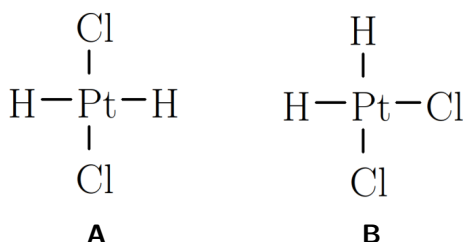


2. Symmetrie – Schwingungen von Molekülen



- a.) Besitzen die Moleküle **A** und **B** ein permanentes Dipolmoment?
- b.) Bestimmen Sie die Punktgruppe der Verbindungen **A** und **B**.
- c.) Bestimme die Anzahl der Grundschrwingungen pro Symmetrierasse. Nutzen Sie zur Aufstellung der Charaktere, die nur Schwingungsfreiheitsgrade besitzen, nachfolgende Tabelle.

	Elemente der Punktgruppe
N_R	
$N_R - 2$	
$1 + 2 \cos \varphi$	
$-1 + 2 \cos \varphi$	
$\chi_{\text{vib}}(C_n)$	
$\chi_{\text{vib}}(S_n)$	

Zum Charakter einer Symmetrieoperation tragen immer nur die Atome (N_R) bei, deren Position bei dieser Operation invariant bleibt. Der so bestimmte Charakter enthält jedoch neben der Schwingungsfreiheitsgrade noch die Translations- und Rotationsfreiheitsgrade. Um nur die Schwingungsfreiheitsgrade zu berechnen, gilt:

$$\chi_{\text{vib}}(C_n) = (N_R - 2) \cdot (1 + 2 \cos \varphi)$$

$$\chi_{\text{vib}}(S_n) = N_R \cdot (-1 + 2 \cos \varphi)$$

- d.) Wann ist eine Schwingung IR-aktiv? Welche der Schwingungen von **A** und **B** sind IR-aktiv? Eignet sich die IR-Spektroskopie, um die beiden Isomere zu unterscheiden?