



# Übungsblatt Nr. 11

Ausgabe: 07.07.2016 Rückgabe: 14.07.2016 (vor der Vorlesung)

## Aufgabe 1: Intensität von Rotationslinien

Das Übergangsdipolmoment zwischen zwei Rotationsniveaus eines linearen Moleküls hängt näherungsweise nur vom elektrischen Dipolmoment des Moleküls ab und kann somit für alle reinen Rotationsübergänge als konstant angesehen werden.

- Im reinen Rotationsspektrum von  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  detektiert man gleiche Intensitäten für die beiden Linien bei  $106.0\text{ cm}^{-1}$  und  $233.2\text{ cm}^{-1}$ . Die Rotationskonstante von  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  beträgt  $10.6\text{ cm}^{-1}$ . Berechnen Sie die Temperatur des Gases.  
Tipp: Berechnen Sie zunächst die Rotationsquantenzahlen der jeweiligen Ausgangszustände der beiden Absorptionslinien im Modell des starren Rotators und nehmen Sie an, dass deren Intensität nur von der Besetzung der Ausgangszustände abhängt.
- Skizzieren Sie schematisch die relativen Intensitäten des Rotationsspektrums von  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  bei Raumtemperatur (298 K), sowie bei der in a) berechneten Temperatur.

## Aufgabe 2: Nicht-starrer Rotator

Die Energie eines nicht-starren rotierenden Moleküls kann mit Hilfe der Rotationskonstante  $B$  und der Zentrifugaldehnungskonstante  $D$  durch die folgende Gleichung beschrieben werden:

$$\varepsilon_J = BJ(J + 1) - DJ^2(J + 1)^2 \quad [\text{cm}^{-1}]$$

Die ersten vier Energieniveaus des Moleküls  $^1\text{H}^{127}\text{I}$  liegen bei  $\varepsilon_0 = 0\text{ cm}^{-1}$ ,  $\varepsilon_1 = 12.8519\text{ cm}^{-1}$ , bei  $\varepsilon_2 = 38.5507\text{ cm}^{-1}$  und  $\varepsilon_3 = 77.0866\text{ cm}^{-1}$ . Dabei gibt  $\varepsilon_J$  die Energie des Zustands  $J$  in Wellenzahlen an.

- Betrachten Sie  $^1\text{H}^{127}\text{I}$  als nicht-starren Rotator und berechnen Sie die Rotationskonstante  $B$ , sowie die Zentrifugaldehnungskonstante  $D$  (in  $\text{cm}^{-1}$ ).
- Berechnen Sie mit Hilfe von  $B$  und  $D$  die Kraftkonstante  $k$  des Moleküls.
- Wie verhalten sich die Spektrallinien eines nicht-starren Rotators im Vergleich zum starren Rotator?

Der Übergang zwischen zwei benachbarten Rotationsniveaus im nicht-starren Rotator entspricht:

$$\tilde{\nu}_{J+1 \leftarrow J} = \varepsilon_{J+1} - \varepsilon_J = 2B(J + 1) - 4D(J + 1)^3 \quad [\text{cm}^{-1}]$$

- Leiten Sie diesen Ausdruck aus der Gleichung für die einzelnen Energieniveaus her und berechnen Sie die Wellenzahl des  $11 \leftarrow 10$ -Übergangs im Rotationsspektrum von  $^1\text{H}^{127}\text{I}$ .