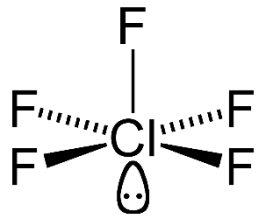
Besprechung am 21.01.2022

Übungsblatt 9

1) Symmetrieanalyse der Schwingungsmoden mehratomiger Moleküle

Führen Sie die Symmetrieanalyse der Schwingungsmoden von ClF_5 durch. Bestimmen Sie, welche Schwingungen IR- bzw. Raman-aktiv sind.



C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
A_1	1	1	1	1	1	z	x^2+y^2, z^2
A_2	1	1	1	−1	−1	R_z	
B_1	1	−1	1	1	−1		x^2-y^2
B_2	1	−1	1	−1	1		xy
E	2	0	−2	0	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	(xz, yz)

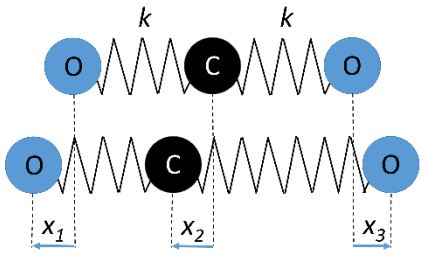
2) Normalschwingung

Die Streckschwingungen von CO_2 können durch die drei Normalmoden Q_1, Q_2 und Q_3 dargestellt werden. Die Variablen Q_1, Q_2 und Q_3 sind mit den Verschiebungen der Atomen aus der Gleichgewichtspositionen x_1, x_2 und x_3 (siehe Abbildung) durch die Gleichungen

$$Q_1 = \sqrt{\frac{m_O}{2}}(x_1 - x_3)$$

$$Q_2 = \sqrt{\frac{m_O m_C}{2M}}(x_1 - 2x_2 + x_3)$$

$$Q_3 = \frac{1}{\sqrt{M}}(m_O x_1 + m_C x_2 + m_O x_3)$$

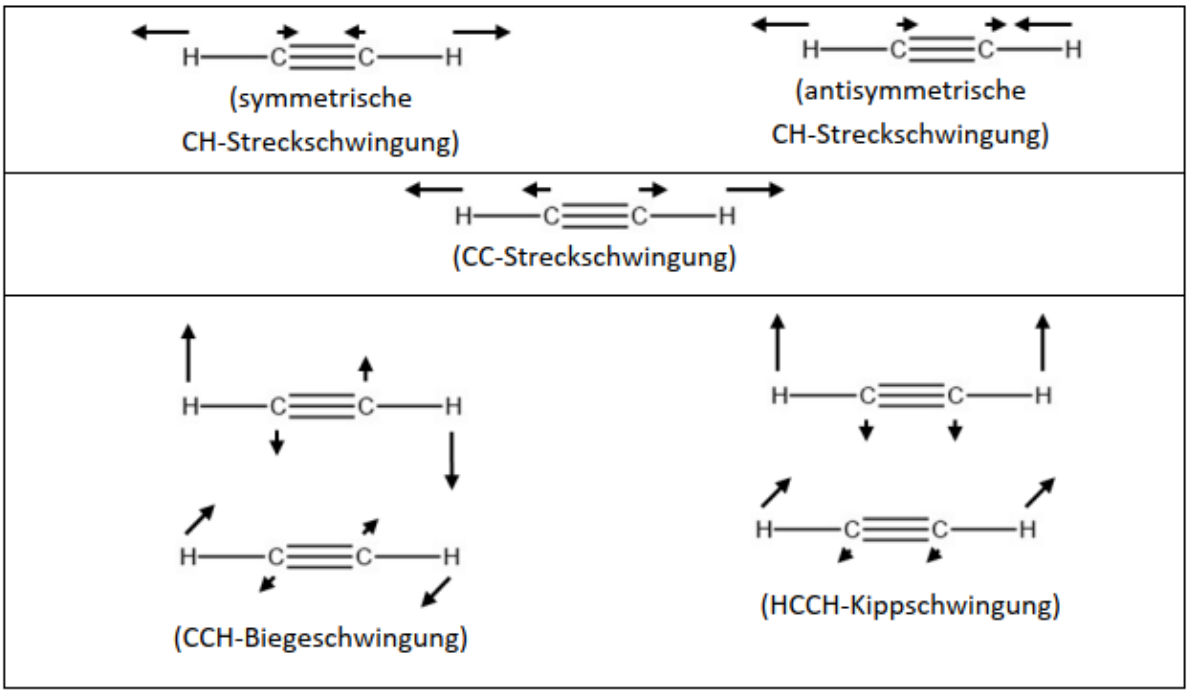


verknüpft. Nehmen Sie an, dass bei der Anregung der ersten Normalmode mit der Frequenz $\tilde{\nu}_1 = 1330\ cm^{-1}$ die Variable Q_1 durch den Ausdruck

$$Q_1 = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi c \tilde{\nu}_1}} cos(2\pi c \tilde{\nu}_1 t)$$

gegeben wird. Dabei sind die zwei anderen Variablen Q_2 und Q_3 gleich Null. Bestimmen Sie für die Schwingungsmode Q_1 die Zeitabhängigkeit der Verschiebungen der Atome aus der Gleichgewichtspositionen x_1, x_2 und x_3. Zeichnen Sie die kinetische Energie jedes Atoms innerhalb einer Schwingungsperiode auf.

Besprechung am 21.01.2022

3) Normalschwingungen von Acetylen

Welche der folgenden Normalschwingungen von Acetylen sind Infrarot-aktiv und welche sind Raman-aktiv?