

Besprechung am 11.06.2020

Übungsblatt 6

1) Die heiße Bande

Das IR-Spektrum von $^1\text{H}-^{127}\text{I}$ zeigt eine Absorption bei $2229,7\text{ cm}^{-1}$ mit einer Schulter bei $2150,4\text{ cm}^{-1}$. Diese hat eine relative Intensität von 10^{-4} und ist dem $\nu = 1 \rightarrow 2$ -Übergang zugeordnet.

Betrachten Sie das Molekül nach dem Modell des Morse-Potentials und berechnen Sie:

- Die Kraftkonstante der H-I-Bindung.
- Die Wellenzahl, bei der der $\nu = 0 \rightarrow 2$ -Übergang angeregt wird.
- Die Temperatur, bei der die Messung durchgeführt wurde (*Hinweis*: Berücksichtigen Sie ausschließlich die Rolle der Besetzung der Zustände).

2) Schwingungsspektroskopie mehratomiger Moleküle

i. Bestimmen Sie die Anzahl der Freiheitsgrade der folgenden Moleküle und geben Sie an, wie viele davon auf Translation, Rotation und Schwingung entfallen.

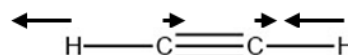
- H
- Br_2
- Acetylen ($\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$)
- Ethanol ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$)

ii. Bestimmen Sie, welche der folgenden Schwingungen von Acetylen IR-Aktiv sind.

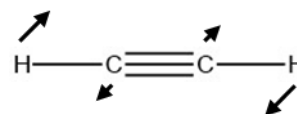
- a. Symmetrische CH-Streckschwingung



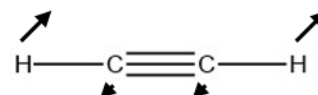
- b. Antisymmetrische CH-Streckschwingung



- c. CCH-Biegeschwingung



- d. HCCH-Kippschwingung



3) Bestimmung der Dissoziationsenergie zweiatomiger Moleküle aus spektroskopischen Messungen

Das IR-Spektrum von $^1\text{H}-^{19}\text{F}$ zeigt ein starkes Signal bei $3958,6\text{ cm}^{-1}$ ($\nu = 0 \rightarrow 1$) und ein schwaches Signal bei $7737,4\text{ cm}^{-1}$ ($\nu = 0 \rightarrow 2$).

Berechnen Sie die Dissoziationsenergie E_{Diss} des Moleküls anhand des Modells des anharmonischen Oszillators; Geben Sie das Ergebnis in cm^{-1} an.