

Klausur Modul CHE-BSc-M 11 Physikalische Chemie,  
Spektroskopie

**Achten Sie auf logisch nachvollziehbare Rechenschritte. Geben Sie Resultate physikalischer Größen mit Angabe der Einheiten an. Schreiben Sie BITTE lesbar.**

**Aufgabe 1 (5/5/5/5/5)**

Sie finden zwei MW-Spektren (Blatt1) und ein rotationsaufgelöstes IR-Spektrum (Blatt2) im Anhang dargestellt. Eines der beiden MW-Spektren ist an derselben Probe gemessen, wie das IR-Spektrum. (Angabe:  $h = 6,626 \cdot 10^{-34} [\text{Js}]$ ;  $c = 2,998 \cdot 10^8 [\text{m/s}]$ )

- Bestimmen Sie die Rotationskonstanten für die beiden im Anhang dargestellten Mikrowellenspektren A und B.
- Bestimmen Sie aus dem im Anhang dargestellten Infrarotspektrum die Rotationskonstanten für beide beteiligten Schwingungszustände mit den Schwingungsquantenzahlen  $v = 0$  und  $v = 1$ .
- Entscheiden Sie anhand des Resultats aus b), welches der beiden MW-Spektren an derselben Probe gemessen wurde und welches der folgenden zweiatomigen Moleküle dem IR-Spektrum zugrunde liegt:  $\text{H}_2$ ,  $\text{IH}$ ,  $\text{IF}$ ,  $\text{ICl}$ ,  $\text{IBr}$ ,  $\text{I}_2$ . Begründen Sie Ihre Wahl.
- Berechnen Sie anhand der in b) bestimmten Rotationskonstanten die mittleren Bindungslängen für beide Schwingungszustände des in c) identifizierten Moleküls. Verwenden Sie eine reduzierte Masse von  $\mu = 1,674 \cdot 10^{-27} [\text{kg}]$ .
- Für das andere zweiatomige Molekül werden im rotationslosen IR-Spektrum eine Fundamentale bei  $381,25 [\text{cm}^{-1}]$  und ein erster Oberton bei  $759,57 [\text{cm}^{-1}]$  gemessen. Berechnen Sie  $\bar{v}_0$  und  $x_e$  nach dem Modell des Morse-Potentials. (Sie dürfen/sollten gleich in Einheiten von  $[\text{cm}^{-1}]$  anstatt in  $[\text{J}]$  rechnen.)

**Aufgabe 2 (5/5/5/5)**

Das Wasserstoffmolekül ist inaktiv für MW-Spektroskopie und IR-Spektroskopie. (Angabe:  $h = 6,626 \cdot 10^{-34} [\text{Js}]$ ;  $c = 2,998 \cdot 10^8 [\text{m/s}]$ )

