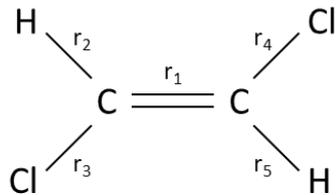


Besprechung am 13.12.2019

Übungsblatt 8

1) Charaktertafel einer Punktgruppe

Nehmen Sie als Basissatz für die Darstellung der Punktgruppe C_{2h} die C-H-, C-Cl- und C=C-Bindungen von (*E*)-1,2-Dichlorethen.



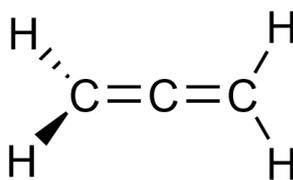
a. Erhalten Sie die vollständige Charaktertafel der Punktgruppe.

(Hinweis: Die Matrizen $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ sind ähnlich)

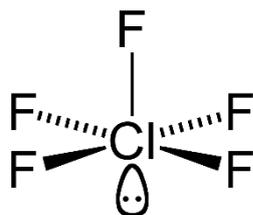
b. Bestimmen Sie die irreduziblen Darstellungen für die *p*- und *d*-Orbitale.

2) Symmetrieanalyse der Schwingungsmoden mehratomiger Moleküle

Führen Sie die Symmetrieanalyse der Schwingungsmoden von Propadien (Allen) und ClF_5 durch. Bestimmen Sie, welche Schwingungen IR- bzw. Raman-aktiv sind.



D_{2d}	E	$2S_4$	C_2	$2C_2'$	$2\sigma_d$		
A_1	1	1	1	1	1	R_z	$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	1	-1	-1		$x^2 - y^2$
B_1	1	-1	1	1	-1	z	xy
B_2	1	-1	1	-1	1		(xz, yz)
E	2	0	-2	0	0	$(x, y); (R_x, R_y)$	



C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
A_1	1	1	1	1	1	z	$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	1	-1	-1		R_z
B_1	1	-1	1	1	-1	x, y	$x^2 - y^2$
B_2	1	-1	1	-1	1		xy
E	2	0	-2	0	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	(xz, yz)