

Tenta 20/10 2009: korrektioner (i fetstil) till uppgift 1a och dess svar

1. (10p).

a) Beräkna bindningslängd och fjäderkonstant för HCl och HI utifrån tabellens data på vågtalet för den mikrovågs-övergång som svarar mot  $J = 0 \rightarrow J = 1$  och våglängden för absorptions-maximat i IR-området. (4p)

	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	$\tilde{\nu}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
HI	4.33	<b>13.0</b>
HCl	3.34	<b>21.3</b>

1a) IR är vibration, mikrovågor rotation. I båda fallen behövs  $m_{\text{eff}} = m_X \cdot m_H / (m_X + m_H) / N_A$ .  
 För HCl är  $m_{\text{eff}} = 35.45 \cdot 1.008 / (35.45 + 1.008) \cdot 10^{-3} \text{kg/mol} / 6.02 \cdot 10^{23} = 1.628 \cdot 10^{-27} \text{kg}$ .  
 För HI är  $m_{\text{eff}} = 126.90 \cdot 1.008 / (126.90 + 1.008) \cdot 10^{-3} \text{kg/mol} / 6.02 \cdot 10^{23} = 1.661 \cdot 10^{-27} \text{kg}$ .

IR:  $hc/\lambda = \Delta E_{\text{vib}} = E_1 - E_0 = (h/2\pi)(k/m_{\text{eff}})^{1/2}$ , dvs  $k = (2\pi c/\lambda)^2 \cdot m_{\text{eff}}$   
 För HCl:  $k = (2\pi \cdot 3 \cdot 10^8 / 3.34 \cdot 10^{-6})^2 \cdot 1.628 \cdot 10^{-27} = 518 \text{ N/m}$   
 För HI:  $k = (2\pi \cdot 3 \cdot 10^8 / 4.33 \cdot 10^{-6})^2 \cdot 1.661 \cdot 10^{-27} = 315 \text{ N/m}$

Mikrovågor:  $hc\tilde{\nu} = \Delta E_{\text{rot}} = E_1 - E_0 = 1(1+1)\hbar^2/2I - 0(0+1)\hbar^2/2I = \hbar^2/I$ , dvs  $I = (h/4\pi^2 c \tilde{\nu})$ .  
 Med  $I = m_{\text{eff}} R^2$  fås  
 $R = (h/4\pi^2 c \tilde{\nu} m_{\text{eff}})^{1/2}$

För HCl:  $R = (6.626 \cdot 10^{-34} / 3 \cdot 10^8 / 4\pi^2 / 2130 / 1.628 \cdot 10^{-27})^{1/2} = 1.25 \cdot 10^{-10} \text{m} = 1.25 \text{Å}$ .  
 För HI:  $R = (6.626 \cdot 10^{-34} / 3 \cdot 10^8 / 4\pi^2 / 1300 / 1.661 \cdot 10^{-27})^{1/2} = 1.61 \text{Å}$ .