

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

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

- Berechnen Sie ω und $\omega \times_e$ (in Wellenzahlen).
- 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 CO_2 als Treibhausgas angesehen, N_2 dagegen nicht?
- Die Fundamentalschwingungen von 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 K ist, warum CO_2 eine große Bedeutung bei der Erderwärmung beigemessen wird.

	ν_1	ν_2	ν_3
CO_2	1337 cm^{-1}	667 cm^{-1}	2349 cm^{-1}
H_2O	3657 cm^{-1}	1595 cm^{-1}	3756 cm^{-1}