

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 Figurennachse. Diese Trägheitsmomente errechnen sich aus dem Pyramidalwinkel θ und dem Abstand R (N zu H/D) gemäß ($m_{N,H,D}$ sind die Massen von Stickstoff, Proton und Deuteron):

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

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

- a) die Schwingungswellenzahl des CO-Moleküls,
- b) seine molekulare Nullpunktsschwingungsenergie,
- c) die Kraftkonstante der CO-Bindung,
- d) die Rotationskonstante B und
- e) 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 Stretschwingungen 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: $B(C_6H_6) = 0,18960 \text{ cm}^{-1}$ und $B(C_6D_6) = 0,15681 \text{ cm}^{-1}$. Berechnen Sie über die mithilfe der dazugehörigen Trägheitsmomente die CC-, CH- und CD-Abstände d (Bindungslängen). Nehmen Sie in erster Näherung dazu an, dass $d(CH) = d(CD)$ und dass $d(CC)$ 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 $^1H^{35}Cl$ und $10,7840 \text{ cm}^{-1}$ für $^2H^{35}Cl$. Die genauen Atommassen sind 1,007825 amu für 1H , 2,0140 für 2H und 34,96885 amu für ^{35}Cl . Zeigen Sie durch Rechnung ob die Bindungslängen d in HCl und DCl gleich groß sind.