

Tema 7. Espectroscopía Vibracional

1.- Determinar los modos de vibración de la molécula XeF₄. Determinar las bandas que serán activas en el IR y Raman.

2.- Los espectros vibracionales del PtCl₄²⁻ dan las siguientes bandas:

IR (cm⁻¹): 320, 183, 93; Raman(cm⁻¹): 332(pol.), 314 (despol.), 170 (despol.).

Realizar una asignación de bandas razonable.

3.- El espectro de vibración del ión ClO₄⁻ es el siguiente (valores en cm⁻¹):

IR: 111, 625; Raman: 1102 (despol.), 935 (pol.), 628(despol.) 462 (despol.)

Asignar todas estas bandas a los modos de vibración de esta molécula.

4.- Determina los modos de vibración C-O para los isómeros del Mo(CO)₃(NCCH₃)₃.

5.- Los espectros de las especies HF₂⁻ y DF₂⁻ son los que se muestran a continuación. A partir de estos datos determina si la geometría es angular o lineal.

HF ₂ ⁻	DF ₂ ⁻	Actividad
1550	1140	ir
1200	860	ir
675	675	Raman

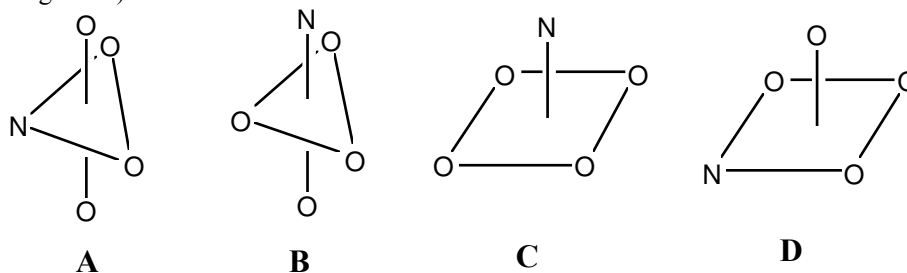
6.- El compuesto PH₃ tiene vibraciones activas en ir y e raman a 2421, 2327, 1121 y 991 cm⁻¹. El PD₃ muestra sus señales a 1698, 1694, 806 y 730 cm⁻¹. Sugiere una asignación de las señales y dibuja cada modo de vibración normal. A partir de las vibraciones para el compuesto PH₃ deducid las del PD₃, teniendo en cuenta la variación de la masa reducida.

7.- (a) Determina el número de vibraciones 'stretching' del CO en los isómeros cis y trans del L₂M(CO)₄.

(b) El compuesto Fe(CO)₄Cl₂ tiene bandas ir a 2167, 2126 y 2082 cm⁻¹ en CHCl₃. ¿Cómo interpretarías este espectro? (c) Dibuja los modos de vibración 'stretching' de los carbonilos en cada isómero L₂M(CO)₄. (denotar >< como compresión de enlace y <> como elongación de enlace; tened en cuenta que la tensión de un solo enlace siempre forma la base legítima de una coordenada de simetría).

8.- El compuesto M(CO)₃H₂L se obtuvo a partir de M(CO)₃Cl₂L + LiAlH₄. La asignación de las bandas ν(CO) y ν(M-H) no es clara debido al solapamiento de éstas, aunque se observan en total cinco bandas en la región 1700-2000 cm⁻¹. Cuatro de estas bandas son polarizadas tal y como se desprende del espectro raman. Asigna una estructura razonable para el compuesto. Propón un método químico para realizar una asignación de las bandas observadas.

9.- A continuación se dan cuatro posibles estructuras para el complejo OsO₄(N) (N=piridina).(Ver tabla en página siguiente).

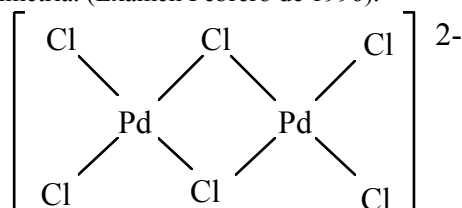


Rellena la siguiente tabla referida a las vibraciones Os-O :

Estructura	Grupo puntual	bandas IR	bandas Raman	Bandas Raman polarizadas
A				
B				
C				
D				

(Examen Sept. 96).

10.- Determina el número de bandas activas en los espectros Raman e IR para la molécula que se muestra a continuación. Dibuja un esquema con los modos de vibración de los enlaces Pd-Cl terminales puentes asignando a cada uno su simetría. (Examen Febrero de 1996).



11.- A continuación se resumen los datos de los espectros raman e IR de los compuestos CrF₂, TiF₂ y CrF₃. Propón la geometría de estas moléculas. (Examen Julio 1996).

Compuesto	IR/cm ⁻¹	Raman/cm ⁻¹
CrF ₂	654, 255	565 (pol)
CrF ₃	749, 177, 125	668 (pol)
TiF ₂	740, 643, 171	-----

12.- El compuesto OsO₄N podría tener una estructura pirámide de base cuadrada o bipirámide pentagonal. Dibuja todas las posibles estructuras para el complejo. El espectro de IR observado en la zona de tensión Os-O muestra las siguientes bandas:

ir: 926, 915, 908, 885 cm⁻¹

raman: 928(p), 916(p) 907(p), 886 cm⁻¹

¿Cuál es la estructura del complejo? ¿En qué complejos cabe esperar efecto Jahn-Teller? Realiza la asignación de bandas. (examen sept. 1997).

13.- Los compuestos heptacoordinados pueden tener dos geometrías idealizadas que son bipirámide de base pentagonal y prisma trigonal apuntado. El compuesto Mo(CN)₇⁴⁻ presenta bandas ir de vibración C-N a 2119, 2115, 2090, 2080 2074 y 2059 cm⁻¹ en estado sólido y a 2080 y 2040 cm⁻¹ en disolución. ¿Cómo interpretarías estos datos? (examen, febrero de 1997).