

Rotations-Schwingungs-Spektren von Stickstoffmonoxid

Wir betrachten gasförmiges Stickstoffmonoxid (NO) der isotopenreinen Form $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$. Seine Schwingungsfrequenz beträgt $\nu = 5,627 \cdot 10^{13} \text{ Hz}$ und der Gleichgewichtsabstand der beiden Atome $d = 1,1508 \text{ \AA}$.

- a) Skizzieren Sie in harmonischer Näherung die Form des Schwingungspotentials, und zeichnen Sie die Lage der untersten 4 Schwingungsniveaus ein. Berechnen Sie außerdem deren Energien in eV . (3 Punkte)
- b) Berechnen Sie die für die Schwingung wirksame Federkonstante sowie das bei Rotation um den Schwerpunkt wirksame Trägheitsmoment von NO. (2 Punkte)
- c) Berechnen Sie die Energiewerte der untersten 4 Rotationsniveaus in eV , und skizzieren Sie ihre Lage auf der Energieachse in der Näherung des starren Rotators. Falls Sie Frage b) nicht beantwortet haben, verwenden Sie für das Trägheitsmoment $\Theta = 1,5 \cdot 10^{-46} \text{ kgm}^2$. (3 Punkte)
- d) Geben Sie an, welche Übergänge bei Absorption elektromagnetischer Strahlung geeigneter Wellenlänge zwischen den Rotations- und Schwingungsniveaus und ihren Kombination erlaubt sind (elektrische Dipolübergänge). In welchen Spektralbereichen liegen die entsprechenden Strahlungen? (3 Punkte)
- e) Skizzieren Sie das resultierende Absorptionsspektrum in den jeweiligen Spektralbereichen für Temperaturen $T > 0$ und erläutern Sie qualitativ die Abstände der Linien und die relativen Linienintensitäten. (4 Punkte)
- f) Geben Sie eine Formel für die Schwingungsenergie eines Mols NO in Abhängigkeit der Temperatur an, und berechnen Sie daraus den Schwingungsbeitrag c_{V-vib} zur spezifischen Wärme c_V bei konstantem Volumen. Skizzieren Sie den Temperaturverlauf der gesamten molaren spezifischen Wärme c_V und zeichnen Sie schematisch die Lage der Zimmertemperatur (300 K) ein. (5 Punkte)