

Modul14 – Physikalische Chemie 2 – Klausur SS 2015 (90 min.)

(maximal 80 Punkte, 40 zum Bestehen)

1 Statistische Thermodynamik (10 + 8 + 8 + 12 = 38 Punkte)

- 1.1. Geben Sie sämtliche Voraussetzungen der Boltzmann-Statistik, sowie einen Ausdruck für die daraus resultierende Besetzungswahrscheinlichkeit N_i/N , an. Für welches System ist diese Statistik direkt anwendbar?
- 1.2. Leiten Sie einen Zusammenhang zwischen der molekularen Zustandssumme und der inneren Energie her.
- 1.3. Leiten Sie den Formelausdruck für die Vibrationszustandssumme eines 2-atomigen Moleküls bei Raumtemperatur her (Modell: Harmonischer Oszillator).
- 1.4. Berechnen Sie die molekulare Zustandssumme der Molekülschwingung eines 2-atomigen Moleküls bei $T = 500^\circ\text{C}$ und bei $T = 5000^\circ\text{C}$, falls der entsprechende Übergang im IR-Spektrum bei $\lambda = 7000 \text{ nm}$ gefunden wird. Diskutieren Sie das Ergebnis, indem Sie jeweils auch die Summe über die ersten beiden Glieder explizit berechnen.

2. Spektroskopie (10 + 10 + 10 + 12 = 42 Punkte)

- 2.1. Skizzieren Sie knapp aber vollständig die quantenmechanische Beschreibung der optischen Absorptionsspektroskopie (wichtige Grundformeln, Lösungsansätze für sämtliche Wellenfunktionen, keine mathematischen Berechnungen). Was versteht man unter dem Übergangsdipolmoment (Definition!)?
- 2.2. Für welche organischen Moleküle findet man Phosphoreszenz (mit kurzer Begründung)? Zeichnen Sie auch ein entsprechendes Jablonski-Diagramm, und geben Sie für sämtliche (!) Übergänge plausible Zeitkonstanten an.
- 2.3. Skizzieren Sie das Term-Übergangsschema der Raman-Streuung, und leiten Sie die Formelausdrücke für die charakteristischen Frequenzen der entsprechenden Emissionslinien klassisch-physikalisch her.
- 2.4. Geben Sie für die Moleküle H_2O sowie NH_3 jeweils die Charaktere der reduziblen Darstellungen sämtlicher Symmetrioperationen an. Schreiben Sie zur Begründung jeweils die komplette Diagonale der Transformationsmatrices auf (als Zeilenvektor).

Hinweise: $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$