

## 12. Übungsblatt (Übungsklausur-KlausurSS14) (zum 16.07.15)

### Aufgabe 1: Zweiatomiges Molekül (20 Punkte)

Das Calciumoxid  $\text{CaO}$  ( $^{40}\text{Ca}^{16}\text{O}$ ) besitzt einen Gleichgewichtsabstand von 182,21 pm und eine Schwingungskonstante  $\omega = 2\pi\nu$  mit  $\tilde{\nu} = 732,1 \text{ cm}^{-1}$ .

- Wie groß ist die Bindungsstärke? (5P)
- Wie groß ist die Vibrationszeit im Grundzustand? (5P)
- Wie groß ist die Rotationszeit in  $J=1$ ? (5P)
- Beim isotopenmarkierten  $^{40}\text{Ca}^{18}\text{O}$  sind die Bindungsstärke und der Gleichgewichtsabstand unverändert. Wie groß ist die Schwingungskonstante (in  $\text{cm}^{-1}$ ) und die Rotationskonstante (in  $\text{cm}^{-1}$ ) von diesem Isotop? (5P)

### Aufgabe 2: Kurze Verständnisaufgaben (10 Punkte)

Die niedrigsten elektronisch angeregten Singulett-Zustände des Calciumoxids liegen bei  $8433 \text{ cm}^{-1}$ ,  $11554,8 \text{ cm}^{-1}$ , und  $25991 \text{ cm}^{-1}$ .  $^{40}\text{Ca}^{16}\text{O}$  besitzt eine Schwingungsfrequenz  $\nu$  mit  $\tilde{\nu} = 732,1 \text{ cm}^{-1}$  (s. Aufg. 1). Die Rotationskonstante beträgt  $B = 0,4445 \text{ cm}^{-1}$ .

- In welchem Wellenlängenbereich liegen die Übergänge des Moleküls der (drei) rein elektronischen, des rein vibronischen und des rein rotatorischen ( $J''=0 \rightarrow J'=1$ ) Übergangs? (4P)
- Wie ist die Frequenz in Hz für die jeweiligen Übergänge? (4P)
- Welche Übergänge liegen im sichtbaren Spektralbereich (400nm – 800nm)? (2P)

### Aufgabe 3: Calcium (20 Punkte)

Die Grundzustandskonfiguration von Calcium ist  $[\text{Ne}] (3s)^2(3p)^6(4s)^2$

- Geben Sie den Term des Grundzustandes an. (2P)
- Wir befördern nun ein Elektron aus dem 4s-Zustand in das 3d-Orbital. Welche Russell-Saunders-Terme gibt es? Welches ist der energetisch niedrigste Russell-Saunders-Term (Begründen!)? (4P)
- Aus dem Grundzustand regen wir ein energetisch tiefer liegendes 3p-Elektron in das 3d-Orbital an. Welche Russell-Saunders-Terme ergeben sich nun? (5P)
- Welche Russell-Saunders-Terme gibt es, wenn beide 4s-Elektronen in zwei 3d-Orbitale überführt werden? (5P)
- Wir ionisieren ein Calciumatom, indem das 4s-Elektron aus dem Atom entfernt wird. Was ist der Grundzustandsterm des  $\text{Ca}^+$ ? (4P)

#### **Jokeraufgabe 4: Solvatisiertes Elektron (14 Punkte)**

Ein Alkalimetall löst sich in Ammoniak, indem sich ein Elektron und das Alkalikation voneinander trennen. Das Elektron wird von einigen Ammoniakmolekülen solvatisiert. Diese bilden ein Potential, das auf das Elektron wirkt. Dieses Potential kann durch eine dreidimensionale Box mit unendlich hohen Potentialwänden angenähert werden (Kantenlängen: a, b, c).

- a) Warum kann das Elektron nicht mit einer Wellenfunktion beschrieben werden, bei der eine der Quantenzahlen  $n_x$ ,  $n_y$ ,  $n_z$  gleich Null ist? (2P)
- b) Wie groß sind die ersten beiden möglichen Energieeigenwerte, wenn für den Kasten eine Kantenlänge von  $a = b = c = 0,85$  nm angenommen wird? (4P)
- c) Wie groß ist die Wellenlänge eines Übergangs zwischen den beiden Energieniveaus? Liegt der Übergang im sichtbaren Spektralbereich? (2P)
- d) Wie groß ist der Energieunterschied  $\Delta E = E_2 - E_1$ , wenn die Würfelgeometrie verloren ging und  $b=c = 0,85$  nm und a um 0,15 nm kürzer (3P)
- e) oder um 0.15 nm länger ist, als die anderen Beiden? (3P)