

Übung 8

1 – Rotationsspektroskopie - 3D starrer Rotator

Für Rotationsübergänge gilt die Auswahlregel $\Delta J = \pm 1$.

- Zeigen Sie, dass der energetische Abstand zwischen den Spektrallinien im Rotationsspektrum eines starren Rotators konstant ist.
- Das Rotationsspektrum von H^{35}Cl zeigt den Rotationsübergang $\Delta J 7 \leftarrow 6$ bei einer Wellenzahl von 145 cm^{-1} . Bei welcher Wellenzahl würde der entsprechende Übergang bei dem Isotopolog D^{35}Cl erscheinen?
- Nehmen Sie an der in Aufgabe b) betrachtete Übergang sei der Intensivste. Bestimmen Sie die ungefähre Proben temperatur von HCl .

2 – Rotationsniveaus

Bekanntlich wird in einer Haushaltsmikrowelle das in Lebensmitteln enthaltene Wasser mittels elektromagnetischer Strahlung (2.56 GHz) erwärmt.

Die Symmetrieachse des Wassermoleküls ist die Hauptträgheitsachse mit dem mittleren Trägheitsmoment I_b . Nehmen Sie an, Wasser sei ein prolater Kreisel. Für dessen Energieniveaus gilt die Formel:

$$E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{I_b} J(J+1) + \left(\frac{1}{I_a} - \frac{1}{I_b} \right) K^2 \right)$$

Es stellt sich heraus, dass das I_a halb so groß ist, wie I_b .

- Skizzieren Sie die geometrischen Verhältnisse im Wassermolekül und berechnen Sie daraus I_b .
- Berechnen Sie anschließend die Energien des Übergangs $J = 1 \leftarrow J = 0$ für ein H_2O Molekül, wobei die Rotationsachse in einem Fall senkrecht zur Symmetrieachse und im anderen parallel dazu gerichtet ist.
- In welchem Bereich des elektromagnetischen Spektrums liegen diese Übergänge?

Was bedeuten Ihre Berechnungen für den Anregungsmechanismus der Wassermoleküle in einer Mikrowelle?