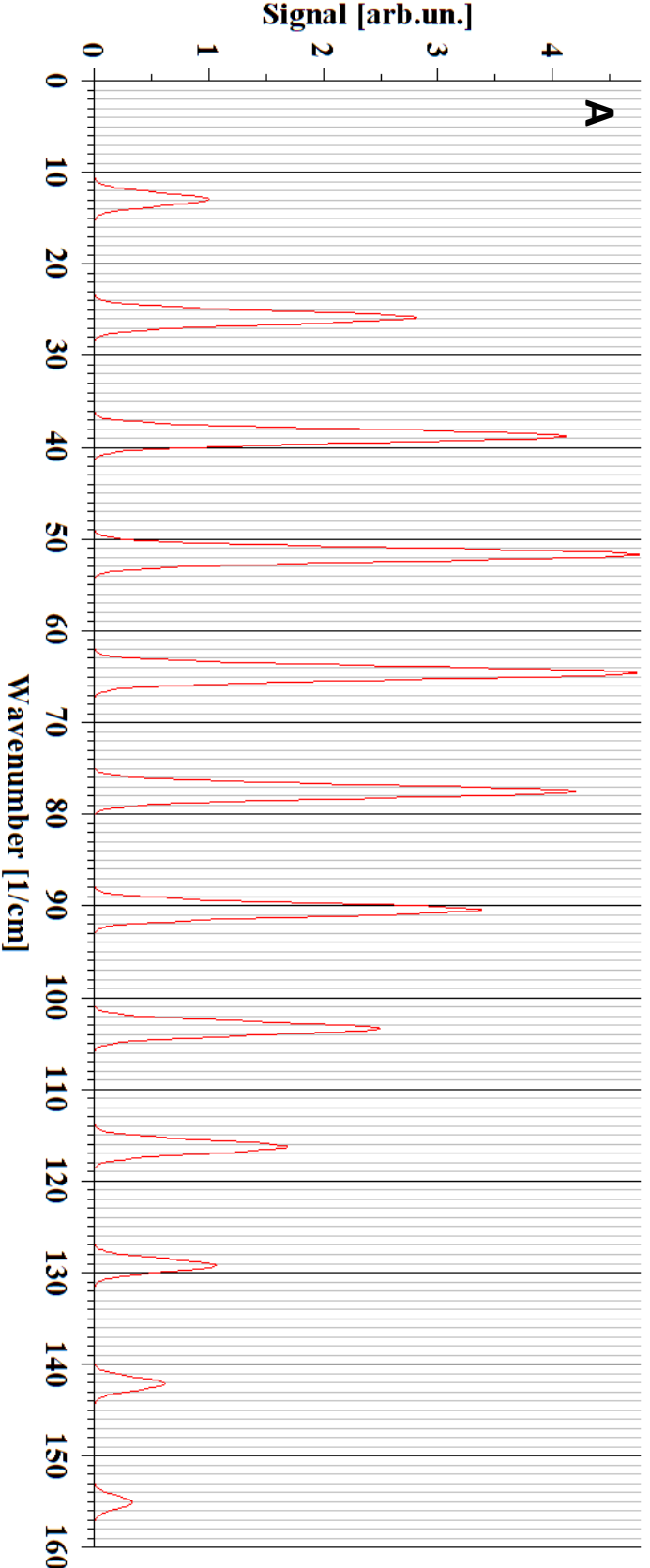
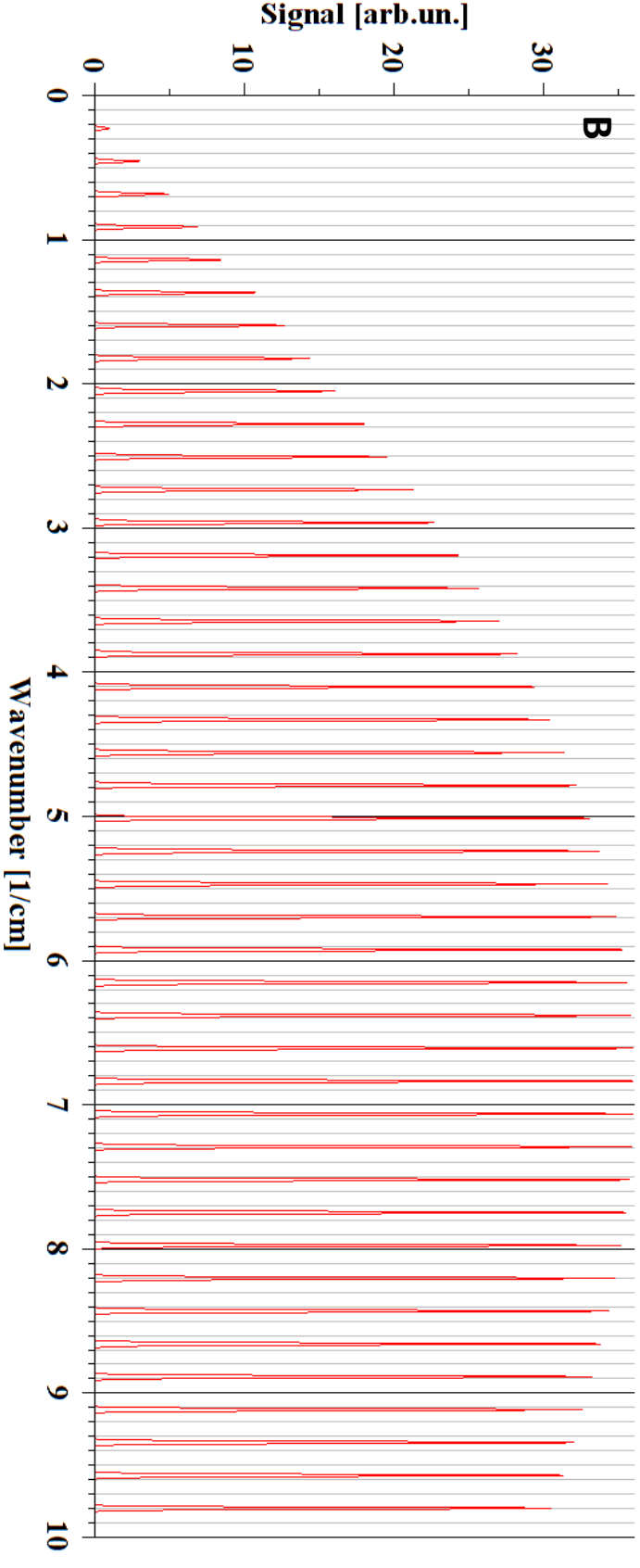
- Nennen Sie die beiden Regeln, welche die genannten Inaktivitäten des  $\text{H}_2$  begründen.
- Nennen Sie die Auswahlregel der Raman-Spektroskopie für Schwingung und Rotation.
- Bestimmen Sie aus dem im Anhang dargestellten Raman-Spektrum (Blatt3) des  $\text{H}_2$  Moleküls die Rotationskonstanten beider beteiligter Schwingungszustände und die Wellenzahl des rotationslosen Schwingungsübergangs. Das Raman-Spektrum wurde unter Bestrahlung mit einer Wellenlänge  $\lambda = 488,0 [\text{nm}]$  aufgenommen.
- Berechnen Sie die Bindungslänge des Wasserstoffmoleküls im Grundzustand und unter Annahme des Hookeschen Kraftgesetzes die Kraftkonstante  $k$  der Bindung.

