

Übungsblatt 8: Raman-Spektroskopie

Aufgabe 1: Permanentes und induziertes Dipolmoment

i) Was ist ein Dipolmoment? Geben Sie eine kurze Definition und erklären Sie den Unterschied zwischen einem permanenten Dipolmoment und einem induzierten Dipolmoment.

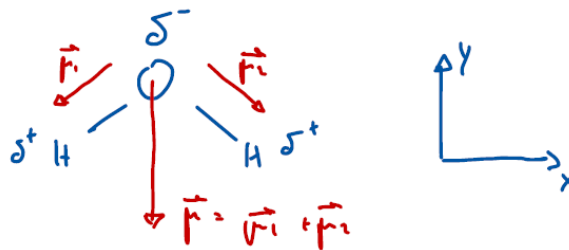
ii) Bei welchen der folgenden Moleküle würden Sie Linien im Rotations-Spektrum erwarten und bei welchen könnten Sie die Rotationsübergänge lediglich im Raman-Spektrum bestimmen? Was muss gelten damit man Rotationen im Rotations-Spektrum bzw. im Raman-Spektrum nachweisen kann.

1 : HI

2 : HCl

3 : O₂

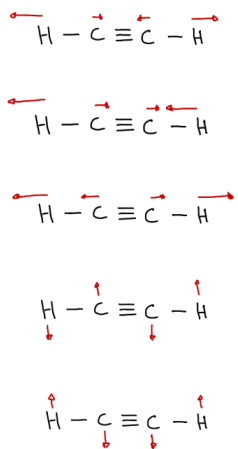
iii) Das permanente Dipolmoment von Wasser beträgt 1.86 Debye. Bestimmen Sie die Partialladungen an jedem Atom des Wassermoleküls. Die O-H-Bindungslänge R und -Winkel θ sollen hier 0.96 Å und 104.5 ° betragen. Schauen Sie sich die Skizze als Hilfe an.



iv) Bestimmen Sie die Größe des induzierten Dipolmoments μ_{ind} von H₂ in Debye, welches durch ein statisches elektrisches Feld der Stärke $E = 2.559 \cdot 10^5 \frac{V}{m}$ induziert wird. Gehen Sie dabei für das Polarisationsvolumen von H₂ von einem Wert von $\alpha' = 0.82 \text{ Å}^3$ aus.

Aufgabe 2: IR- vs Raman-Spektroskopie

i) In folgender Abbildung sind Ihnen die Normalschwingungen des Ethin Moleküls gezeigt. Welche der Schwingungen sind IR- bzw. Raman-aktiv?



ii) Die in der Abbildung gezeigten Schwingungsmoden sind tatsächlich alle Schwingungsmoden des Ethin Moleküls. Sind jedoch welche entartet? Denken Sie darüber nach wie viele Freiheitsgrade der Schwingung das Molekül besitzt.

iii) Beschriften Sie die drei Peaks, die im gegebenen Raman-Spektrum (Abbildung 1) zu sehen sind und ordnen Sie die Peaks den Übergängen 1, 2 und 3 aus dem in Abbildung 2 gezeigten Jablonski-Diagrammen zu.

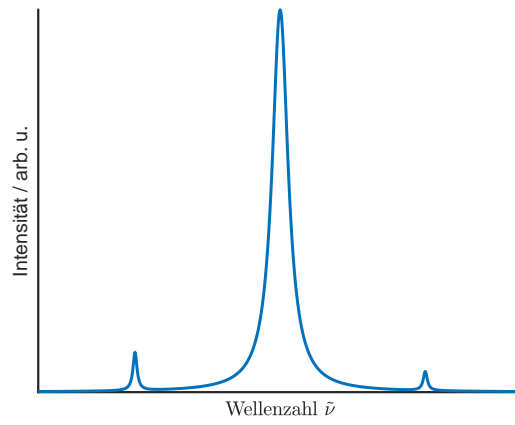


Abbildung 1: Schematisches Raman-Spektrum

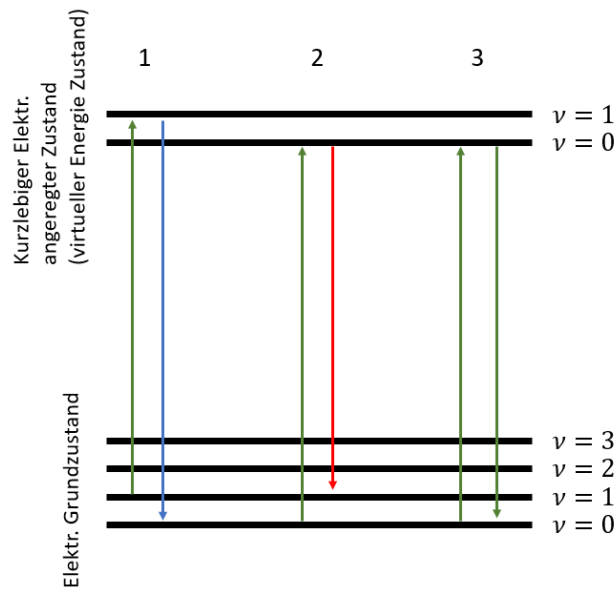


Abbildung 2: Jablonski-Diagramm der möglichen Übergänge in der Raman-Spektroskopie

iv) Erklären Sie warum man bei der Raman-Spektroskopie meist orthogonal zum Einstrahlungslicht misst und dabei einen sehr monochromatischen Laser benutzt.