

Dr. Marco Busch
Institut für Physik
Humboldt-Universität zu Berlin
Brook-Taylor-Straße 6 (MHP)

Übungen zur Vorlesung „Mehrelektronenatome und Moleküle“

Blatt 12

(Abgabe: 27.01.2015 **VOR** der Vorlesung)

Aufgabe 26: (4 Punkte)

Im Rahmen der Modellbeschreibung als symmetrischer Kreisel hat das Ammoniakmolekül NH_3 die beiden Hauptträgheitsmomente $\Theta_{\perp}=2,86 \cdot 10^{-47} \text{ kg} \cdot \text{m}^2$ (senkrecht zur Symmetrieachse) und $\Theta_{\parallel}=4,38 \cdot 10^{-47} \text{ kg} \cdot \text{m}^2$ (parallel zur Symmetrieachse). Beschreiben Sie das Rotations-Raman-Spektrum bei Anregung mit der 366,732 nm-Linie eines Stickstofflasers und berechnen Sie dazu die Wellenzahlen der innersten Raman-Linien (bis einschließlich $J'=3$).

Aufgabe 27: (5 Punkte)

Gegeben seien die folgenden Elektronenterme verschiedener Zustände zweiatomiger homonuklearer Moleküle: ${}^1\Sigma_g^+$, ${}^1\Sigma_u^{+/-}$, ${}^1\Pi_g^{+/-}$ und ${}^1\Pi_u^{+/-}$. Bestimmen Sie zu welchen Werten der Rotationsquantenzahl J die existierenden bzw. erlaubten Terme gehören, wenn beide Kernspins gleich Null oder wenn beide Kernspins gleich Eins sind.

Aufgabe 28: (4 Punkte)

Wieviele Schwingungsniveaus gibt es unterhalb der Dissoziationsgrenze des elektronischen Grundzustands (${}^3\Pi_u$) und des ersten angeregten Zustands (${}^3\Pi_g$) im C_2 -Molekül? Berechnen Sie daraus die Dissoziationsenergien für die beiden Zustände. (Hinweis: Verwenden Sie dazu die Schwingungskonstanten $\bar{\nu}_e$ 1641,4 cm^{-1} (${}^3\Pi_u$) und 1788,2 cm^{-1} (${}^3\Pi_g$) sowie die Anharmonizitätskonstanten χ_e 0,00711 (${}^3\Pi_u$) und 0,00919 (${}^3\Pi_g$) für den elektronischen Grundzustand bzw. für den ersten angeregten Zustand.)