



## Übungsblatt 5

### Aufgabe 17: Molekülschwingungen

(a) Führen Sie eine Rassenanalyse der Normalschwingungen folgender Moleküle durch:  $\text{NH}_3$ ,  $\text{C}_6\text{H}_6$ ,  $\text{C}_2\text{H}_6$  (gestaffelt),  $\text{SO}_2$ .

(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 18: 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 19: 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 20: 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).