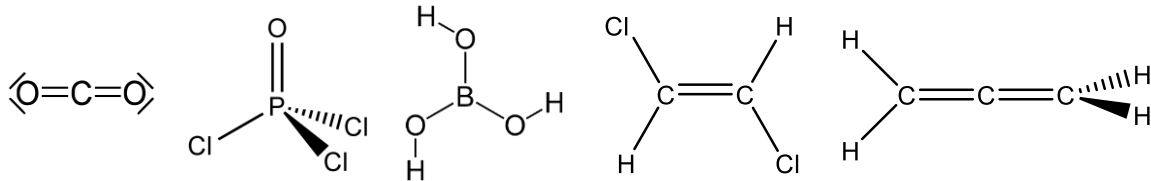


Besprechung am 08.12.2022

## Übungsblatt 7

### 1) Symmetrieelemente von Molekülen

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



### 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	$(x,y) (R_x,R_y)$	$(x^2-y^2,xy) (xz,yz)$

### 3) Symmetrieanalyse von Schwingungsmoden

Führen Sie die Symmetrieanalyse der Schwingungsmoden von  $\text{ClF}_5$  durch. Bestimmen Sie, welche Schwingungen IR-aktiv sind.

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