

Abgabe am 08.12.2017 in der jeweiligen Übungsgruppe

Besprechung am 15.12.2017, 11-12/12-13 h

## Übungsblatt 7

### Aufgabe 1: Schwingungs-Raman-Spektroskopie

- Welche Bedingungen müssen erfüllt sein, damit von einem Molekül ein IR-Absorptionsspektrum bzw. ein Raman-Schwingungsspektrum aufgezeichnet werden kann?
- Welches Symmetriemerkmal müssen Moleküle aufweisen, damit IR- und Raman-aktive Schwingungen komplementär auftreten?
- Wie viele Normalmoden besitzt  $\text{CO}_2$  und welcher Art sind sie? Welche von diesen sind Raman- und welche sind IR-aktive Schwingungen?
- Wie viele Absorptionsbanden erwarten Sie im IR-Spektrum?
- Skizzieren Sie das Raman-Schwingungsspektrum von  $\text{CO}_2$ .

### Aufgabe 2: Isotopeneffekt

In Aufgabe 3 von Übungsblatt 6 haben Sie die Frequenzen der Normalmoden von  $\text{H}_2\text{O}$  berechnet. Verwenden Sie nun das selbe Potential ( $V$ ) und berechnen Sie die drei Schwingungsfrequenzen von  $\text{D}_2\text{O}$  (in Wellenzahlen  $\text{cm}^{-1}$ ). Wie äußert sich der Austausch der Isotopen ( $\text{H} \rightarrow \text{D}$ ) und warum ist der Isotopenaustausch so wichtig für die Schwingungsspektroskopie?

$$V = \frac{k_r}{2}(\delta r_1^2 + \delta r_2^2) + \frac{k_\alpha}{2}(r_e \delta \alpha)^2 + k_{rr} \delta r_1 \delta r_2 + k_{r\alpha} r_e \delta \alpha (\delta r_1 + \delta r_2)$$

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} k_r & k_{rr} & k_{r\alpha} \\ k_{rr} & k_r & k_{r\alpha} \\ k_{r\alpha} & k_{r\alpha} & k_\alpha \end{bmatrix} \quad \mathbf{G} = - \begin{bmatrix} \mu_D + \mu_O & \mu_O \cos \alpha_e & -\mu_O \sin \alpha_e \\ \mu_O \cos \alpha_e & \mu_D + \mu_O & -\mu_O \sin \alpha_e \\ -\mu_O \sin \alpha_e & -\mu_O \sin \alpha_e & 2\mu_H + 2\mu_O(1 - \cos \alpha_e) \end{bmatrix}$$

$$k_r = 84.5 \text{ nN}\text{\AA}^{-1}; k_{rr} = -0.9 \text{ nN}\text{\AA}^{-1}; k_{r\alpha} = 2.6 \text{ nN}\text{\AA}^{-1}; k_\alpha = 7.6 \text{ nN}\text{\AA}^{-1}$$

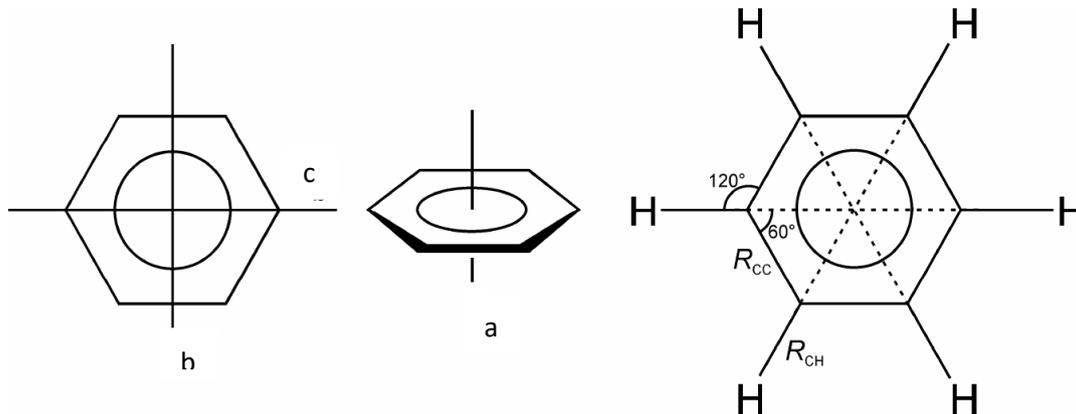
$$\alpha_e = 104.5^\circ; \mu_D = 0.4965 \text{ u}^{-1}; \mu_O = 0.0625 \text{ u}^{-1}; u = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg};$$

Abgabe am 08.12.2017 in der jeweiligen Übungsgruppe

Besprechung am 15.12.2017, 11-12/12-13 h

### Aufgabe 3: Symmetrischer Kreisel

Benzol ist ein oblater Kreisel, d.h. für das Trägheitsmoment gilt  $I_b = I_c < I_a$ , wobei  $c$  und  $b$  die Drehachsen in der Ebene des Benzolrings bezeichnen und  $a$  die Drehachse senkrecht zur Ebene ist (siehe Skizze).



- a) Zeigen Sie, dass für Benzol  $I_b = I_c$  und  $I_a = 2I_c$  gilt. Verwenden Sie dafür die Angaben in der Skizze. Das Trägheitsmoment  $I_b$  für die Rotation um die Achse  $b$  ist definiert als

$$I_b = \sum_i m_i r_{bi}^2 ,$$

wobei  $m_i$  die Masse des Atoms und  $r_{bi}$  der orthogonale Abstand zwischen Atom  $i$  und der Achse  $b$  ist. Analoge Beziehungen gelten für  $I_c$  und  $I_a$ . Die Bindungsabstände für ein Benzolmolekül betragen  $r_{CC} = 139,7$  pm und  $r_{CH} = 108,6$  pm.

*Hinweis:* Vergessen Sie die H-Atome bei der Berechnung nicht!

- b) Berechnen Sie die Rotationskonstanten  $A$  und  $B$ . Nehmen Sie an, dass es sich bei Benzol um einen starren Rotator handelt.
- c) Wie groß ist der Linienabstand  $\Delta\tilde{\nu}$  zweier Spektrallinien im Rotationsspektrum des Benzols? Leiten Sie zunächst einen allgemeinen Ausdruck für  $\Delta\tilde{\nu}$  her und berechnen Sie  $\Delta\tilde{\nu}$  in  $\text{cm}^{-1}$  mit den Ergebnissen aus Aufgabenteil b.