

Besprechung am 16.12.2021

## Übungsblatt 8

### 1) Übergangsdipolmoment

Die Grundschiwingung des  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ -Moleküls findet bei einer Wellenzahl von  $2142\text{ cm}^{-1}$  statt.

Betrachten Sie das Molekül als einen harmonischen Oszillator und berechnen Sie die Größe des Übergangsdipolmoments für den oben genannten Übergang. (Hinweis:  $\left(\frac{\partial\mu}{\partial x}\right)_0 = 3.825\text{ D/\AA}$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

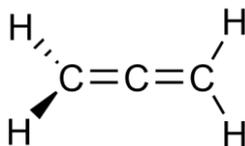
### 2) Der anharmonische Oszillator

Für Iodwasserstoff ( $^1\text{H}-^{127}\text{I}$ ) misst man eine Grundschiwingungsfrequenz von  $2230\text{ cm}^{-1}$  und eine Dissoziationsenergie von  $32478\text{ cm}^{-1}$ .

- Berechnen Sie die Nullpunktenergie des Moleküls und die Kraftkonstante der H-I-Bindung.
- Welches Intensitätsverhältnis der „heißen Bande“ ( $\nu = 1 \rightarrow 2$ ) zur Grundschiwingungsbande ( $\nu = 0 \rightarrow 1$ ) erwartet man bei einer Temperatur von  $287.8\text{ K}$  ( $k_{\text{B}}T/hc \approx 200\text{ cm}^{-1}$ )?
- Bei welcher Wellenzahl wird der erste Oberton ( $\nu = 0 \rightarrow 2$ ) angeregt?

### 3) Symmetrieanalyse der Schwingungsmoden mehratomiger Moleküle

Führen Sie die Symmetrieanalyse der Schwingungsmoden von Propadien (Allen) durch. Bestimmen Sie, welche Schwingungen IR- bzw. Raman-aktiv sind.



$D_{2d}$	$E$	$2S_4$	$C_2$	$2C_2'$	$2\sigma_d$		
$A_1$	1	1	1	1	1	$R_z$	$x^2 + y^2, z^2$
$A_2$	1	1	1	-1	-1		
$B_1$	1	-1	1	1	-1	$z$	$x^2 - y^2$
$B_2$	1	-1	1	-1	1		
$E$	2	0	-2	0	0	$(x, y);$ $(R_x, R_y)$	$xy$ $(xz, yz)$