

Räkneövning 6 i atomers och molekylers struktur

(7.4.2000)

1. a) Avståndet mellan de lägsta rotationsnivåerna för $^{35}\text{Cl}^{19}\text{F}$ är $1,033\text{ cm}^{-1}$. Beräkna molekylens tröghetsmoment och dess bindningsavstånd. Atomernas massor är $34,9688\text{ u}$ och $18,9984\text{ u}$ för ^{35}Cl respektive ^{19}F . b) I en Raman spektrometer är vågtalet för den ingående strålningen 20623 cm^{-1} . Vilket vågtal har den strålning som når detektorn när man detekterar övergången $J=4 \leftarrow 2$ för O_2 .
2. Vilka av följande molekyler uppvisar absorption i mikrovågsområdet p.g.a molekylens rotationsrörelser: a) H_2O b) H_2O_2 c) NH_3 , d) N_2O . Vilka av följande molekyler uppvisar absorption i det infraröda området? e) CH_3CH_3 f) CH_4 g) CH_3Cl h) N_2 ? Vilka av följande molekyler är Raman aktiva: i) CH_2Cl_2 j) CH_3CH_3 k) SF_6 l) N_2O ?
3. Vätehaliderna har följande vågtal för fundamental vibrationen: $4141,3\text{ cm}^{-1}$ (H^{19}F), $2988,9\text{ cm}^{-1}$ (H^{35}Cl), $2649,7\text{ cm}^{-1}$ (H^{81}Br) och $2309,5\text{ cm}^{-1}$ (H^{127}I). Beräkna kraftkonstanterna för väte-halogen bindningarna.
4. De fem lägsta vibrationsenerginivåerna för H^{127}I ligger vid $1144,83\text{ cm}^{-1}$, $3374,90\text{ cm}^{-1}$, $5525,51\text{ cm}^{-1}$, $7596,66\text{ cm}^{-1}$ och $9588,35\text{ cm}^{-1}$. Beräkna molekylens dissociationsenergi. Ange den både i elektronvolt och reciproka centimeter.
5. Absorptionsbandet för en förening upplöst i benzen uppvisar en Gaussisk linjeform. Bandets bredd vid halva höjden är 4233 cm^{-1} och dess maximum är $15400\text{ L mol}^{-1}\text{ cm}^{-1}$. Beräkna den integrerade absorptionskoefficienten.
6. Följande data erhöles vid mätning av absorptionen för ett färgämne som funktion av dess koncentration. Färgämnet var upplöst i metylbenzen.

Koncentration (i mol L^{-1})	0.0010	0.0050	0.0100	0.0500
Transmittans (i %)	73	21	4.2	1.33×10^{-5}

Beräkna färgämnets absorptionskoefficient vid denna våglängd.