

Teilaufgabe 3: Rotations-Schwingungs-Spektrum

(30 Punkte)

An HCl-Gas mit isotopenreinem ^{35}Cl werde bei Zimmertemperatur (300 K) ein Absorptionsspektrum im Infraroten aufgenommen. Beobachtet werden zwei Absorptionsbanden, die aus vielen äquidistanten Einzellinien bestehen. Die Mittenfrequenz liegt bei $\nu_S = 8,66 \cdot 10^{13}$ Hz. Die Einzellinien, in die jede der Banden aufgespalten ist, haben den Abstand $\Delta\nu = 6 \cdot 10^{11}$ Hz.

Berechnen Sie

- a) die Energie E_S der beiden untersten Schwingungsniveaus, (3 Punkte)
- b) das Verhältnis der Besetzungszahlen dieser beiden Niveaus, (2 Punkte)
- c) das Trägheitsmoment Θ des Moleküls, (3 Punkte)
- d) den Gleichgewichtsabstand r_0 der Atome, (4 Punkte)
- e) die Kraftkonstante k der Molekülbindung! (3 Punkte)
- f) Skizzieren Sie das Spektrum $I(\nu)$ und begründen Sie den Intensitätsverlauf! (5 Punkte)

Die potentielle Energie kann als Funktion des Abstandes r zwischen den Atomen durch folgende Beziehung beschrieben werden:

$$V(r) = V_0 \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right]$$

- g) Skizzieren Sie den Verlauf des Potentials. Geben Sie (mit Begründung) die Bedeutung von V_0 und a an! (4 Punkte)
- h) Tragen Sie in die gleiche Skizze zum Vergleich den Verlauf des Potentials ein, den man in der harmonischen Näherung zu Grunde legt, und begründen Sie die Unterschiede! (2 Punkte)
- i) Berechnen Sie den Zusammenhang der Größen V_0 und a mit dem Gleichgewichtsabstand r_0 und der Kraftkonstanten k der Molekülbindung. (4 Punkte)
(Hinweis: Entwickeln Sie das oben angegebene Potential in eine Taylorreihe nach $(r - r_0)$ bis zur benötigten Ordnung. Als Zahlenwerte für Gleichgewichtsabstand und Kraftkonstante können Sie die Näherungen $r_0 = 0,135$ nm und $k = 480$ N/m verwenden.)

- 5 -