

Besprechung am 25.11.2022

Übungsblatt 5

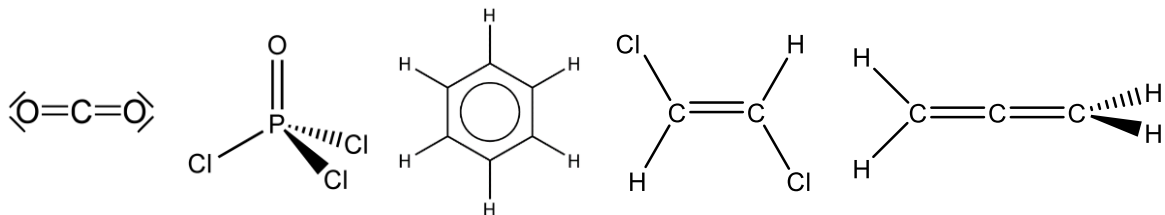
1) Freiheitsgrade

Bestimmen Sie die Anzahl der Freiheitsgrade der folgenden Moleküle und geben Sie an, wie viele davon auf Translation, Rotation und Schwingung entfallen.

- a) H_2O
- b) Mg
- c) Acetylen (HCCH)
- d) Fulleren C_{60}

2) Symmetrieelemente von Molekülen

Charakterisieren Sie für jedes der folgenden Moleküle die Symmetrieelemente und bestimmen Sie die entsprechende Punktgruppe.



3) Darstellung einer Punktgruppe

Bestimmen Sie die Charaktere der irreduziblen Darstellungen der s -, p_z -, d_{xy} - und $d_{x^2-y^2}$ -Atomorbitale in der Punktgruppe C_{4v} (E , $2C_4^z$, C_2 , $2\sigma_v$, $2\sigma_d$).

Weisen Sie anschließend den erhaltenen irreduziblen Darstellungen die entsprechenden Mulliken-Symbole (A, B, E) zu und begründen Sie kurz Ihre Entscheidung.

(Hinweise: Um sich die Wirkung der σ_d -Elemente vorzustellen, wird es empfohlen, auf eine Projektion entlang der z-Achse zurückzugreifen.)

