



Übungsblatt 4

Aufgabe 9: Ramanspektroskopie und Bindungslängen

Aus den reinen Raman-Rotationsspektren von gasförmigem C_6H_6 und C_6D_6 (Benzol) bestimmt man die folgenden Rotationskonstanten: $B(C_6H_6) = 0.18960 \text{ cm}^{-1}$ und $B(C_6D_6) = 0.15681 \text{ cm}^{-1}$. Aus diesen Werten kann man die Trägheitsmomente I der beiden Moleküle bezüglich der zur C_6 -Drehachse senkrechten Achsen berechnen. Man erhält $I(C_6H_6) = 1.4759 \cdot 10^{-45} \text{ kg} \cdot \text{m}^2$ und $I(C_6D_6) = 1.7845 \cdot 10^{-45} \text{ kg} \cdot \text{m}^2$. Berechnen Sie die C-C, C-H und C-D-Abstände.

Aufgabe 10: Symmetrie

- (a) Erklären Sie den Unterschied zwischen Symmetrieelement und Symmetrieeoperation.
- (b) Was sind eigentliche und uneigentliche Symmetrieeoperationen? Nennen Sie jeweils ein Beispiel.
- (c) Bestimmen Sie sämtliche Symmetrieelemente folgender Moleküle: H_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , C_6H_6 (Benzol), Cyclohexan (Sessel), SF_6 , C_{60} (Fulleren). Geben Sie dabei auch an, wie häufig ein bestimmtes Symmetrieelement vorkommt. Welche Symmetrieelemente sind nicht mit dem Auftreten eines Dipolmoments vereinbar?