

Übungen zur Molekül- und Clusterphysik

SS 2010

4. Übungsblatt

1. Photoelektronenspektroskopie (8 Punkte)

Berechnen Sie mittels GAMESS die elektronische und geometrische Struktur der folgenden Moleküle und ermitteln sie daraus deren Photoelektronenspektren ohne Berücksichtigung der Dipolmatrixelemente (Intensität)

(a) Benzol und Derivate

Berechnen Sie die C_6 Kohlenstoffringmoleküle C_6H_{12} , C_6H_6 , C_6H_5Cl und C_6H_4BrCl . Welche Geometrie haben diese jeweils und vergleichen Sie die besetzten Valenzorbitale und die LUMO Zustände der Moleküle. Wie würden die Valenz-Photoelektronenspektren dieser Moleküle aussehen? Könnten Sie die verschiedenen Isomere von C_6H_4BrCl unterscheiden durch UPS (Ultra-Violet-Photoelectron-Spectroscopy)?

(b) Das ESCA Molekül

Das Molekül $CF_3 - CO - O - CH_2 - CH_3$ wird auch als ESCA (Electron Spectroscopy for Chemical Analysis) Molekül bezeichnet. Geben Sie die Lage der C 1s Photolinien an, wenn Sie mit einer Photonenenergie von 350 eV anregen würden.

(c) Berechnen Sie die Elektronenspektren der Moleküle $CH_3 - CH_2 - OH$ sowie $CH_3 - CH_2 - O - CO - Cl$ und vergleichen Sie mit dem ESCA Molekül. Diskutieren Sie das Ergebnis. Was könnte die Ursache der Verschiebung der C 1s Zustände?

(d) Wie würden die C 1s Photoelektronenspektren der Moleküle aus Teil (1a) aussehen?