

Besprechung am 16.12.2016

Übungsblatt 8

Aufgabe 1 – Kombinationsschwingung von BF_3

Das Molekül BF_3 besitzt die Punktgruppe D_{3h} . Es liegen sechs Schwingungsmoden mit folgender Symmetrie vor, wobei die E' -Schwingungsmode zweifach entartet ist:

$$\Gamma_{\text{vib}} = A_1' + A_2'' + 2E'$$

Welche dieser Schwingungen ist IR-aktiv? Bestimmen Sie die Symmetrie der Kombinationsschwingung die aus zwei Normalmoden mit der Symmetrie A_2'' und E' besteht. Bilden Sie hierfür das direkte Produkt der zwei irreduziblen Darstellungen und vergleichen Sie das Ergebnis mit der Charaktertafel. Ist diese Kombinationsschwingung IR-aktiv? Wenn ja, mit welcher Polarisationsrichtung des eingestrahlten Lichts wechselwirkt diese Kombinationsschwingung?

Aufgabe 2 – Einfaches Rotationsschwingungsspektrum von HCl

Die Fundamentalschwingung sowie die Rotationskonstante von HCl betragen $\tilde{\nu} = 2885,9 \text{ cm}^{-1}$ und $B = 10,6 \text{ cm}^{-1}$.

- Berechnen Sie unter Vernachlässigung von Anharmonizitäten und der Verletzung des Born-Oppenheimer-Prinzips die Wellenzahlen für die ersten drei Linien der P- und R-Zweige im Rotationsschwingungsspektrum von HCl.
- Wie ändert sich das Spektrum wenn eine Zentrifugaldehnung von $D = 5,32 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ berücksichtigt wird? Berechnen Sie die ersten drei Linien des P- und R-Zweiges.

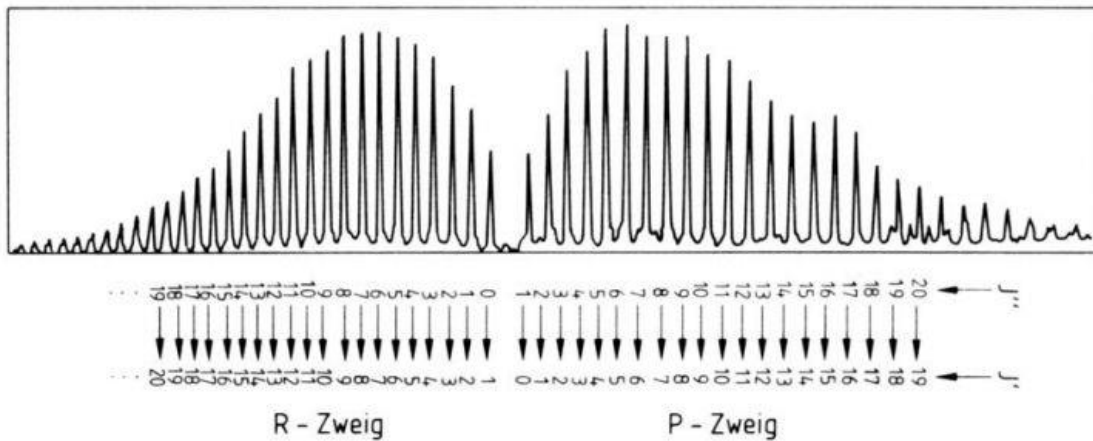
Aufgabe 3 – Gekoppeltes Rotationsschwingungsspektrum von CO

Die folgende Abbildung zeigt das Rotationsschwingungsspektrum von gasförmigem CO. Die Tabelle zeigt die zugehörigen Wellenzahlen für den P- und R-Zweig für die jeweiligen Ausgangsniveaus ($\nu = 0, J$). Der Ausdruck für erlaubte Übergänge in einem gekoppelten Rotationsschwingungsspektrum für $\nu = 0 \rightarrow \nu = 1$ lautet:

$$\Delta\varepsilon = \tilde{\nu}_e(1 - 2x_e) + B_1 J'(J' + 1) - B_0 J''(J'' + 1).$$

- Bestimmen Sie aus geeigneten Auftragungen mit den angegebenen Werten die Rotationskonstanten des jeweiligen Schwingungsniveaus B_0 ($\nu = 0$) und B_1 ($\nu = 1$) und daraus B_e sowie die Anharmonizitätskonstante α .
- Ermitteln Sie daraus die resultierenden Bindungsabstände r_0 , r_1 und r_e . Warum sind die Abstände unterschiedlich groß?

Besprechung am 16.12.2016



J	P-Zweig	R-Zweig	J	P-Zweig	R-Zweig
0		2147,4	8	2111,8	2176,5
1	2139,7	2151,1	9	2107,7	2180
2	2135,8	2154,9	10	2103,6	2183,3
3	2131,9	2158,8	11	2099,3	2186,8
4	2128	2162,2	12	2095,2	2190,1
5	2124,1	2165,9	13	2090,8	2193,3
6	2120	2169,4	14	2086,5	2196,7
7	2115,9	2173	15	2082,1	

Hinweis: Ersetzen Sie in oben gegebener Gleichung J' durch einen Ausdruck der nur J'' enthält. Suchen sie dann nach einem Ausdruck $\Delta\varepsilon_R - \Delta\varepsilon_P$ bei dem sich entweder B_0 oder B_1 verkürzt.