

6. Übungsblatt zur Vorlesung SMKS-1 (WS 25/26)

Meisner/Seidel/Kühnemuth

Abgabe bis Sonntag 30.11.2025, 24:00 Uhr
Besprechung: Dienstag, 2.12.2025

Wiederholungsfragen:

- 6.1) Wie kann man aus Rotationsspektren Strukturdaten gewinnen?
- 6.2) Wie koppelt der Kernspin mit der Rotation eines H₂-Moleküls und welche Auswirkungen sind bei niedrigen und hohen Temperaturen zu beobachten?
- 6.3) Wie unterscheiden sich die Linienabstände im Mikrowellenspektrum von denen im Rotations-Raman-Spektrum?

Aufgabe 23: Rotationsspektroskopie

- a) Welche Informationen erhält man aus der Rotationsspektroskopie?
- b) Mikrowellen-Rotationsspektroskopie:

- i) Welche Bedingung muss für ein zweiatomiges Molekül erfüllt sein, damit man reine Rotationsspektroskopie durchführen kann?
- ii) Welche Auswahlregeln gibt es?
- iii) Wie unterscheiden sich die Spektren (Energie in Abhängigkeit von J) eines starren und eines nicht-starren Rotators?
- iv) Was ändert sich bei höheren Schwingungen in einem realen Molekül?

Aufgabe 24: Rotationsspektroskopie des HCl (Besetzung der Niveaus)

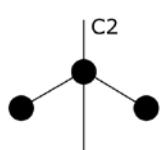
Die Intensität einer Rotations-Absorptionsbande hängt zum einen von der Besetzungszahl des Zustandes, aus dem die Anregung stattfindet und zum anderen vom Quadrat des Übergangsdipolmoments des Übergangs ab: $I \propto N_J |\mu_{J,J+1}|^2$. Dabei ist das Quadrat des Übergangsdipolmoments von der Drehimpulsquantenzahl J und dem rein elektronischen Dipolmoment μ_e abhängig: $|\mu_{J,J+1}|^2 = \mu_e^2 \frac{J+1}{2J+1}$. Die Besetzungszahl N_J kann nach der Boltzmann-Statistik berechnet werden: $\frac{N_J}{N_0} = \frac{g_J}{g_0} \cdot e^{-\frac{\Delta E}{kT}}$. Dabei sind g_J und g_0 die Entartung des Zustands J bzw. des Grundzustands und ΔE die Energiedifferenz zwischen beiden Zuständen.

Berechnen Sie die Form des Rotationsspektrums für ¹H³⁵Cl bei 300K für Drehimpulsquantenzahlen von $J=0$ bis $J=10$

- a) indem Sie die spektralen Gewichte nur aufgrund der Boltzmann-Faktoren ausrechnen
- b) indem Sie außerdem die Abhängigkeit des Übergangsmatrixelements berücksichtigen.
Hinweis: Die Entartung der Rotationsniveaus ist $2J+1$. Für HCl ist $r = 127,5$ pm.

Aufgabe 25: Trägheitsmoment des H₂O

Wie groß ist das Trägheitsmoment eines H₂O-Moleküls um seine zweizählige Achse (die Winkelhalbierende des HOH-Winkels (siehe Skizze))?



Ansatz: Nach der Gleichung $I = \sum_i m_i \cdot r_i^2$ ist das Trägheitsmoment gleich der Summe über alle Massen multipliziert mit dem Quadrat ihres Abstandes von der Drehachse. Der Abstand lässt sich über einige trigonometrische Beziehungen durch die Bindungslänge und den Bindungswinkel ausdrücken.

Aufgabe 26: Das CO-Molekül

Das CO-Molekül hat eine Bindungslänge von 113 pm.

- a) Berechnen Sie das Trägheitsmoment des Moleküls.
- b) Berechnen Sie die Energiedifferenzen für die Rotationszustände E_J mit den 5 niedrigsten Energien.
- c) Geben Sie eine allgemeine Formel für die Energiedifferenz $\Delta E = E_{J+1} - E_J$ an.
- d) Berechnen Sie die Rotationskonstante B .