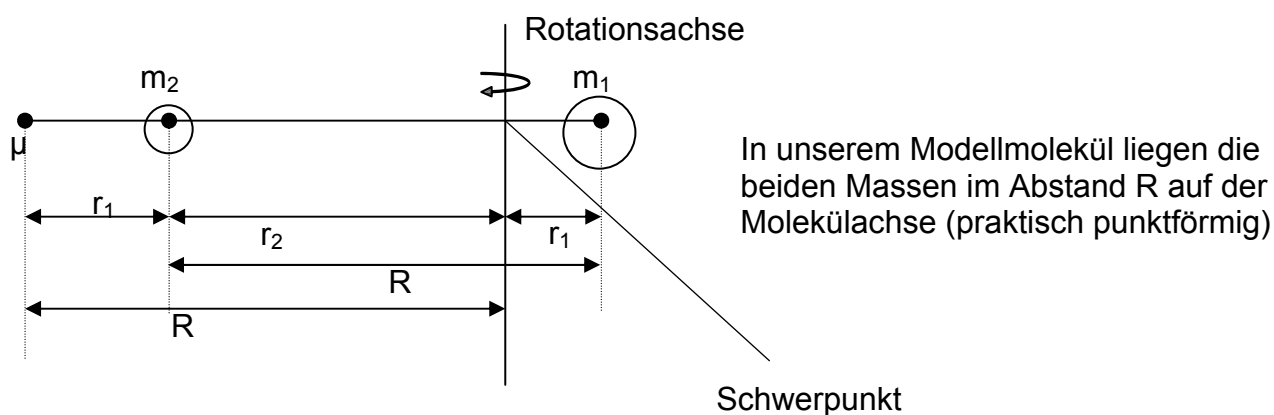


**Lösungen zum Übungsblatt 13**

**Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II**

13.1 Die Bindungslänge von  $^1\text{H}^{19}\text{F}$  ist 91,7 pm. Die Rotationsachse liegt im Schwerpunkt des Moleküls. In welchen Abständen zu  $^{19}\text{F}$  und  $^1\text{H}$  liegt die Rotationsachse?

**Lösung:**



Für die Lage des Schwerpunkts gilt:

$$m_1 r_1 = m_2 r_2$$

$r_2$  wird ersetzt:

$$m_1 r_1 = m_2 (R - r_1)$$

$$r_1 (m_1 + m_2) = m_2 R$$

$$r_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} R$$

$$= \frac{19 m_u}{1 m_u + 19 m_u} \cdot 91,7 \text{ pm}$$

$$= 87,11 \text{ pm}$$

$$r_2 = R - r_1 = 91,7 \text{ pm} - 87,1 \text{ pm} = 4,6 \text{ pm}$$

13.2 L Die Rotationskonstante des Molekül  $^{127}\text{I}^{79}\text{Br}$  ist  $B = 0,1142 \text{ cm}^{-1}$ . Die Atommassen sind  $m(^{127}\text{I}) = 126,90m_u$  und  $m(^{79}\text{Br}) = 78,92m_u$  ( $m_u = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ ). Berechnen Sie die Bindungslänge von  $^{127}\text{I}^{79}\text{Br}$ .

**Lösung:**

$$B = \frac{\hbar^2}{hc 2I}$$

$$I = \frac{\hbar^2}{hc 2B} = \frac{h^2}{4\pi^2 hc 2B} = \frac{h}{8\pi^2 c 2B}$$

$$= \frac{6,6 \cdot 10^{-34}}{8 \cdot \pi^2 \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 2 \cdot 0,1142} \left[ \frac{\cancel{\text{J}} \text{kg m}^2 \text{s}^{-2} \text{s}}{\text{ms}^{-1} \text{cm}^{-1}} = \text{kg m}^2 \cdot 10^{-2} \right]$$

$$I = \mu R^2$$

$$R = \sqrt{\frac{I}{\mu}}, \quad m(i) = M_r(i) \cdot m_u, \quad m_u = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\mu = \frac{m(\text{I})m(\text{Br})}{m(\text{I})+m(\text{Br})} = \frac{126,9 \cdot 78,92}{205,82} \cdot 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$= 8,077 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$$

$$R = \sqrt{\frac{2,211 \cdot 10^{-45} \text{ kgm}^2}{8,077 \cdot 10^{-26} \text{ kg}}}$$

$$= 1,65 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

13.3 L Berechnen Sie das Trägheitsmoment, den Betrag des Drehimpulses und die Energie der Rotation für den Zustand  $J = 1$  des  $^{16}\text{O}_2$  – Moleküls (Bindungslänge: 120,8 pm, Masse  $^{16}\text{O} : 15,99 m_u$ ).

**Lösung:**

$$m(\text{O}) = 16 m_u$$

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} = \frac{16 m_u \cdot 16 m_u}{16 m_u + 16 m_u} = 8 m_u$$

Für das Trägheitsmoment gilt:

$$\begin{aligned} I &= \mu r^2 = 8 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \cdot (120,8 \cdot 10^{-12} \text{ m})^2 \\ &= 1,9 \cdot 10^{-46} \text{ kg m}^2 \end{aligned}$$

Für den Betrag des Drehimpulses gilt:

$$|\vec{J}| = \sqrt{J(J+1)} \hbar = \sqrt{2} \hbar = \sqrt{2} \cdot 1 \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 1,4 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

Für die Energie gilt:

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2}{2 I} J(J+1) = \frac{(1 \cdot 10^{-34} \text{ Js})^2}{2 \cdot 1,9 \cdot 10^{-46} \text{ kg m}^2} \cdot 1 \cdot 2 \left[ \frac{\text{J}^2 \text{ s}^2}{\text{kg m}^2} = \frac{\text{J kg m}^2 \text{ s}^{-2} \text{ s}^2}{\text{kg m}^2} = \text{J} \right] \\ &= 5,2 \cdot 10^{-23} \text{ J} \end{aligned}$$

13.4 L  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  absorbiert Strahlung bei der Wellenzahl  $\tilde{\nu} = 2991 \text{ cm}^{-1}$ .

a) Wie groß ist die Kraftkonstante des Moleküls?

