**Zusatzübungen UV/Vis- und IR-Spektroskopie**

**UV/Vis-Spektroskopie**

Al2O3 mit dotiert mit VIII auf AlIII-Gitterplätzen zeigt im UV/Vis-Spektrum folgende spin-erlaubte, niederenergetische Absorptionsbanden:

 (1) λ1 = 574 nm

 (2) λ 2 = 396 nm

a) Rechnen Sie die angegebenen Wellenlängen in Wellenzahlen (in cm-1) um.

 (1) λ 1: \_\_\_\_\_\_\_\_\_ cm-1

 (2) λ 2: \_\_\_\_\_\_\_\_\_ cm-1

b) Geben Sie die Elektronenkonfiguration für den elektronischen Grundzustand und die der zu λ1 und zu λ2 gehörenden angeregten Zustände.

c) Benennen Sie die gegebenen Ligandenfeld-Banden mit den dazugehörigen Term-Symbolen (Start → Ziel):

 (1) \_\_\_\_\_\_\_\_ → \_\_\_\_\_\_\_\_

 (2) \_\_\_\_\_\_\_\_ → \_\_\_\_\_\_\_\_

d) Berechnen Sie mit Hilfe der angegebenen Ligandenfeld-Banden λ 1 und λ 2 und des Tanabe-Sugano-Diagramms des d2-Ions die Ligandenfeld-Aufspaltung Δ und den Racah-Parameter B. Bitte beachten: der Rechenweg muss nachvollziehbar sein; nur Zahlenwirrwarr gibt keine Punkte!

 B ≈ \_\_\_\_\_\_\_\_ cm-1

 Δ ≈ \_\_\_\_\_\_\_\_ cm-1

e) In welcher Größenordnung liegen die Extinktionskoeffizienten ε der beiden beobachteten Absorptionen?

 ε ≈ \_\_\_\_\_\_\_\_\_ M-1cm-1

Tanabe-Sugano-Diagramm für d2-Konfiguration im oktaedrischen Feld



**IR-Spektroskopie**

* Bestimmen Sie die Punktgruppen folgender Komplexe (Fließschema Lehrbuch):

*cis*-ML2(CO)4: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

*trans*-ML2(CO)4: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

* Bestimmen Sie die Anzahl und Rassen der IR und Raman-aktiven CO-Valenzschwingungen (Charaktertafeln Lehrbuch)

***cis*-ML2(CO)4**

Γred(Valenz) = \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Ausreduzieren:

Γi(Valenz) = \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Anzahl / Rassen der IR-aktiven Schwingungen: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Anzahl / Rassen der Raman-aktiven Schwingungen:\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_





***trans*-ML2(CO)4**

Γred(Valenz) = \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Ausreduzieren:

Γi(Valenz) = \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Anzahl / Rassen der IR-aktiven Schwingungen: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Anzahl / Rassen der Raman-aktiven Schwingungen:\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

**EPR Spektroskopie:**

Skizzieren Sie das Energieniveauschema, bzw. die EPR-Spektren von: **˙**CH, **˙**CH2, **˙**CHCH, **˙**N (14N – ca. 100% Häufigkeit), **˙**NH2

Erlaubte und unerlaubte Übergänge (die Auswahlregel – ΔmS = ±1, ΔmI = 0)

**NMR Spektroskopie:**

1. Die j1-Kopplungskonstante (19F, 31P) in einem PF6¯ Spektrum ist 709 Hz. Warum gibt es zu der gleichen Kopplungskonstante 2 verschiedene ppm Werte in 31P und 19 F gekoppelten NMR-Spektren?
2. Skizzieren Sie die folgende Spektren von Sn(CH3)4:
3. 1H, 13C, 13C{1H}
4. 119Sn, 119Sn{1H}
5. Skizzieren Sie die folgende Spektren von d-Chloroform:

13C, 2H

1. Skizzieren Sie den 1H Spektrum von bis(trimethylsilyl)mercury

**Mössbauerspektroskopie**

1. Erklären Sie die physikalische Bedeutung von

- der Isomerieverschiebung δ

- der elektrischen Quadrupolaufspaltung ΔEQ (elektrische Quadrupolwechselwirkung)

- der magnetischen Hyperfeinaufspaltung ΔEm (magnetische Dipolwechselwirkung)

Welche Information liefern diese Werte?

2. Wie groß ist die natürliche Linienbreite der 151Eu Mössbauerabsorptionslinie in mm/s?

 (Für die 151Eu -Mössbauerlinie Eγ  = 21.6 keV, ist die natürliche Linienbreite

Γ = 5.18·10-8 eV)