

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 CO₂ Spektrums im Bereich zwischen 600 cm⁻¹ und 700 cm⁻¹.
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, ¹H³⁵Cl und ¹H³⁷Cl mittels graphischer Auftragung von α bzw. β 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 α und β für ein gewähltes J . Erstellen Sie des Weiteren eine Übersicht in der alle berechneten α - und β -Werte mit den dazugehörigen Energien des jeweiligen P- und R-Übergangs tabelliert sind.
4. Berechnen Sie die theoretisch erwarteten Oszillatorstärken der Spektrallinien für ¹H³⁵Cl, ¹H³⁷Cl 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.