

7. Übungsblatt zur Vorlesung SMKS-1 (WS 25/26)

Meisner/Seidel/Kühnemuth

Abgabe bis Sonntag 7.12.2025, 24:00 Uhr

Besprechung: Dienstag, 9.12.2025

Wiederholungsfragen:

7.1) Wie unterscheidet sich der physikalische Mechanismus der Schwingungsanregung mittels IR- und Raman-Spektroskopie?

7.2) Welche Vorteile hat die Ramanspektroskopie gegenüber der IR-Spektroskopie?

7.3) Welche wichtigen Eigenschaften haben die Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators?

7.4) Nennen Sie die Unterschiede zwischen einem anharmonischen und einem harmonischen Oszillator.

Aufgabe 27: Rotationsspektroskopie des Ammoniaks

Um welchen Typ Kreisel handelt es sich beim Ammoniakmolekül? Im Mikrowellenspektrum von NH_3 beobachtet man Übergänge bei 19,95, 39,91 und 59,86 cm^{-1} . Für ND_3 liegen die Übergänge bei 10,32, 20,63 und 30,95 cm^{-1} . Berechnen Sie daraus die Trägheitsmomente I senkrecht zur Figurenachse. Diese Trägheitsmomente errechnen sich aus dem Pyramidalwinkel θ und dem Abstand R (N zu H/D) gemäß ($m_{\text{N,H,D}}$ sind die Massen von Stickstoff, Proton und Deuteron):

$$I = m_{\text{H,D}} R^2 (1 - \cos \theta) + m_r R^2 (1 + 2 \cos \theta) \quad \text{mit} \quad m_r = \frac{m_{\text{N}} m_{\text{H,D}}}{m_{\text{N}} + 3 m_{\text{H,D}}}$$

Nehmen Sie an, das NH_3 und ND_3 die gleiche Geometrie haben. Berechnen Sie die Bindungslänge R und den Winkel θ .

Aufgabe 28: Rotationsschwingungsspektroskopie von CO

Bei geringer Auflösung findet man die stärkste Absorptionsbande im IR-Spektrum von gasförmigem $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ bei 2150 cm^{-1} . Bei genauerer Betrachtung und höherer Auflösung zeigt sich, dass die Bande aus zwei eng benachbarten Gruppen von Peaks besteht, die rechts und links des Zentrums bei 2143,26 cm^{-1} liegen. Der Abstand der beiden Peaks direkt links und rechts des Zentrums beträgt 7,655 cm^{-1} . Berechnen Sie in der Näherung des harmonischen Oszillators und des starren Rotators

- die Schwingungswellenzahl des CO-Moleküls,
- seine molekulare Nullpunktsschwingungsenergie,
- die Kraftkonstante der CO-Bindung,
- die Rotationskonstante B und
- die CO-Bindungslänge.

Aufgabe 29: Bindungsstärken

Betrachten Sie bei Ihrer Argumentation nur die angegebenen Atome (Molekülausschnitte).

a) Die C-C-Einfachbindung hat eine charakteristische Schwingungsenergie von 1000 cm^{-1} , die C-C-Doppelbindung von 1640 cm^{-1} und die Dreifachbindung von 2200 cm^{-1} . Berechnen Sie die Kraftkonstanten für die jeweiligen Bindungstypen.

b) Folgende Energien für folgende Streckschwingungen sind bekannt: C-H: 3050 cm^{-1} , O-H: 3650 cm^{-1} , N-H: 3400 cm^{-1} . Setzen Sie die Kraftkonstanten in eine Reihenfolge!

Aufgabe 30: Bindungslängen I

Aus den reinen Raman-Rotationsspektren von gasförmigem C_6H_6 und C_6D_6 bestimmt man die folgenden Rotationskonstanten: $B(\text{C}_6\text{H}_6) = 0,18960 \text{ cm}^{-1}$ und $B(\text{C}_6\text{D}_6) = 0,15681 \text{ cm}^{-1}$. Berechnen Sie über die mithilfe der dazugehörigen Trägheitsmomente die CC-, CH- und CD-Abstände d (Bindungslängen). Nehmen Sie in erster Näherung dazu an, dass $d(\text{CH}) = d(\text{CD})$ und dass $d(\text{CC})$ in beiden Molekülen gleich groß ist.

Lösungshinweise: (1) Berechnen Sie wie in der Vorlesung die Trägheitsmomente bezüglich der C_2 -Achsen über die Abstände r der Atome zur Drehachse. (2) Nutzen Sie die Näherung der Isotopenunabhängigkeit der Kernabstände, mit der 4 Unbekannte (r) zu 2 Unbekannten reduziert werden, so dass die zwei angegebenen Messwerte ausreichen. (3) Nutzen Sie die bekannte Struktur von Benzol, um aus den Abständen r zur Drehachse die gefragten Bindungslängen d zu bestimmen.

Aufgabe 31: Bindungslängen II

Die Wellenzahlen der $J = 1 \leftarrow 0$ Rotationsübergänge sind $20,8784 \text{ cm}^{-1}$ für $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ und $10,7840 \text{ cm}^{-1}$ für $^2\text{H}^{35}\text{Cl}$. Die genauen Atommassen sind $1,007825 \text{ amu}$ für ^1H , $2,0140$ für ^2H und $34,96885 \text{ amu}$ für ^{35}Cl . Zeigen Sie durch Rechnung ob die Bindungslängen d in HCl und DCl gleich groß sind.