

Übungsblatt 8

zur Vorlesung Physikalische Chemie Vertiefung Theorie 1
ausgegeben am Mittwoch, den 4. Dezember 2019 (online)
Besprechung am Montag, den 9. Dezember 2019 von 14-16 Uhr in T2-205
und Dienstag, den 10. Dezember 2019 in C01-220, T2-213, U2-113

Aufgabe 1: Rydberg-Spektren

Das doppelt ionisierte Lithium-Ion Li^{2+} hat nur ein Elektron, sein Spektrum muss deshalb dem des Wasserstoffs ähneln. Die ersten Linien der am weitesten im UV liegenden Serie findet man bei: $740\,747\text{ cm}^{-1}$, $877\,924\text{ cm}^{-1}$, $925\,933\text{ cm}^{-1}$.

- Zeigen Sie anhand dieser Daten, dass man die Lage der Energieniveaus durch die Gleichung $-K/n^2$ beschreiben kann und ermitteln Sie die Konstante K .
- Bilden Sie das Verhältnis von K mit der Rydberg-Konstante \mathfrak{R}_∞ . Fällt Ihnen eine Erklärung für die Größe des Wertes ein?

Aufgabe 2: Rotationsspektrum von HCl

In einem Experiment wird das Rotationsspektrum von HCl untersucht. Verwenden Sie bei allen Rechnungen die Rotationskonstante $B = 10.575\text{ cm}^{-1}$.

- Geben Sie die relevanten Auswahlregeln und Formeln zur Berechnung der Energieniveaus an.
- Leiten Sie eine Formel zur Berechnung der Linienpositionen her. Wie groß ist der Abstand zweier benachbarter Linien?
- Bestimmen Sie die ersten vier Linien für HCl und skizzieren Sie das Spektrum.
- Beschreiben Sie qualitativ die Veränderung in dem Spektrum, wenn Sie statt HCl Kohlenmonoxid untersuchen würden.

Aufgabe 3: Bestimmung von Molekülkonstanten

Die Wellenzahl des ($J = 3 \leftarrow 2$)-Übergangs des starren Rotators $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ beträgt 63.54 cm^{-1} . Es gilt für die Rotationskonstante:

$$B = \frac{h}{8\pi^2 c I} \text{ und Trägheitsmoment } I = \mu r^2 \text{ mit der reduzierten Masse } \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

- Wie groß ist die Rotationskonstante? Vergleichen Sie mit dem in Aufgabe 2 verwendeten Wert und kommentieren Sie.
- Wie groß ist das Trägheitsmoment?
- Wie groß ist die Bindungslänge?

Aufgabe 4: Boltzmann-Verteilung

Welche Temperaturen sind jeweils notwendig, um beim CO-Molekül ein Besetzungsverhältnis von 1 % zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand bei elektronischer Anregung, bei der Schwingungsanregung und bei der Rotation zu erreichen? Die Energiedifferenzen sind bei der elektronischen Anregung $\tilde{\nu}_{el} = 64746\text{ cm}^{-1}$, bei der Schwingungsanregung $\tilde{\nu}_{vib} = 2170\text{ cm}^{-1}$ und bei der Rotation $\tilde{\nu}_{rot} = 7,73\text{ cm}^{-1}$.