

## Das Raman-Spektrum des gelbgefärbten kristallinen Bariumtrithiocarbonats<sup>1</sup>

ACHIM MÜLLER und M. STOCKBURGER

Anorganisch-Chemisches Institut der Universität Göttingen und Institut für Spektrochemie und Angewandte Spektroskopie, Dortmund

(Z. Naturforschg. **20 a**, 1242 [1965]; eingegangen am 6. September 1965)

Kürzlich berichteten wir über röntgenographische und infrarotspektroskopische Untersuchungen von  $\text{BaCS}_3$ <sup>2,3</sup>. Es erschien interessant, Kraftkonstanten und Bindungsgrade des  $\text{CS}_3^{2-}$ -Ions zu berechnen, um weitere Vergleiche der Bindungsverhältnisse zwischen Thioanionen und entsprechenden Oxoanionen ziehen zu können. Bei den bisher in diesem Zusammenhang diskutierten Thioanionen hatte sich gezeigt, daß man bei Thioanionen andere Strukturformeln anzugeben hat als bei Oxoanionen<sup>4,5</sup>. In einer früheren Arbeit<sup>6</sup> haben wir Kraftkonstanten des  $\text{CS}_3^{2-}$ -Ions berechnet und die ermittelten Bindungsgrade diskutiert. Die Lage der totalsymmetrischen Valenzschwingung  $\nu_1(A_1')$ , die sich auch bei starker Erhöhung der  $\text{BaCS}_3$ -Probenkonzentration IR-spektroskopisch nicht feststellen ließ, (obwohl dem  $\text{CS}_3^{2-}$ -Ion im kristallinen  $\text{BaCS}_3$  wahrscheinlich die Site-Symmetrie  $C_2$  zukommt) wurde auf anderem Wege ermittelt<sup>7</sup>.

Da es jedoch neuerdings durch die von SCHRADER und STOCKBURGER<sup>8,9</sup> entwickelte Methode möglich ist, auch von farbigen Kristallpulvern mit der Lasertechnik RAMAN-Spektren aufzunehmen, haben wir

zur weiteren Bestätigung unserer Überlegungen das  $\text{BaCS}_3$  RAMAN-spektroskopisch untersucht. Zur Anregung wurde die rote Strahlung des Rubinlasers (6943 Å) verwandt. Die den inneren Schwingungen des  $\text{CS}_3^{2-}$ -Ions entsprechenden RAMAN-Frequenzen gehen aus Tab. 1 hervor. Die Lage von  $\nu_1(A_1')$  bestätigt unsere früheren Untersuchungen, bei denen wir mit Hilfe großer Probenkonzentrationen bei verschiedenen Trithiocarbonaten ( $\text{Ti}_2\text{CS}_3$ ,  $\text{PbCS}_3$ ,  $\text{Ni}(\text{NH}_3)_3\text{CS}_3$  und  $\text{Zn}(\text{NH}_3)_2\text{CS}_3$ ) die Bandenlage der totalsymmetrischen Valenzschwingung (allerdings nicht mit Sicherheit) ermitteln konnten. Ebenso erweist sich damit unsere Abschätzung<sup>7</sup> von  $\nu_1$  mit einem Valenzkraftmodell und dem Orbital-Valenzkraftmodell von HEATH und LINNETT als richtig. Als bemerkenswert erscheint, daß beim  $\text{BaCS}_3$   $\nu_1$  und  $\nu_2$  näherungsweise zufällig entartet sind.

Irreduzible Darstellung $D_{3h}$	Aktivität	Frequenz $\text{cm}^{-1}$	Intensität
$\nu_1(A_1')$	R	510	10 (st)
$\nu_2(A_2')$	IR	(516)*	
$\nu_3(E')$	R, IR	920	<1 (ss)
$\nu_4(E')$	R, IR	325	3 (m)

Tab. 1. RAMAN-spektroskopisch ermittelte Schwingungsfrequenzen des Bariumtrithiocarbonats (Grundschiebungen, die den inneren Schwingungen des  $\text{CS}_3^{2-}$ -Ions entsprechen); \*: IR-spektroskopisch ermittelt<sup>2</sup>.

Der eine von uns (A. M.) dankt Herrn Prof. Dr. O. GLEMSER für großzügige Unterstützung. Unser gemeinsamer Dank gilt Herrn Dr. B. KREBS für die Überlassung sehr reinen Bariumtrithiocarbonats.

<sup>1</sup> X. Mitteilung der Reihe Schwingungsspektroskopische Untersuchungen anorganischer Festkörper; IX. Mitt.: B. KREBS u. A. MÜLLER, Z. Naturforschg. **20 a**, im Druck.

<sup>2</sup> B. KREBS, G. GATTOW u. A. MÜLLER, Z. Anorg. Allg. Chem. **337**, 279 [1965].

<sup>3</sup> Vgl. auch H. SEIDEL, Naturwiss. **52**, 257 [1965].

<sup>4</sup> H. SIEBERT, Z. Anorg. Allg. Chem. **275**, 225 [1954].

<sup>5</sup> Vgl. auch A. MÜLLER u. B. KREBS, Z. Anorg. Allg. Chem., im Druck.

<sup>6</sup> B. KREBS u. A. MÜLLER, Z. Naturforschg. **20 a**, 1124 [1965].

<sup>7</sup> B. KREBS, A. MÜLLER u. G. GATTOW, Z. Naturforschg. **20 a**, im Druck.

<sup>8</sup> B. SCHRADER u. M. STOCKBURGER, Naturwiss. **52**, 298 [1965].

<sup>9</sup> B. SCHRADER u. M. STOCKBURGER, Z. Analyt. Chem., im Druck.

## BERICHTIGUNG

Zu J. ARTMANN, Ergänzende RANKINE-HUGONIOT-Berechnungen für thermische Plasmen, Band **20 a**, 857 [1965].

Auf S. 857, rechte Spalte, muß in der 5. Formel von oben ( $\eta = \dots$ ) im Zähler  $E_D$  additiv hinzugefügt werden.

Die Zeile „mit  $h_0 = \frac{7}{2} k T_0$ “ ist zu ersetzen durch:

„mit  $h_0 = \frac{5}{2} k T_0/m$  für atomare Gase

und  $h_0 = \frac{7}{2} k T_0/(2m)$  für Wasserstoff.“

Die Berechnungen erfolgten nach den richtigen Formeln.

Nachdruck — auch auszugsweise — nur mit schriftlicher Genehmigung des Verlages gestattet

Verantwortlich für den Inhalt: A. KLEMM

Gesamtherstellung: Konrad Triltsch, Würzburg



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.