

Besprechung am 13.01.2017

Übungsblatt 9

Aufgabe 1 – Kernstatistik

Betrachten Sie die Moleküle F_2 , N_2 und O_2 , die folgende Eigenschaften aufweisen:

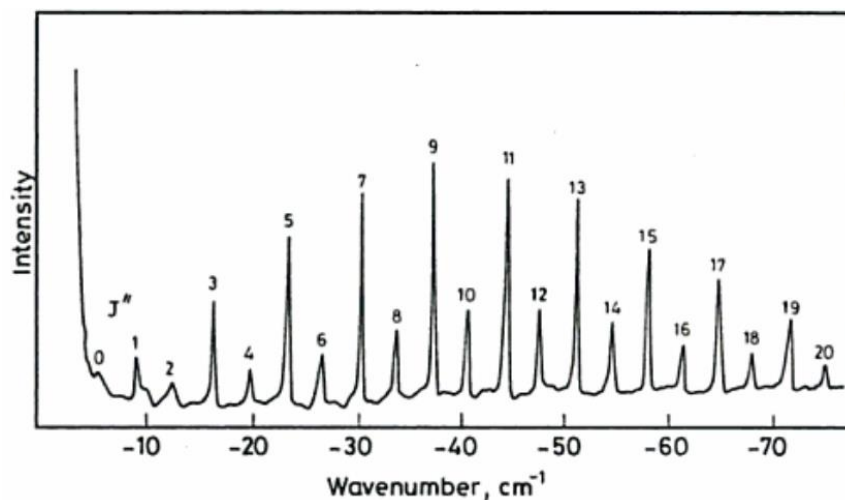
elektronischer Grundzustand	Kernspin
F_2 : $1\Sigma_g^+$	F: $I = 1/2$
N_2 : $1\Sigma_g^+$	N: $I = 1$
O_2 : $3\Sigma_g^-$	O: $I = 0$

Die möglichen Gesamtkernspins I_{ges} eines zweiatomigen homonuklearen Moleküls mit Kernspin I der einzelnen Atome ergeben sich durch Vektoraddition zu

$$I_{ges} = 2I, 2I - 1, \dots, 0$$

mit Entartung $g_{I_{ges}} = 2I_{ges} + 1$.

- Bestimmen Sie die möglichen Gesamtkernspin-Zustände von F_2 , N_2 und O_2 und ihre jeweilige Entartung.
- Geben Sie die Rotationsniveaus J an, die die Moleküle eines jeweiligen Gesamtkernspin-Zustands besetzen dürfen. Die Moleküle befinden sich jeweils im Schwingungsgrundzustand ($v = 0$).
Hinweis: Die Kernspinzustände mit $I_{ges} = 2I, 2I - 2, \dots$ sind symmetrisch gegen Kernaustausch, die anderen antisymmetrisch.
- Die Abbildung zeigt ein reines Raman-Rotationsspektrum (nur Stokes-Zweig). Von welchem der drei Moleküle stammt es? Begründen Sie.



Besprechung am 13.01.2017

Aufgabe 2 – Raman- vs. Absorptionsspektroskopie bei Schwingungen

- a) Welche Bedingungen müssen erfüllt sein, damit von einem Molekül ein IR-Absorptionsspektrum bzw. ein Raman-Schwingungsspektrum aufgezeichnet werden kann.
- b) Welches Symmetriemerkmal müssen Moleküle aufweisen, damit IR- und Raman-aktive Schwingungen komplementär auftreten? Lässt sich dies gruppentheoretisch begründen?
- c) Wie viele Schwingungsfreiheitsgrade besitzen N_2 , C_2H_2 , CH_3OH , HD , CCl_4 , CS_2 , SO_2 , NH_3 , $BeCl_2$ (monomer in der Gasphase), Aceton? Welche der Moleküle zeigen IR-aktive und welche Raman-aktive Schwingungsmoden? Bei welchen Molekülen sind IR- und Raman-Schwingungen komplementär?
- d) Skizzieren Sie das Raman-Schwingungsspektrum von CO_2 .

Aufgabe 3 – Raman- vs. Absorptionsspektroskopie bei der Rotation

- a) Welche Bedingungen müssen erfüllt sein, damit von einem Molekül ein Mikrowellen-Absorptionsspektrum bzw. ein reines Raman-Rotationsspektrum aufgezeichnet werden kann. Welche Auswahlregeln gelten bei der Mikrowellen-Absorptionsspektroskopie und bei der reinen Raman-Rotationsspektroskopie?
- b) Mit welcher spektroskopischen Methode würde man das reine Rotationsspektrum von H_2 beobachten? Begründen Sie.
- c) Berechnen Sie die Rotationskonstante B und den Linienabstand im reinen Rotationsspektrum von H_2 , dessen Bindungslänge 74,14 pm beträgt.