

Besprechung am 12.01.2024

## Übungsblatt 9

### 1) Raman Spektroskopie

- Welche Bedingungen müssen erfüllt sein, damit von einem Molekül ein IR-Absorptionsspektrum bzw. ein Raman-Schwingungsspektrum aufgezeichnet werden kann?
- Welches Symmetriemerkmal müssen Moleküle aufweisen, damit IR- und Raman-aktive Schwingungen komplementär auftreten?
- Wie viele Normalmoden besitzt  $\text{BeCl}_2$  und welcher Art sind sie? Welche von diesen sind Raman- und welche sind IR-aktive?
- Wie viel Absorptionsbanden erwarten Sie im IR- bzw. im Raman-Spektrum?
- Skizzieren Sie das IR- und Raman-Schwingungsspektrum von  $\text{BeCl}_2$ .

### 2) Dipolmoment von $\text{NH}_3 - \text{CO}_2$ Komplexen

D.D. Nelson *et al.* (Science 238, 1670 (1987)) untersuchten mehrere schwach gebundene Gasphasenkomplexe von Ammoniak auf der Suche nach Beispielen, in denen die H-Atome in  $\text{NH}_3$  Wasserstoffbrückenbindungen bilden, fanden aber keine. Sie fanden zum Beispiel heraus, dass bei dem Komplex aus  $\text{NH}_3$  und  $\text{CO}_2$  das Kohlenstoffatom dem Stickstoff am nächsten liegt (299 pm entfernt): Das  $\text{CO}_2$ -Molekül steht im rechten Winkel zur C-N-"Bindung", und die H-Atome des  $\text{NH}_3$  zeigen vom  $\text{CO}_2$  weg. Die Größe des permanenten Dipolmoments dieses Komplexes wird mit 1,77 D angegeben. Wenn die N- und C-Atome die Zentren der negativen bzw. positiven Ladungsverteilung sind, wie groß ist dann die Größe dieser Teilladungen (als Vielfache von  $e$ )?

### 3) Induziertes Dipolmoment

Die Größe des elektrischen Feldes in einem Abstand  $r$  von einer Punktladung  $Q$  ist gleich  $Q/4\pi\epsilon_0 r^2$ . Wie nahe muss sich ein Proton einem Wassermolekül (mit einem Polarisierbarkeitsvolumen von  $1,48 \times 10^{-30} \text{ m}^3$ ) nähern, damit das von ihm induzierte Dipolmoment die gleiche Größe hat wie das permanente Dipolmoment des Moleküls (1,85 D)?

*Besprechung am 12.01.2024*

#### **4) Polarisierbarkeit und Oszillatorstärke**

Die Oszillatorstärke eines Übergangs bei etwa 160 nm in Ethen beträgt etwa 0,3. Schätzen Sie das mittlere Polarisierbarkeitsvolumen des Moleküls. (Der experimentelle Wert ist  $4,22 \cdot 10^{-30} \text{ m}^3$ .)