



Übungsblatt 6

Aufgabe 15: Molekülschwingungen

(a) Führen Sie eine Rassenanalyse der Normalschwingungen folgender Moleküle durch: NH_3 , C_6H_6 , C_2H_6 (gestaffelt), SO_2 .

(b)* Führen Sie eine Rassenanalyse der Normalschwingungen des Ethens durch. Unterscheiden Sie zwischen ebenen und nicht-ebenen Schwingungen. Führen Sie 12 innere Koordinaten ein (5 Bindungslängenänderungen, 7 Bindungswinkel) und geben Sie an, welche inneren Koordinaten mit den berechneten Schwingungsrassen verknüpft sind.

Aufgabe 16: Molekülschwingungen und Auswahlregeln

(a) Zwei der möglichen Symmetriegruppen eines Moleküls mit der Topologie Y-X-X-Y sind C_{2v} und C_{2h} . Führen Sie für beide Strukturen eine Rassenanalyse der Schwingungen durch. Unterscheiden Sie dabei *in plane* und *out of plane* Schwingungen. Geben Sie die Infrarot- und Ramanaktivität beider Strukturen an.

(b) Bei Ozon findet man mehr als eine IR-aktive Fundamentalschwingung. Begründen Sie mit Hilfe dieser Beobachtung, dass Ozon in der Gleichgewichtslage nicht die Struktur eines gleichseitigen Dreiecks haben kann.

Aufgabe 17: Direktes Produkt von Punktgruppen

Zahlreiche Punktgruppen lassen sich als direktes Produkt zweier Untergruppen schreiben, z.B.

$$D_{3h} = D_3 \times C_s$$

Weisen Sie diese Gleichung nach. Konstruieren Sie dazu die Charaktertafel der Gruppe D_{3h} aus den Charaktertafeln von D_3 und C_s .

Aufgabe 18: Matrixelemente und Auswahlregeln

Welche elektrischen Dipolübergänge sind in einem System der Symmetrie T_d bzw. C_{2v} verboten? Geben Sie dabei an, entlang welcher Molekülachsen oder in welchen Molekülebenen diese Übergänge verboten sind (bzw. erlaubt oder "polarisiert" sind).