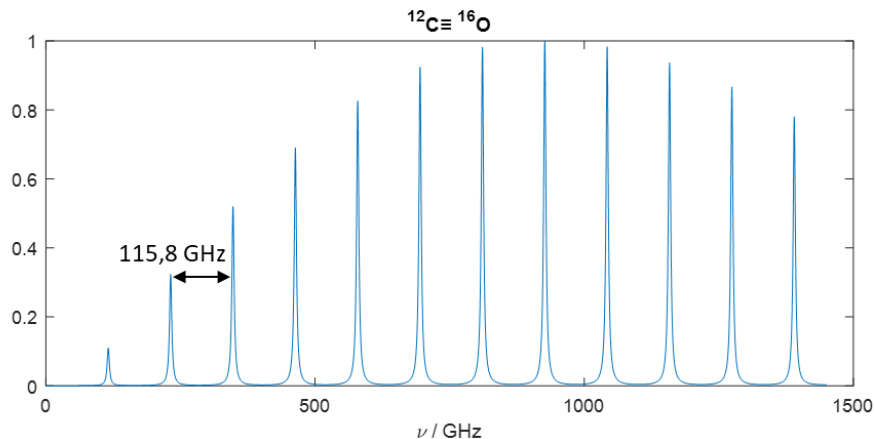


Übungsblatt 7

1) Mikrowellenspektroskopie zweiatomiger Moleküle

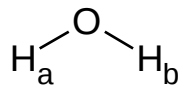
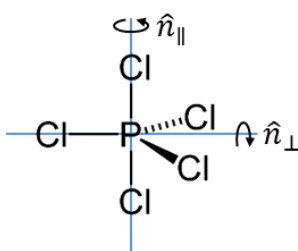
In der folgenden Abbildung ist das Mikrowellenspektrum von $^{12}\text{C}\equiv^{16}\text{O}$ dargestellt.



- Berechnen Sie die Länge der C≡O-Bindung.
- Skizzieren Sie das Rotationsenergiendiagramm des Moleküls für $J \in \{0, 1, 2\}$.
- Bestimmen Sie die Temperatur, bei der das Spektrum aufgenommen wurde.
- Skizzieren Sie das Mikrowellenspektrum von $^{13}\text{C}\equiv^{16}\text{O}$ bei derselben Temperatur. Benutzen Sie dafür Wellenzahleinheiten.

2) Trägheitsmoment und Trägheitstensor

- Berechnen Sie das Trägheitsmoment von $^{31}\text{P}^{35}\text{Cl}_5$ (trigonal-bipyramidale Struktur; $R_{\text{P-Cl, ax}} = 214 \text{ pm}$, $R_{\text{P-Cl, äq}} = 202 \text{ pm}$) um die Drehachsen $\hat{n}_{\parallel}$ und $\hat{n}_{\perp}$.
- Berechnen Sie den Trägheitstensor $\tilde{I}$ von H_2O .



	$x / \text{\AA}$	$y / \text{\AA}$	$z / \text{\AA}$
O	0,000	0,000	0,000
H _a	-0,757	-0,587	0,000
H _b	0,757	-0,587	0,000

3) Zentrifugale Aufweitung (Bonusaufgabe)

- Berechnen Sie die Winkelgeschwindigkeit ω von $^{127}\text{I}_2$ ($R_0 = 2,67 \text{ \AA}$) bei einer Temperatur von 296 K im höchstbesetzten Rotationszustand.
- Die Kraftkonstante der I–I-Bindung beträgt 1,7 N/m. Bestimmen Sie die Aufweitung der Bindungslänge R in dem oben berechneten Rotationszustand aufgrund der Zentripetalkraft F_Z (Hinweis: Setzen Sie die Rückstellkraft F_R und die Zentripetalkraft F_Z gleich; $|F_R| = k \cdot (R - R_0)$, $|F_Z| = \mu \omega^2 R \approx \mu \omega^2 R_0$).