**Aufgabe 3 (5)**

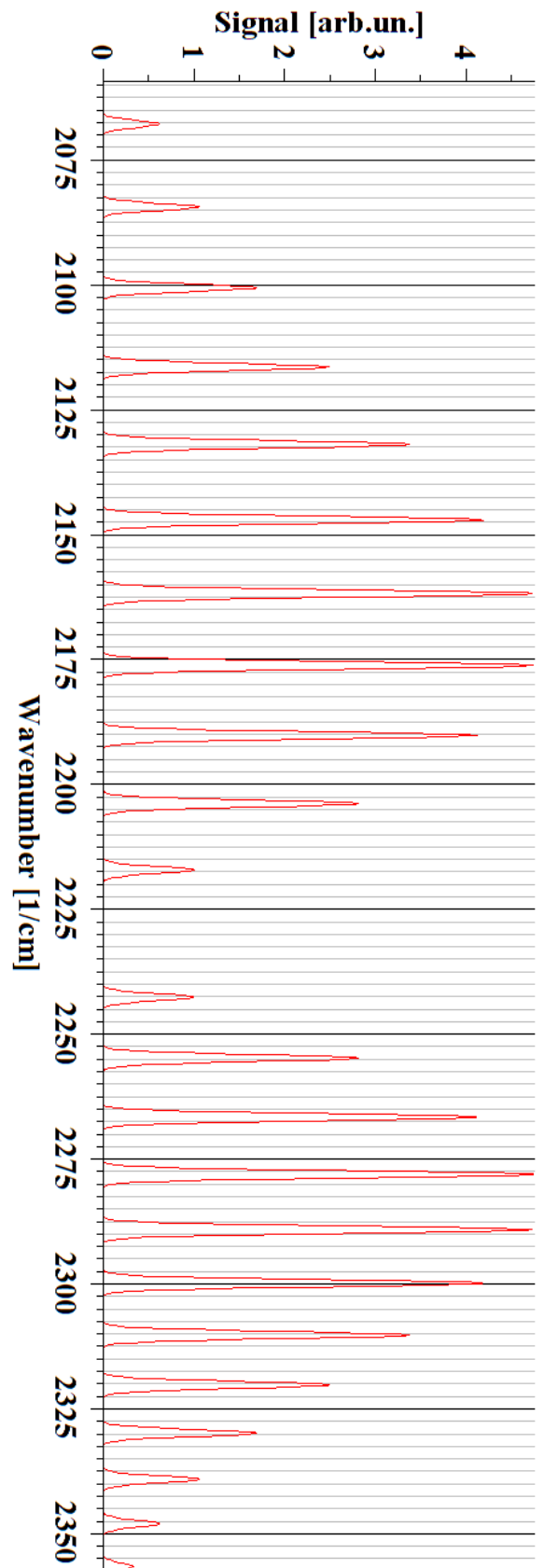
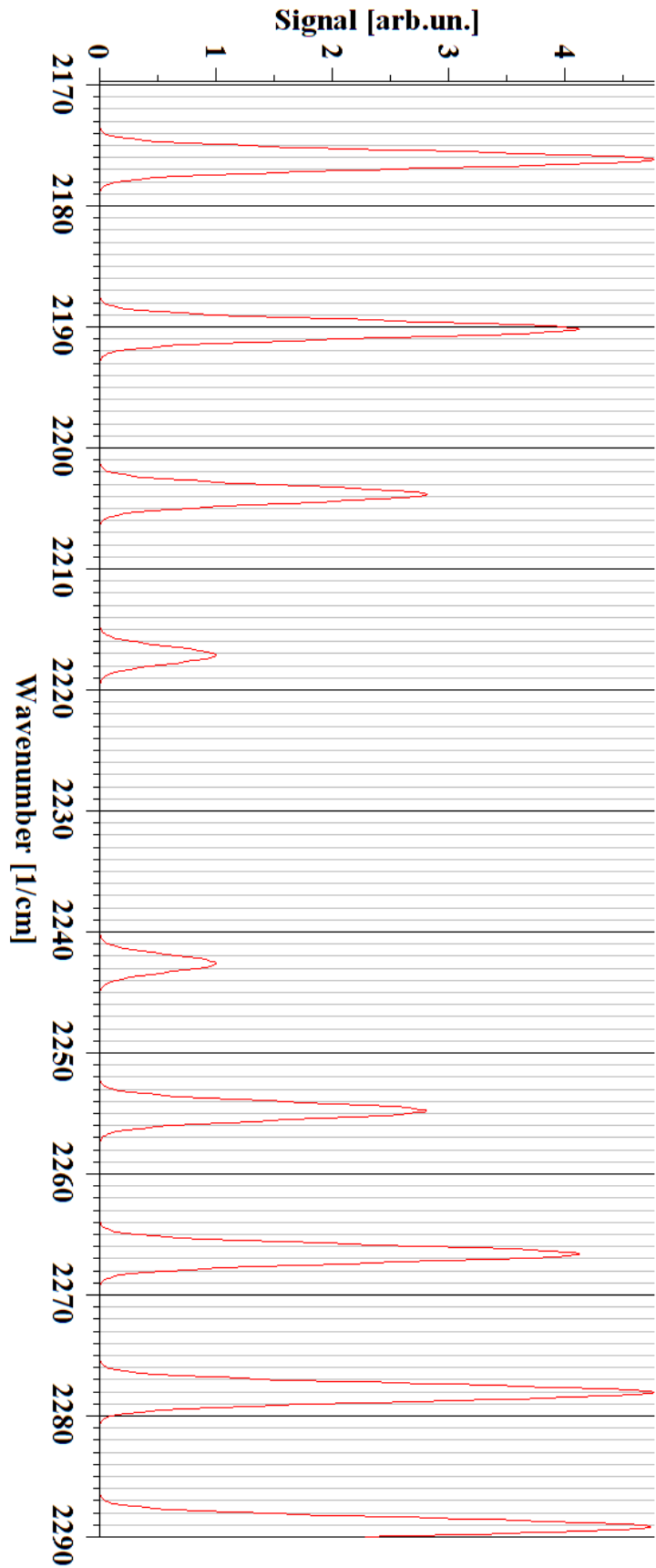
Der Farbstoff Styryl 11 ( $\text{C}_{23}\text{H}_{25}\text{N}_2\text{O}_4^{35}\text{Cl}$ ), von dem  $m = 0,2143 [\text{mg}]$  zur Verfügung stehen, hat bei  $\lambda = 575,0 [\text{nm}]$  einen Extinktionskoeffizienten  $\varepsilon = 4,55 \cdot 10^4 [\text{L mol}^{-1} \text{cm}^{-1}]$ . Sie verfügen über 2 Küvetten mit den Maßen (HxBxT) von  $5 \times 1 \times 1 [\text{cm}^3]$  und  $2 \times 1 \times 0,5 [\text{cm}^3]$ . Das Licht tritt parallel zu T durch die Küvetten, und die Extinktionen der Küvetten und des verwendeten Lösungsmittels sind bei  $\lambda = 575,0 [\text{nm}]$  gleich 0.

- Berechnen Sie die Extinktion bei  $\lambda = 575,0 [\text{nm}]$  unter gleichzeitiger Verwendung beider gefüllter Küvetten mit einer Aufteilung der Farbstoffmasse im Verhältnis 1:1. Achten Sie auf die Einheiten der verschiedenen Größen!

Mikrowellenspektren zweiatomiger Moleküle



# Infrarotspektrum eines zweiatomigen Moleküls in zwei Wellenzahlausschnitten



Raman-Spektrum des  $\text{H}_2$  Moleküls aufgenommen unter  
Bestrahlung mit  $\lambda = 488,00 \text{ nm}$

