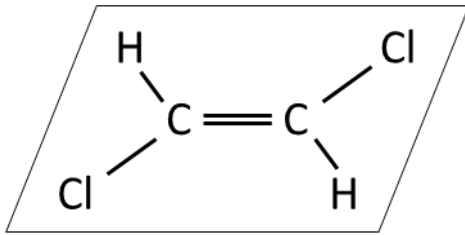


Besprechung am 15.12.2022

Übungsblatt 8

1) Molekülorbitale aus linearer Kombination von Atomorbitalen

- a) Wählen Sie als Basis die $2p_z$ -Orbitale der Kohlenstoffatome von (trans)-1,2-Dichlorethen, wobei z parallel zu $C_2(z)$ ist. Konstruieren Sie die symmetrieadaptierten Orbitale.

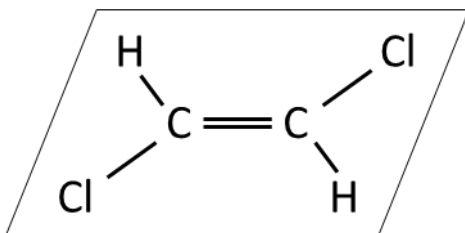


C_{2h}	E	$C_2(z)$	i	σ_h
A_g	1	1	1	1
B_g	1	-1	1	-1
A_u	1	1	-1	-1
B_u	1	-1	-1	1

- b) Beim (trans)-1,2-Dichlorethen-Molekül entspricht die Symmetrie des LUMO der Darstellung B_g und die des HOMO A_u . Wie muss die elektromagnetische Welle polarisiert sein, um Übergänge induzieren zu können?

2) Symmetrieanalyse der Schwingungsmoden mehratomiger Moleküle

Führen Sie die Symmetrieanalyse der Schwingungsmoden von (E)-1,2-Dichlorethen durch und bestimmen Sie, welche Schwingungen IR-aktiv bzw. Raman-aktiv sind.

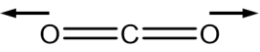
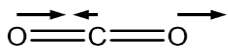
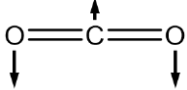
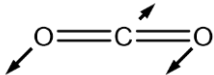


C_{2h}	E	$C_2(z)$	i	σ_h		
A_g	1	1	1	1	R_z	x^2, y^2, z^2, xy
B_g	1	-1	1	-1	R_x, R_y	xz, yz
A_u	1	1	-1	-1	z	
B_u	1	-1	-1	1	x, y	

Besprechung am 15.12.2022

3) Raman Spektroskopie

Die Schwingungsmoden des CO₂-Moleküls sind in der folgenden Abbildung dargestellt:

	Symmetrische Streckschwingung	$\tilde{\nu}_s = 1338 \text{ cm}^{-1}$
	Antisymmetrische Streckschwingung	$\tilde{\nu}_{as} = 2349 \text{ cm}^{-1}$
	Biegeschwingung	$\tilde{\nu}_\delta = 667 \text{ cm}^{-1}$
		

Das Molekül wird mit einem grünen Laser ($\lambda = 532 \text{ nm}$) bestrahlt.

Berechnen Sie die Wellenlänge der drei Komponenten des gestreuten Lichts (Stokes, Anti-Stokes, Rayleigh) und das Verhältnis zwischen den Intensitäten der Stokes- und Anti-Stokes-Linien bei einer Temperatur von 298 K ($k_B T/hc \approx 200 \text{ cm}^{-1}$).