

Übungen zur Vorlesung Fortgeschrittene Theoretische Chemie A

9. Betrachten Sie ein homonukleares zweiatomiges Molekül. Die Atommasse sei m . Das abstandsabhängige Potential $V(r)$ sei ein Morsepotential:

$$V(r) = D (1 - e^{-\alpha(r-r_0)})^2.$$

- (a) Bestimmen Sie das Potentialminimum.
- (b) Betrachten Sie den Hamiltonoperator in massengewichteten kartesischen Koordinaten der Atome. Die Molekülorientierung sei so gewählt, dass die x -Achse auf der Molekülachse und der Schwerpunkt im Ursprung liegt. Geben Sie die harmonische Näherung für das Potential in diesen Koordinaten an.
- (c) Bestimmen Sie die Normalkoordinaten und die Schwingungsfrequenz in harmonischer Näherung.
- (d) Die Polarkoordinaten für den Atom-Atom-Abstand sind definiert durch:

$$x_2 - x_1 = r \sin \vartheta \cos \varphi, \quad y_2 - y_1 = r \sin \vartheta \sin \varphi, \quad z_2 - z_1 = r \cos \vartheta$$

Geben sie das in Teilaufgabe 1b ermittelte harmonische Potential als Funktion dieser Polarkoordinaten an. Hängt dieses Potential von der räumlichen Orientierung des Moleküls ab?