

Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II

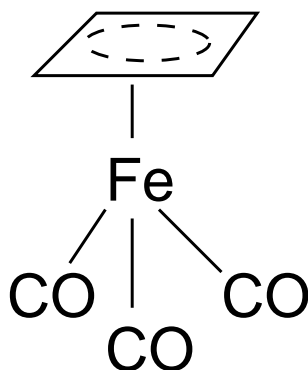
Übungsleiter: Tanja Asthalter · Zimmer 9-356 · Tel. 4464 · e-mail t.asthalter@ipc.uni-stuttgart.de

Übungsblatt 24

28. 1. 2003

Aufgabe 24.1

- a) Stellen Sie die Hückelmatrix für Cyclobutadien auf und bestimmen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren. Skizzieren Sie schematisch die MOs.
- b) In der Verbindung



kommt die Bindung des Cyclobutadien-Liganden an das Metall durch den Überlapp der π -Orbitale von Cyclobutadien mit den d-Orbitalen des Eisens zustande. Skizzieren Sie schematisch die vier möglichen bindenden MOs dieses Teilsystems und geben Sie den Bindungstyp (σ , π oder δ) an.

Aufgabe 24.2

Durch die Wechselwirkung der Elektronenhülle eines Moleküls mit einfallendem Licht (=elektromagnetischer Strahlung) wird ein Dipolmoment $\vec{\mu}_{\text{ind}} = \alpha \vec{E}$ induziert. Wenn das induzierte Dipolmoment zeitabhängig ist, wird dadurch gestreutes Licht emittiert.

Der Schwingungs-Ramaneffekt beruht (in der klassischen Deutung) darauf, daß sich die Polarisierbarkeit des Moleküls mit dem Kernabstand ändert:

$$\alpha R = \alpha_0 + (R - R_0) \frac{d\alpha}{dR}.$$

- a) Der Kernabstand wird durch die Schwingung verändert: $R = R_0 + a \cos(2\pi\nu_{\text{vib}}t)$, und die einfallende Strahlung erzeugt das elektrische Feld $E(t) = E_0 \cos(2\pi\nu_{\text{ein}}t)$. Berechnen Sie damit das induzierte Dipolmoment und die Frequenz der Raman-Streustrahlung.
Hinweis: $\cos(\alpha) \cdot \cos(\beta) = 1/2 \cos(\alpha + \beta) + 1/2 \cos(\alpha - \beta)$
- b) Skizzieren Sie das Ramanspektrum eines zweiatomigen Moleküls (Rotations- und Schwingungsübergänge).

Aufgabe 24.3

Geben Sie in einer Tabelle für die folgenden Moleküle an

- ob sie lineare, symmetrische oder sphärische Kreisel sind
- ob sie Rotations-, Schwingungs-, Rotations-Raman- bzw. Schwingungs-Raman-Spektren aufweisen

Moleküle: H_2 , HCl , CH_3Cl , H_2O , NH_3 , CO_2 , SF_6 , HCN , OCS

Die Übungen sind im PDF-Format erhältlich unter <http://www.ipc.uni-stuttgart.de/~tanja/pcuebungen.html>.