

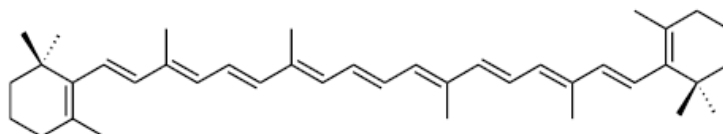
Übungsblatt Nr. 6

Ausgabe: 02.06.2016

Rückgabe: 09.06.2016 (vor der Vorlesung)

Aufgabe 1: Teilchen im Kasten

Die Energien der Molekülorbitale linearer Polyene können in erster Näherung mit Hilfe des Modells des eindimensionalen Potentialkastens vorhergesagt werden. Die Abbildung zeigt den Farbstoff β -Carotin:



Berechnen Sie die theoretische Wellenlänge des HOMO-LUMO-Übergangs von β -Carotin. Die mittlere C-C-Bindungslänge der konjugierten Doppelbindungen sei 140 pm. Beachten Sie, dass das Chromophor alle Doppelbindungen mit einschließt und berücksichtigen Sie eine weitere mittlere Bindungslänge für die Gesamtlänge des Potentialkastens.

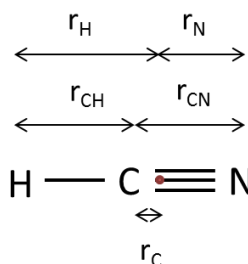
Aufgabe 2: Energiebilanz

Betrachten Sie die Reaktion $\text{HCl} + \text{D}_2 \rightarrow \text{DCl} + \text{HD}$. Die Wellenzahlen für die Gleichgewichtsschwingung lauten $\tilde{\nu}_{\text{HCl}} = 2885 \text{ cm}^{-1}$, $\tilde{\nu}_{\text{DCl}} = 1990 \text{ cm}^{-1}$, $\tilde{\nu}_{\text{D}_2} = 2990 \text{ cm}^{-1}$ und $\tilde{\nu}_{\text{HD}} = 3627 \text{ cm}^{-1}$. Berechnen Sie den Energieumsatz der Reaktion in kJ/mol. Wird Energie freigesetzt oder verbraucht? Nehmen sie für die Potentiale das Modell des harmonischen Oszillators an und dass sich alle Moleküle jederzeit im Schwingungsgrundzustand befinden.

Aufgabe 3: Trägheitsmoment

Berechnen Sie das Trägheitsmoment vom linearen dreiatomigen Molekül $\text{H-C}\equiv\text{N}$ mit den Bindungslängen $r_{\text{CH}} = 0,1063 \text{ nm}$ für CH und $r_{\text{CN}} = 0,1155 \text{ nm}$ für CN unter der Verwendung der relativen Atommassen $m_{\text{H}} = 1 \text{ u}$, $m_{\text{C}} = 12 \text{ u}$ und $m_{\text{N}} = 14 \text{ u}$.

Verwenden Sie für den Schwerpunkt: $r_{\text{H}} \cdot m_{\text{H}} + r_{\text{C}} \cdot m_{\text{C}} = r_{\text{N}} \cdot m_{\text{N}}$



• = Schwerpunkt