

## **Rotations-Schwingungs-Spektroskopie**

(Version 01a-2006)

### **Vorbereitung**

Lesen Sie zur Vorbereitung die beiliegenden PDF-Dateien zur Bedienung des FTIR-Spektrometers und der Software. Als Anleitung zur theoretischen Vorbereitung und als Hilfestellung für die Auswertung ist die Datei Theorie.pdf beigelegt. Weiter hilfreiche Daten enthält außerdem das Dokument GuideIFS.pdf.

### **Aufgaben**

1. Messen Sie die Rotations-Schwingungsspektren von HCl und CO im infraroten Spektralbereich mit einem FT-IR-Spektrometer (Bruker IFS???).
2. Ordnen Sie die Banden des gemessenen Hintergrundspektrums den entsprechenden Substanzen näherungsweise zu. Beschreiben und erklären Sie die Auffälligkeiten des CO<sub>2</sub> Spektrums im Bereich zwischen 600 cm<sup>-1</sup> und 700 cm<sup>-1</sup>.
3. Berechnen Sie aus den Lagen der Rotationslinien zuerst die mittleren Kernabstände  $d_0$  und  $d_1$  (in dem Schwingungsgrundzustand  $v = 0$  und im ersten angeregten Zustand  $v = 1$ ) und daraus die Rotationskonstanten  $B_0$  und  $B_1$  für CO, <sup>1</sup>H<sup>35</sup>Cl und <sup>1</sup>H<sup>37</sup>Cl mittels graphischer Auftragung von  $\alpha$  bzw.  $\beta$  gegen  $J$  (siehe Anlage Theo.pdf). Vergleichen Sie jeweils  $d_0$  mit Literaturwerten. Zeigen Sie sowohl für HCl als auch für CO den Rechenweg zur Bestimmung von  $\alpha$  und  $\beta$  für ein gewähltes  $J$ . Erstellen Sie des Weiteren eine Übersicht in der alle berechneten  $\alpha$ - und  $\beta$ -Werte mit den dazugehörigen Energien des jeweiligen P- und R-Übergangs tabelliert sind.
4. Berechnen Sie die theoretisch erwarteten Oszillatorstärken der Spektrallinien für <sup>1</sup>H<sup>35</sup>Cl, <sup>1</sup>H<sup>37</sup>Cl und CO (einmal jeweils den Rechenweg vorführen). Vergleichen Sie diese mit den experimentell ermittelten Intensitäten.
5. Beschreiben Sie das Verhalten der Abstände der Spektrallinien bei steigender Rotationsquantenzahl im R- bzw. P-Zweig. Wie kann dieses Verhalten begründet werden ?
6. Überprüfen Sie die Annahme, dass sich bei Zimmertemperatur praktisch alle HCl bzw. CO Moleküle im untersten Schwingungszustand befinden.