

Besprechung am 13.01.2022

Übungsblatt 8

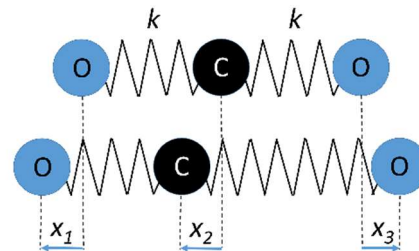
1) Normalschwingung

Die Streckschwingungen von CO₂ können durch die drei Normalmoden Q₁, Q₂ und Q₃ dargestellt werden. Die Variablen Q₁, Q₂ und Q₃ sind mit den Verschiebungen der Atome aus der Gleichgewichtslage x₁, x₂ und x₃ (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 $\tilde{\nu}_1 = 1330 \text{ cm}^{-1}$ die Variable Q₁ 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 Q₂ und Q₃ gleich Null. Bestimmen Sie für die Schwingungsmoden Q₁ die Zeitabhängigkeit der Verschiebungen der Atome aus der Gleichgewichtslage x₁, x₂ und x₃. Zeichnen Sie die kinetische Energie jedes Atoms innerhalb einer Schwingungsperiode auf.

2) Schwingungsspektroskopie

Führen Sie die Symmetrieanalyse der Schwingungsmoden von ClF₅ 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)