

## Über das Molekülspektrum des Cyclopentans.

(Berechnung der Normalschwingungsfrequenzen.)

(Kurze Mitteilung.)

Von

H. Voetter und H. Tschamler.

Aus dem Institut für Verfahrenstechnik der Technischen Hochschule Wien und dem I. Chemischen Laboratorium der Universität Wien.

Mit 1 Abbildung.

(Eingelangt am 5. Mai 1952. Vorgelegt in der Sitzung am 8. Mai 1952.)

Nimmt man *Cyclopentan* als *ebenes* und *regelmäßiges* 5-Massen-Modell an, so ergibt sich nach der Symmetrie  $D_{5h}$  folgende Einordnung der Normalschwingungen:

Rasse	$C_5$	$\sigma_h$	Auswahl		Abzählung
			Raman	U-rot	
$A_1'$	sym.	sym.	$p$	$ia$	1
$E_1'$	$2 \cos 72^\circ$	sym.	$v$	$a$	1
$E_2'$	$2 \cos 144^\circ$	sym.	$dp$	$ia$	2

Mit  $R$  als innere Koordinaten (vgl. Abb. 1),  $k_1$  als Valenzkraftkonstante ( $\text{dyn. cm}^{-1}$ ),  $k_{11}$  als Wechselwirkung benachbarter Valenzen ( $\text{dyn. cm}^{-1}$ ),  $k_2$  als Valenzwinkelkraftkonstante ( $\text{dyn. cm}$ ),  $k_{22}$  als Wechselwirkung benachbarter Winkel ( $\text{dyn. cm}$ ) und  $k_{12}$  als Wechselwirkung benachbarter Valenzen und Winkel ( $\text{dyn}$ ) lautet dann der Potentialansatz:

$$\begin{aligned}
 2V = & k_1 [(R_{12})^2 + (R_{23})^2 + (R_{34})^2 + \\
 & + (R_{45})^2 + (R_{51})^2] + \\
 & + k_2 [(R^1)^2 + (R^2)^2 + (R^3)^2 + (R^4)^2 + \\
 & + (R^5)^2] + 2k_{11} [R_{12} R_{23} + R_{23} R_{34} + \\
 & + R_{34} R_{45} + R_{45} R_{51} + R_{51} R_{12}] + \\
 & + 2k_{22} (R^1 R^2 + R^2 R^3 + R^3 R^4 + R^4 R^5 + R^5 R^1) + \\
 & + 2k_{12} [R_{12} (R^1 + R^2) + R_{23} (R^2 + R^3) + R_{34} (R^3 + R^4) + \\
 & + R_{45} (R^4 + R^5) + R_{51} (R^5 + R^1)].
 \end{aligned}$$

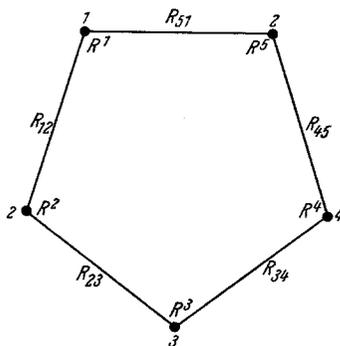


Abb. 1. Spezielle Bezeichnung der inneren Koordinaten  $R$ . ( $R_{ij}$ ... Änderung des Atomabstandes;  $R^i$ ... Änderung des Valenzwinkels.)

Durch Einführung der Symmetriekoordinaten ( $S_i$ ) mit der Normierung  $R_{12} \equiv 1$  und  $R^1 \equiv 1$  spaltet die Säkulargleichung gemäß den einzelnen Rassen auf:

$$A_1': S_1 = R_{12} + R_{23} + R_{34} + R_{45} + R_{51},$$

$$S_2 = R^1 + R^2 + R^3 + R^4 + R^5 \equiv 0.$$

$$E_1': S_3 = R_{12} + R_{51} - \frac{1}{2(1 - \cos \alpha)} (R_{23} + R_{45}) - \frac{2}{1 - 2 \cos \alpha} R_{34},$$

$$S_4 = R^1 - R_{34} \cdot 2 \cdot \cos \frac{\alpha}{2} \equiv 0, \text{ usw.}$$

$$E_2': S_5 = R_{12} + R_{51} - 2 \cdot (1 - \cos \alpha) \cdot (R_{23} + R_{45}) + 2 \cdot (1 - 2 \cos \alpha) \cdot R_{34},$$

$$S_6 = R^1 - \frac{1 - 2 \cos \alpha}{2} (R^2 + R^5) - \cos \alpha \cdot (R^3 + R^4).$$

Von den entarteten Rassen sind nur jeweils die Symmetriekoordinaten der zu einer der  $\sigma_v$  des Moleküls *symmetrischen* Schwingungen angegeben. Damit ergeben sich für die  $\mathcal{G}$ - und  $\mathcal{F}$ -Matrizen der einzelnen Rassen:

