

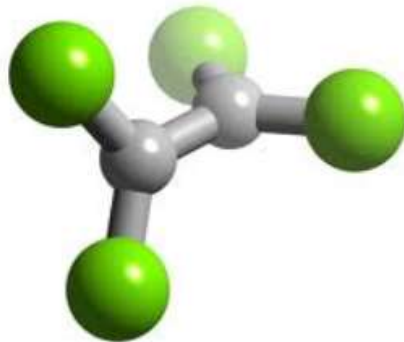
Besprechung am 09.12.2016

Übungsblatt 7

Aufgabe 1 – Symmetrieanalyse von Dibortetrachlorid (B_2Cl_4)

Symmetriebetrachtungen helfen bei der Schwingungsanalyse mehratomiger Moleküle. Damit können z.B. Art und Zahl der Molekülschwingungen bestimmt und deren IR- bzw. Raman-Aktivität ermittelt werden.

- Bestimmen Sie die Punktgruppe von B_2Cl_4 und suchen Sie eine geeignete irreduzible Darstellung aus der Literatur heraus. Bestimmen Sie anschließend den Charakter $\chi(R)$ der reduziblen Darstellung Γ einer jeden Symmetrieoperation R .
- Wie oft sind die irreduziblen Darstellungen (A_1, A_2, \dots) in der reduziblen Darstellung Γ enthalten („ausreduzieren“)? Leiten Sie anschließend einen Ausdruck für die reduzible Darstellung der Translation Γ_{trans} , Rotation Γ_{rot} und Vibration Γ_{vib} her. Bestimmen Sie aus Γ_{vib} die Gesamtzahl sowie Entartungsgrade der Grundschnwingungen.
- Welche dieser Schwingungsmoden sind IR-aktiv und welche sind Raman-aktiv? Begründen Sie.
- Betrachten Sie die B_2 - und E -symmetrischen IR-aktiven Schwingungsmoden von B_2Cl_4 . Welche Polarisierungsrichtung des eingestrahltten Lichts wechselwirkt mit der jeweiligen IR-Schwingung?



Besprechung am 09.12.2016

Aufgabe 2 – Infrarotspektrum von Benzaldehyd

Das Infrarotspektrum von Benzaldehyd weist eine Reihe von charakteristischen Absorptionsbanden auf: Aromatische C-H Deformationsschwingungen erscheinen im Fingerprintbereich ($> 1000 \text{ cm}^{-1}$) während aromatische C-H Valenzschwingungen bei 3000 cm^{-1} eine Absorptionsbande besitzen. Aromatische C-C Valenzschwingungen erscheinen bei 1590 cm^{-1} . Die Carbonylverbindung besitzt eine scharfe Absorptionsbande bei 1700 cm^{-1} . Aldehydische C-H Deformationsschwingung absorbieren bei 1400 cm^{-1} , aldehydische C-H Valenzschwingungen dagegen bei 2800 cm^{-1} .

- Entgegen erster Überlegungen besitzt Benzaldehyd zwei intensive Absorptionsbanden im Bereich der aldehydischen C-H Valenzschwingungen ($\nu' = 2735 \text{ cm}^{-1}$ und $\nu'' = 2815 \text{ cm}^{-1}$). Begründen Sie.
- Berechnen Sie die ungestörten Resonanzfrequenzen von ν' und ν'' . Nehmen Sie dafür ein experimentelles Intensitätsverhältnis der beiden Absorptionsbanden von $\rho = 0,43$ an.

