit den jeweiligen Ladungsschwerpunkten. Um die Schwerpunkte bzw. die Ortswerte zu bestimmen, muss die Wellenfunktion inklusive der Normierungsfaktoren integriert werden:

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{8\pi\alpha^3}} \left(1 - \frac{r}{2\alpha}\right) \exp\left(-\frac{r}{2\alpha}\right) \quad (2)$$

$$\psi_{p_x} = \frac{1}{\sqrt{8\pi\alpha^3}} \frac{x}{2\alpha} \exp\left(-\frac{r}{2\alpha}\right) \quad (3)$$

- Zeigen Sie dass die Wellenfunktionen aus a) orthonormal sind.

5.3

Eine Mikrowelle läuft durch HCl-Gas bei einem Druck von $p = 1$ mbar. Wie groß ist ihre Absorption bei 1 m Weglänge auf dem Übergang $J = 1 \rightarrow J = 2$ des Schwingungsgrundzustandes, wenn der Absorptionsquerschnitt $\sigma_{ik} = 10^{-18} \text{ m}^2$ ist. Temperatur $T = 100 \text{ K}$, Gleichgewichtsabstand $R_e = 127.4 \text{ pm}$, Rotationskonstante $B_e = 10.59 \text{ cm}^{-1}$, Schwingungskonstante $\omega_e = 2990 \text{ cm}^{-1}$.

Hinweis: Nähern sie die Zustandssumme durch das folgende Integral an:

$$Z = \int_0^\infty (2j + 1) \exp\left(-\frac{hcB_e J(J + 1)}{kT}\right) dJ. \quad (4)$$

5.4

Zahlreiche funktionelle Gruppen weisen charakteristische Schwingungsfrequenzen auf, die von der Art der chemischen Anknüpfung kaum beeinflusst werden. So liegt die Streckschwingung der O-H-Gruppe bei 3600 cm^{-1} , die der C-O-Einfachbindung bei 1150 cm^{-1} und die der C=S-Doppelbindung bei 1100 cm^{-1} . Schätzen Sie daraus die Frequenzen der Streckschwingungen von O-D und C-S ab.