Ersetzt man  $^1\text{H}$  durch  $^2\text{H}$  (Deuterium), so ändert sich die Kraftkonstante nicht.

b) Berechnen Sie die Frequenz bei der  $^2\text{H}^{35}\text{Cl}$  absorbiert.

**Lösung:**

a) Es gilt:

$$2\pi\nu = \sqrt{\frac{f}{\mu}}$$

Die reduzierte Masse wird folgendermaßen berechnet:

$$\mu = \frac{m(\text{H}) \cdot m(\text{Cl})}{m(\text{H}) + m(\text{Cl})} = \frac{1 m_u \cdot 35,5 m_u}{1 m_u + 35,5 m_u} = 0,97 m_u$$

Obige Gleichung muss nach  $f$  aufgelöst werden und die Frequenz durch die Wellenzahl ersetzt werden:

$$f = 4\pi^2 \nu^2 \mu$$

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = c \cdot \tilde{\nu}$$

$$\rightarrow f = 4\pi c^2 \tilde{\nu}^2 \mu$$

$$= 4 \cdot \pi \cdot (3 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1})^2 \cdot (2991 \cdot 10^2 \text{ m}^{-1})^2 \cdot 0,97 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$= 511,8 \text{ kg s}^{-2} = 511,8 \text{ N m}^{-1}, \quad [\text{N} = \text{kg ms}^{-2}]$$

,

b) Wir benutzen erneut folgende Gleichung:

$$2\pi\nu = \sqrt{\frac{f}{\mu}}$$

Für die reduzierte Masse ergibt sich diesmal:

$$\mu = \frac{m(\text{D}) \cdot m(\text{Cl})}{m(\text{D}) + m(\text{Cl})} = \frac{2 m_u \cdot 35,5 m_u}{2 m_u + 35,5 m_u} = 1,89 m_u$$

Damit errechnet sich für die Frequenz:

$$\begin{aligned} \nu &= \sqrt{\frac{f}{\mu}} \cdot \frac{1}{2\pi} = \sqrt{\frac{511,8 \text{ kg s}^{-2}}{1,89 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}}} \cdot \frac{1}{2\pi} \\ &= 8,3 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1} \end{aligned}$$

- 13.5 L Bei der Wellenzahl  $\tilde{\nu} = 2170 \text{ cm}^{-1}$  beobachtet man die Absorption von Strahlung bei  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ . Setzen Sie voraus, dass dies ein harmonischer Oszillator ist und berechnen Sie
- die Schwingungsfrequenz des Moleküls
  - die Schwingungsperiode und
  - die Nullpunktsenergie.

**Lösung:**

$$\begin{aligned} \text{a) } \tilde{\nu} &= \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} && \rightarrow \nu = \tilde{\nu} \cdot c \\ &= 2170 \cdot 10^2 \text{ m}^{-1} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1} \\ &= 6,5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1} \end{aligned}$$

**b)** Die Schwingungsperiode ist die Zeit, die für eine Schwingung benötigt wird und errechnet sich folgendermaßen:

$$f = \frac{1}{\nu} = \frac{1}{6,5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}} = 1,5 \cdot 10^{-14} \text{ s}$$

**c)** Die Energie für einen harmonischen Oszillator wird durch folgende Gleichung beschrieben:

$$E = \left( \nu + \frac{1}{2} \right) h\nu$$

Für die Nullpunktsenergie gilt  $\nu = 0$

$$\begin{aligned} \rightarrow E &= \left( 0 + \frac{1}{2} \right) h\nu = \frac{1}{2} h\nu \\ &= \frac{1}{2} \cdot 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 6,5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1} \\ &= 2,15 \cdot 10^{-20} \text{ J} \end{aligned}$$

13.6 M Vor einer Kernfusion zweier Protonen müssen sich die beiden Teilchen bis auf den Kerndurchmesser annähern. Wie hoch muss die mittlere Temperatur sein, damit die Coulombabstossung überwunden werden kann und sich die zwei Protonen auf  $5 \cdot 10^{-15}$  m annähern können?

### Lösung:

Die Coulombabstossung wird mit folgender Gleichung beschrieben:

$$E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$$

Die thermische Energie der Translation  $E = \frac{3}{2}kT$  muss mindestens genauso groß sein, um die Abstoßung der Protonen zu überwinden. Da wir 2 Protonen haben, die diese Energie besitzen, ist die gesamte thermische Energie 3 kT.

$$E_{\text{coulomb}} = E_{\text{therm}}$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} = 3 kT$$

Wir lösen die Gleichung nach der Temperatur auf:

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \cdot \frac{1}{k \cdot 3} \\ &= \frac{1}{4\pi \cdot 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2}} \cdot \frac{(1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C})^2}{5 \cdot 10^{-15} \text{ m} \cdot 3 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}} \\ &\quad \left[ \frac{\text{C}^2}{\text{C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ mJ K}^{-1}} = \frac{\text{N m}^2 \text{ K}}{\text{mJ}} = \frac{\text{K}}{\text{mJ}} = \text{K} \right] \\ &= 1,1 \cdot 10^9 \text{ K} \end{aligned}$$