

**Übungsblatt 2****Aufgabe 5: Schwingungsspektroskopie**

Das Schwingungsspektrum von HCl zeigt drei Banden bei  $2885.9\text{ cm}^{-1}$  (Grundschiwingung),  $5668.0\text{ cm}^{-1}$  (1. Oberton) und  $8346.9\text{ cm}^{-1}$  (2. Oberton).

- Berechnen Sie  $\omega$  und  $\omega x_e$ .
- Berechnen unter der Annahme, dass die Potentialkurve von HCl durch ein MORSE-Potentials beschrieben werden kann, die Tiefe  $D_e$  der Potentialmulde. Wie viele Schwingungszustände erwarten Sie im Rahmen dieser Näherung? Verwenden Sie dabei die Birge-Sponer-Extrapolation.
- Experimentell wird eine Dissoziationsenergie von  $D_0 = 4.43\text{ eV}$  gemessen. Berechnen Sie die Nullpunktsenergie als Differenz von  $D_e$  und  $D_0$ . Vergleichen Sie mit dem theoretischen Wert und beurteilen Sie, wie gut die Näherung mit der Realität übereinstimmt.

**Aufgabe 6: Schwingungsspektroskopie an Oberflächen**

- Geben Sie drei Verfahren für die Schwingungsspektroskopie an Festkörperoberflächen an.
- Welche Verfahren sind geeignet, Schwingungsspektren an Oberflächen in Gegenwart einer Gas- oder Flüssigphase zu messen?
- Erklären Sie das Prinzip der ATR-Spektroskopie. Für welche Art von Systemen eignet sich diese Spektroskopie am besten?
- Warum sind bei RAIRS nur Schwingungsmoden senkrecht zur Oberfläche aktiv? Mit welcher Methode lassen sich Schwingungsmoden parallel zur Oberfläche anregen?
- Im RAIR-Spektrum von Benzol auf Ag(111) fehlt das Signal für die C-H Streckschiwingung. Was schlussfolgern Sie daraus für die Orientierung der Molekülebene relativ zur Oberfläche?

**Aufgabe 7: Treibhauseffekt**

- Warum wird  $\text{CO}_2$  als Treibhausgas angesehen,  $\text{N}_2$  dagegen nicht?
- Die Fundamentalschwingungen von  $\text{CO}_2$  und Wasser sind in der Tabelle angegeben. Erklären Sie unter der Annahme, dass die Erdoberfläche ein schwarzer Strahler mit einer Temperatur von  $300\text{ K}$  ist, warum  $\text{CO}_2$  eine große Bedeutung bei der Erderwärmung beigemessen wird.

	$\nu_1$	$\nu_2$	$\nu_3$
$\text{CO}_2$	$1337\text{ cm}^{-1}$	$667\text{ cm}^{-1}$	$2349\text{ cm}^{-1}$
$\text{H}_2\text{O}$	$3657\text{ cm}^{-1}$	$1595\text{ cm}^{-1}$	$3756\text{ cm}^{-1}$