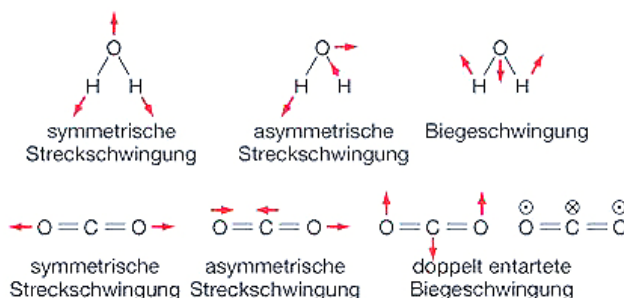


**Übungsblatt 13** (zu bearbeiten bis 01.02.2012)**Aufgabe 1: Raman-Spektroskopie**

Das Rotationsramanspektrum von  $I_2$  besteht aus äquidistanten Linien im Abstand von  $0.1496 \text{ cm}^{-1}$ . Berechnen Sie unter Vernachlässigung aller Korrekturterme den kovalenten Atomradius von Iod! Lässt sich dieser Wert auch durch reine Rotationsspektroskopie (Mikrowellenspektroskopie) bestimmen?

**Aufgabe 2: Normalschwingungen**

Die Abbildung zeigt schematisch die Bewegung der Atome in den Normalschwingungsmoden von  $H_2O$  und  $CO_2$ . Entscheiden Sie, welche der Moden ein nicht verschwindendes dynamisches Dipolmoment besitzen und damit im Infrarotbereich aktiv sind! (Die Bewegungen der Atome in den beiden zweifach entarteten Biegeschwingungen von  $CO_2$  sind identisch, nur die Bewegungsrichtung ist um  $90^\circ$  um die Molekülachse gedreht.)

**Aufgabe 3: Photoelektronenspektroskopie**

Das He-I Photoelektronenspektrum (Photonenenergie  $h\nu = 21.22 \text{ eV}$ ) von Sauerstoff zeigt mehrere Banden mit Schwingungsprogressionen (siehe Abbildung).

(a) Ordnen Sie den beiden Banden mit den niedrigsten Ionisierungsenergien die entsprechenden Valenzorbitale zu und schätzen Sie deren Orbitalenergien ab! Schlussfolgern Sie aus der Ausdehnung der jeweiligen Schwingungsprogression, ob die Orbitale bindend oder antibindend bzw. nichtbindend sind!

(b) Die Progression mit der kleinsten Ionisierungsenergie ( $12 - 13 \text{ eV}$ ) besteht aus Schwingungslinien mit einem Abstand von  $0.23 \text{ eV}$ . In der nächstfolgenden Progression ( $16 - 18 \text{ eV}$ ) beträgt der Linienabstand  $0.11 \text{ eV}$ . Vergleichen Sie mit der Fundamentalschwingung des neutralen  $O_2$  Moleküls, die bei  $1580.4 \text{ cm}^{-1}$  erscheint, und bestimmen Sie den Bindungscharakter der Orbitale, aus denen die Photoelektronen emittiert wurden (bindend, antibindend oder nichtbindend)!

