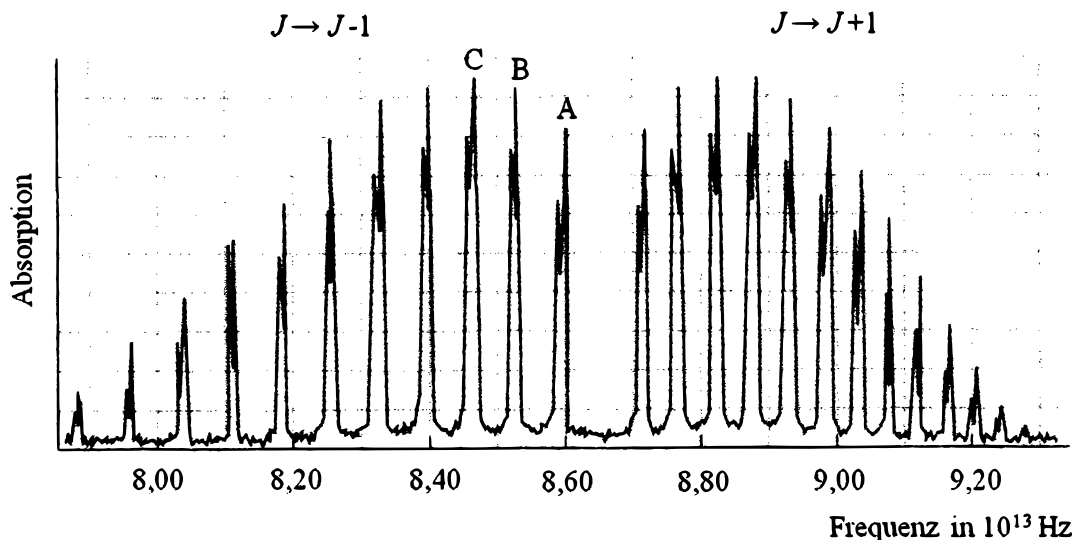


Aufgabe 2: Thermische Besetzung von Rotations- und Schwingungsniveaus (20 Punkte)

Die Abbildung oben zeigt ein gemessenes Rotationsschwingungsspektrum von HCl-Gas. Hierbei bezeichnet J die Rotationsquantenzahl. Der Schwingungsübergang findet vom Zustand mit der Schwingungsquantenzahl $\nu = 0$ zu $\nu = 1$ statt.

- Skizzieren Sie die Rotations-Schwingungsniveaus zu den Schwingungsquantenzahlen $\nu = 0$ und $\nu = 1$ und zeichnen Sie die Übergänge, die zu den mit A, B und C bezeichneten Absorptionsmaxima gehören, durch Pfeile ein. Geben Sie in der Skizze auch die Rotationsquantenzahlen der beteiligten Niveaus an. (3 P)
- Im HCl-Gas sind die Chlor-Isotope ^{35}Cl und ^{37}Cl enthalten. Begründen Sie anhand der relativen Intensitäten der Liniendubletts in der Abbildung, welches der beiden Isotope in dem untersuchten Gas häufiger vorhanden ist. (2 P)
- Schätzen Sie die Frequenz des reinen Schwingungsübergangs aus der Abbildung ab. Bestimmen Sie damit das Verhältnis der Zahl der $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ -Moleküle, die sich im ersten angeregten Schwingungszustand befinden, zu der Zahl der Moleküle im Schwingungsgrundzustand. Geben Sie das Verhältnis für die Temperaturen 300 K und 1500 K an. (4 P)
- Aus der Messung kann man über alle Maxima der beiden Liniengruppen gemittelt einen mittleren Frequenzabstand der Rotationsübergänge von $\Delta f = 0,65 \cdot 10^{12}$ Hz bestimmen. Schätzen Sie damit den Gleichgewichtsabstand R_0 der beiden Atome im Molekül ab. [Ersatzlösung: $R_0 = 0,135$ nm] (2 P)
- Das Dipolmoment pro $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ -Molekül wurde zu $p = 3,70 \cdot 10^{-30}$ Cm gemessen. Betrachten Sie das Molekül als idealen Dipol aus zwei Punktladungen. Die Ladungen seien betragsgleich aber von unterschiedlichem Vorzeichen. Bestimmen Sie damit die Partialladung am H- und am Cl-Atom in Einheiten der Elementarladung. (2 P)

Fortsetzung nächste Seite!

- f) Berechnen Sie die Rotationskonstante $B = E_J / [J(J+1)]$ für das $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ -Molekül in der Einheit Joule. [Ersatzlösung: $B = 2,0 \cdot 10^{-22}$ J] (2 P)
- g) Das Verhältnis R der Anzahl der Moleküle, die sich im Rotationszustand mit der Quantenzahl $J > 0$ befinden, zur Anzahl der Moleküle im Grundzustand ($J = 0$) in einem Gas der Temperatur T ist gegeben durch

$$R = (2J + 1) \exp\left[\frac{E_0 - E_J}{kT}\right],$$

wobei E_0 die Grundzustandsenergie ist. Leiten Sie daraus eine Gleichung für die Rotationsquantenzahl J , für die Sie das maximale Absorptionssignal erwarten, in Abhängigkeit von der Temperatur her. Geben Sie damit einen begründeten Schätzwert für die Temperatur an, die das HCl-Gas bei der Messung des Rotationsschwingungsspektrums in der Abbildung hatte. (5 P)

- 6 -