

Dr. Marco Busch
Institut für Physik
Humboldt-Universität zu Berlin
Brook-Taylor-Straße 6 (MHP)

Übungen zur Vorlesung „Mehrelektronenatome und Moleküle“

Blatt 13

(Abgabe: 03.02.2015 **VOR** der Vorlesung)

Aufgabe 29: (5 Punkte)

Im Infrarotspektrum des Chlorwasserstoff-Moleküls (HCl-Molekül) lassen sich bei folgenden Wellenzahlen Banden von Übergängen zwischen der Grundschwingung und den ersten vier Oberschwingungen experimentell beobachten:

$$\begin{aligned}v=0 \rightarrow v=1: & 2885,90 \text{ cm}^{-1} \\v=0 \rightarrow v=2: & 5668,00 \text{ cm}^{-1} \\v=0 \rightarrow v=3: & 8347,00 \text{ cm}^{-1} \\v=0 \rightarrow v=4: & 10923,10 \text{ cm}^{-1}\end{aligned}$$

Berechnen Sie in erster Näherung die Anharmonizitätskonstante und vergleichen Sie die experimentell beobachteten Wellenzahlen mit den von Ihnen für die Modelle des harmonischen und des anharmonischen Oszillators berechneten Wellenzahlen. Berechnen Sie die Dissoziationskonstante des HCl-Moleküls mit dem Modell des anharmonischen Oszillators.

Aufgabe 30: (6 Punkte)

Auf der Rückseite ist ein Ausschnitt eines gemessenen Infrarotspektrums des Jodwasserstoff-Moleküls (HI-Molekül) abgebildet. Ordnen Sie die Banden den einzelnen spektralen Übergängen zu, in dem Sie dafür die Lage der Rotationsenergieniveaus der beiden beteiligten Schwingungszustände in einem gemeinsamen Energieniveau-Schema skizzieren. Beschriften Sie dabei jedes Energieniveau mit der dazugehörigen Schwingungs- und der dazugehörigen Rotationsquantenzahl. Berechnen Sie die beiden Rotationskonstanten, die Trägheitsmomente und die Kernabstände für den Schwingungsgrundzustand und den ersten angeregten Schwingungszustand. (Hinweis: Nutzen Sie zur Berechnung der beiden Rotationskonstanten das Verfahren der Kombinationsdifferenzen.)

