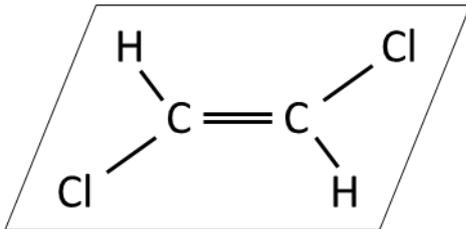


Besprechung am 03.12.2021

## Übungsblatt 6

### 1) Molekülorbitale aus linearer Kombination von Atomorbitalen

- a) Wählen Sie als Basis die  $2p_z$ -Orbitale der Kohlenstoffatome von (trans)-1,2-Dichlorethen, wobei  $z$  parallel zu  $C_2(z)$  ist. Konstruieren Sie die symmetrieadaptierten Orbitale.



$C_{2h}$	E	$C_2(z)$	i	$\sigma_h$
$A_g$	1	1	1	1
$B_g$	1	-1	1	-1
$A_u$	1	1	-1	-1
$B_u$	1	-1	-1	1

- b) Beim (trans)-1,2-Dichlorethen-Molekül entspricht die Symmetrie des LUMO der Darstellung  $B_g$  und die des HOMO  $A_u$ . Wie muss die elektromagnetische Welle polarisiert sein, um Übergänge induzieren zu können?

### 2) Zerlegung einer reduziblen Darstellung

Die Charaktere einer Funktion  $F$  in der Punktgruppe  $C_{3v}$  seien  $\chi(E) = 7$ ,  $\chi(C_3) = 1$  und  $\chi(\sigma_v) = -1$ . Welche irreduzible Darstellung enthält die Funktion  $F$ ?

$C_{3v}$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$		
$A_1$	1	1	1	$z$	$x^2+y^2, z^2$
$A_2$	1	1	-1	$R_z$	
E	2	-1	0	$(x,y) (R_x,R_y)$	$(x^2-y^2,xy) (xz,yz)$