

Besprechung am 04.07.2024

## Übungsblatt 9

### 1) HCl als starrer Rotor

Betrachten Sie das Molekül  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ . Der Atomabstand beträgt 127 pm. Nehmen Sie an, dass es sich um einen starren Rotor handelt.

- Berechnen Sie den Schwerpunkt des Moleküls. Hinweis: Die Berechnung ist einfacher, wenn man das Cl-Atom zunächst als Koordinatenursprung festlegt (später wird der Schwerpunkt der Koordinatenursprung).
- Berechnen Sie das Trägheitsmoment, die Rotationskonstante  $\tilde{B}$  und die Rotationsenergie  $E_J$  für den Zustand  $J=1$
- Berechnen Sie auch die Rotationskonstanten für die Isotope  $^2\text{H}^{35}\text{Cl}$  und  $^1\text{H}^{37}\text{Cl}$ . Nehmen Sie an, dass sich der Bindungsabstand nicht ändert.

### 2) Mikrowellenspektrum von CO

Das Mikrowellenspektrum von  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  zeigt unter der Annahme des starren Rotors äquidistante Absorptionslinien mit einem Abstand von 115.8 GHz.

- Skizzieren Sie das Rotationsenergiediagramm eines starren Rotors für  $J = 1; 2; 3$
- Berechnen Sie den Atomabstand von C und O.
- Die achte Absorptionslinie weist die höchste Intensität auf. Bestimmen Sie, bei welcher Temperatur das Spektrum aufgenommen wurde. Berechnen Sie das Besetzungsverhältnis  $n_{J_{max}}/n_0$
- Ändert sich  $J_{max}$  bei dieser Temperatur für das Isotop  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ ? Nehmen Sie an, dass sich der Bindungsabstand nicht ändert.

### 3) Rotations-Schwingungs-Spektrum von HCl

Die ersten Linien des P- und R-Zweigs des Rotation-Schwingungs-Spektrums von  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  sind bei  $2966.7\text{ cm}^{-1}$  bzw.  $3009.5\text{ cm}^{-1}$  zu finden. Berechnen Sie die Bindungslänge und Kraftkonstante der H-Cl-Bindung. Nehmen Sie ein harmonisches Potential und das Modell des starren Rotors an.