

Besprechung am 02.12.2016

Übungsblatt 6

Aufgabe 1 – Birge-Sponer-Extrapolation

Die ersten fünf Schwingungsniveaus von ${}^1\text{H}^{127}\text{I}$ liegen bei $1144,83\text{ cm}^{-1}$, $3374,90\text{ cm}^{-1}$, $5525,51\text{ cm}^{-1}$, $7596,66\text{ cm}^{-1}$ und $9588,35\text{ cm}^{-1}$. Betrachten Sie das System als anharmonischen Oszillator, dem ein Morse-Potential zu Grunde liegt.

$$\varepsilon_v = \frac{E_v}{hc} = \left(v + \frac{1}{2}\right) \tilde{\nu}_e - \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 \tilde{\nu}_e x_e$$

- Zeigen Sie anhand einer Skizze, warum es sinnvoll ist bei der Birge-Sponer-Extrapolation $\Delta\varepsilon$ gegen $\left(v + \frac{1}{2}\right)$ aufzutragen und formen Sie den Ausdruck für die Energiedifferenz entsprechend nach $\Delta\varepsilon\left(v + \frac{1}{2}\right)$ um.
- Skizzieren Sie die Birge-Sponer-Extrapolation für ${}^1\text{H}^{127}\text{I}$ und berechnen Sie die Dissoziationsenergie D_0 .

Aufgabe 2 – Symmetrieoperationen und Punktgruppen

- Bestimmen Sie die Punktgruppen folgender Moleküle: H_2O , NH_3 , Z- und E-1,2-Dichlorethen, H_2O_2 , Allen, Ethan (gestaffelt und ekliptisch), THF.
- Ammoniak besitzt drei σ_v Spiegelebenen. Spiegeln Sie das Molekül an zwei unterschiedlichen σ_v -Ebenen in verschiedener Reihenfolge. Sind die erhaltenen Moleküle danach identisch oder ununterscheidbar?

Besprechung am 02.12.2016

Aufgabe 3 - Symmetrieanalyse der Schwingungen von NH₃

- a) In Aufgabe 2a) haben Sie die Punktgruppe von Ammoniak bestimmt. Suchen Sie die entsprechende Charaktertafel der irreduziblen Darstellung aus der Literatur heraus. Wenden Sie die relevanten Symmetrieeoperationen auf NH₃ an und stellen Sie eine reduzible Darstellung auf. (Hilfe: 1. Welche Atome behalten bei den jeweiligen Symmetrieeoperationen ihre Positionen bei? 2. Der Charakter einer C₃-Achse ist 0 (siehe Vorlesung).)
- b) Stellen Sie eine Gleichung auf, die die reduzible Darstellung als Summe der irreduziblen Darstellung formuliert.
- c) Leiten Sie daraus einen Ausdruck der Schwingungsmoden in irreduzibler Darstellung her.
- d) Bestimmen Sie Gesamtzahl und Entartungsgrade der NH₃ Grundschiebungen.