Rasse	$\mathcal{G}$ -Matrix
$A_1'$	$2 \mu (1 + \cos \alpha)$
$E_1'$	$2 \mu \sin^2 \alpha$
$E_2'$	$\begin{pmatrix} \frac{5}{2} \mu & -s \mu \sin \alpha (1 + \cos \alpha) \\ -s \cdot \mu \cdot 2 \sin \alpha (3 - 2 \cos \alpha) & \frac{5}{2} s^2 \mu (3 - 2 \cos \alpha) \end{pmatrix}$

Rasse	$\mathcal{F}$ -Matrix
$A_1'$	$k_1 + 2 \cdot k_{11}$
$E_1'$	$(k_1 + a^2 \cdot k_2) - 2 \cos \alpha (k_{11} + a^2 k_{22}) - a \cdot k_{12} (2 - 4 \cos \alpha)$
$E_2'$	$\begin{pmatrix} k_1 - (1 - 2 \cos \alpha) \cdot k_{11} & \frac{1 + 2 \cos \alpha}{2} \cdot k_{12} \\ 2 \cdot k_{12} & k_2 - (1 - 2 \cos \alpha) \cdot k_{22} \end{pmatrix}$

wobei

$$\mu = \frac{1}{m}; \quad s = \frac{1}{r} \quad \text{und} \quad a = 2 \cdot s \cdot \cos \frac{\alpha}{2}$$

ist ( $m \dots$  Masse =  $[\text{CH}_2] = 14$ ;  $r \dots$  C—C-Valenzabstand =  $1,54 \text{ \AA}$ ;  $\alpha \dots$  C—C—C-Valenzwinkel =  $108^\circ$ ).

Die Frequenzen errechnen sich dann aus:

$$|\mathfrak{G} \cdot \mathfrak{F} - \mathfrak{F} \cdot \lambda| = 0 \quad \text{mit} \quad \lambda = \frac{4 \pi^2 \nu^2}{c^2}.$$

Für *Cyclopentan* erhält man, mit oben angegebenen numerischen Werten für  $r$ ,  $\alpha$  und  $\mu = \frac{6,023}{14}$ , als Gleichungen für die einzelnen  $\lambda_i$ :

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0,5945 (k_1 + 2 \cdot k_{11}), \\ \lambda_2 &= 0,7783 k_1 + 0,4536 k_2 + 0,4810 k_{11} - 1,9227 k_{12} + 0,2803 k_{22}, \\ \lambda_3 + \lambda_4 &= 1,0756 k_1 + 1,6408 k_2 - 1,7403 k_{11} - 0,7344 k_{12} - 2,6550 k_{22}, \\ \lambda_3 \cdot \lambda_4 &= 1,4119 k_1 k_2 - 2,2845 (k_1 k_{22} + k_2 k_{11}) + 3,6963 k_{11} k_{22} - \\ &\quad - 0,5394 (k_{12})^2. \end{aligned}$$

Aus den  $\lambda_i$  erhält man die Wellenzahlen  $\nu_i$  mittels der Beziehung:  $\nu_i = 10^8 \sqrt{0,2815 \cdot \lambda_i}$  (cm<sup>-1</sup>).

Sind die Kraftkonstanten  $k_1$ ,  $k_2$ ,  $k_{11}$ ,  $k_{22}$  und  $k_{12}$  gegeben, so können die 4 *ebenen* Gerüstfrequenzen des *Cyclopentans* mit obigen Formeln berechnet werden. Es können aber auch aus verschiedenen, zunächst möglichen Zuordnungen experimentell gefundener Frequenzen die Kraftkonstanten berechnet und durch Vergleich der erhaltenen Werte mit den von anderen ähnlichen Modellsubstanzen bekannten Kraftkonstanten Rückschlüsse auf die richtige Zuordnung gezogen werden.

Die spezielle Diskussion über die verschiedenen vorliegenden Frequenzzuordnungen beim *Cyclopentan* erfolgt in einer eigenen Arbeit.

## Radioaktives Tabakmosaikvirus.

(Kurze Mitteilung.)

Von

H. Schönfellingner und E. Broda.

Aus dem I. Chemischen Laboratorium und dem II. Physikalischen Institut der Universität Wien.

(Eingelangt am 13. Mai 1952. Vorgelegt in der Sitzung am 5. Juni 1952.)

Wir haben am Kohlenstoff markiertes Tabakmosaikvirus (TMV) hergestellt, indem infizierte Blätter von *Nicotiana tabacum* zur Assimilation von Radiokohlensäure veranlaßt wurden.

Die Tabaksamen wurden im März 1951 im Glashaus ausgesät, die Pflänzchen im Mai ins Freie versetzt und im Juni infiziert, indem das Blatt feucht mit einem Schleifmittel aufgeraut und dann mit einem Gazebausch, getränkt mit Viruslösung in Puffer (m/100 Phosphat, pH = 7), gerieben wurde. Nach 4 Wochen waren die Veränderungen an den Pflanzen mit freiem Auge sichtbar.