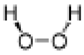
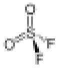
Lösungen zum Übungsblatt 11

Aufgabe 1

sec-Butanol (2-Butanol) 
nein-nein-nein-nein-nein — C_1

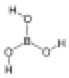
H_2O_2 
nein-nein-ja(n=2)-nein-nein-nein-nein — C_2

Hypochlorige Säure HOCl 
nein-nein-nein-ja — C_σ

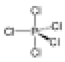
Sulfuryldifluorid SO_2F_2 
nein-nein-ja(n=2)-nein-ja — C_{2v}

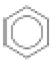
Propin C_3H_4 
nein-nein-ja(n=3)-nein-ja — C_{3v}

HCl
ja-nein — $C_{\infty v}$

Borsäure H_3BO_3 
nein-nein-ja(n=3)-nein-ja — C_{3h}

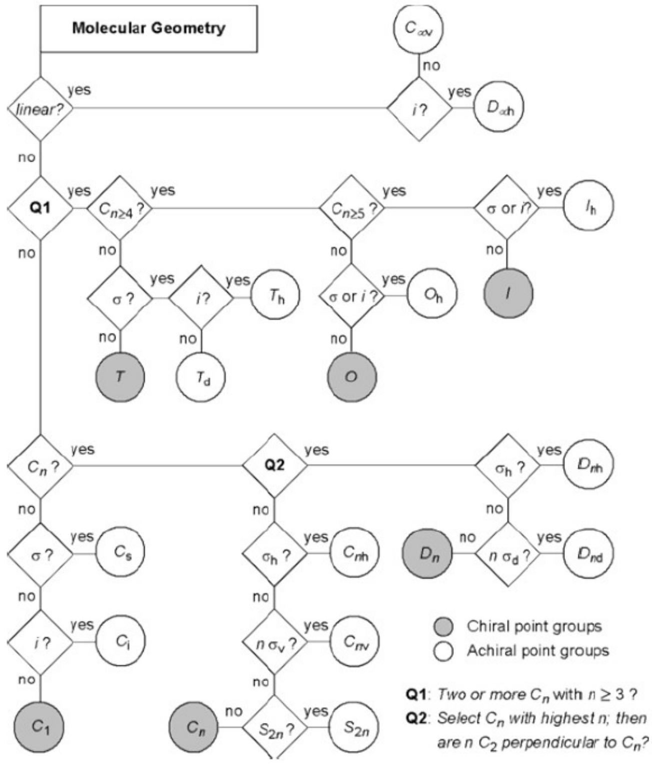
Diboran B_2H_6 
nein-nein-ja(n=2)-ja-ja — D_{2h}

Phosphorpentachlorid PCl_5 
nein-nein-ja(n=3)-ja-ja — D_{3h}

Benzol C_6H_6 
nein-nein-ja(n=6)-ja-ja — D_{6h}

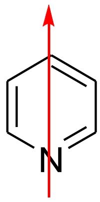
Diacetylen C_4H_2 H—C≡C—C≡C—H
ja-ja — $D_{\infty h}$

CH_4
nein-ja-nein-ja-nein — T_d

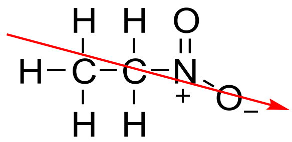


Aufgabe 2

a)



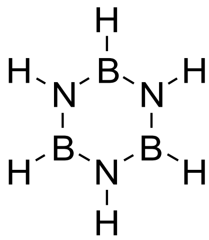
b)



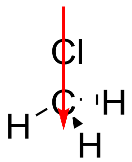
in der Spiegelebene

c) Br–Hg–Br

d)



e)



Aufgabe 3

Der Zusammenhang zwischen der Verknüpfung zweier irreduzibler Darstellungen lautet:

$$\sum_R g_R \cdot \chi_i(R) \cdot \chi_k(R) = h\,\delta_{ik}$$

Wenn die Koeffizienten i und k gleich sind, beträgt das sogenannte Kronecker-Delta δ_{ik} Eins. Das bedeutet, dass so die Anzahl der Symmetrieoperationen h bestimmt werden kann. Wenn i und k ungleich sind, ist $\delta_{ik} = 0$. So verhalten sich orthogonale Vektoren. Dieses Theorem wird nun an einigen Beispielen aus der Charaktertafel der Punktgruppe C_{4v} angewendet. Beispiele:

$$A_1 \cdot A_1 \;:\; \sum_R g_R \cdot \chi_i(A_1) \cdot \chi_k(A_1) = \sum_R g_R \cdot \chi_i(A_1)^2 = 1 \cdot 1^2 + 2 \cdot 1^2 + 1 \cdot 1^2 + 2 \cdot 1^2 + 2 \cdot 1^2 = 8$$

$$B_2 \cdot B_2 \;:\; \sum_R g_R \cdot \chi_i(B_2) \cdot \chi_k(B_2) = \sum_R g_R \cdot \chi_i(B_2)^2 = 1 \cdot 1^2 + 2 \cdot (-1)^2 + 1 \cdot 1^2 + 2 \cdot (-1)^2 + 2 \cdot 1^2 = 8$$

$$E \cdot E \;:\; \sum_R g_R \cdot \chi_i(E) \cdot \chi_k(E) = \sum_R g_R \cdot \chi_i(E)^2 = 1 \cdot 2^2 + 2 \cdot 0^2 + 1 \cdot (-2)^2 + 2 \cdot 0^2 + 2 \cdot 0^2 = 8 \quad \text{usw.}$$

$$A_1 \cdot A_2 \;:\; \sum_R g_R \cdot \chi_i(A_1) \cdot \chi_k(A_2) = 1 \cdot 1 \cdot 1 + 2 \cdot 1 \cdot 1 + 1 \cdot 1 \cdot 1 + 2 \cdot 1 \cdot (-1) + 2 \cdot 1 \cdot (-1) = 0$$

$A_2 \cdot B_1 \ : \ \sum_R g_R \cdot \chi_i(A_2) \cdot \chi_k(B_1) = 1 \cdot 1 \cdot 1 + 2 \cdot 1 \cdot (-1) + 1 \cdot 1 \cdot 1 + 2 \cdot (-1) \cdot 1 + 2 \cdot (-1) \cdot (-1) = 0$

$B_2 \cdot E \ : \ \sum_R g_R \cdot \chi_i(A_2) \cdot \chi_k(B_1) = 1 \cdot 1 \cdot 2 + 2 \cdot (-1) \cdot 0 + 1 \cdot 1 \cdot (-2) + 2 \cdot (-1) \cdot 0 + 2 \cdot 1 \cdot 0 = 0$ usw.

Aufgabe 4

Für die Verknüpfung zweier Symmetrieoperation wird hier das allgemeine Symbol $\circ$ (Kuller) gewählt, um Verwechslungen mit klassischen algebraischen Rechnungen zu vermeiden. Die Rechenregeln für die Verknüpfung zweier Symmetrieoperationen ähneln dann denen der Multiplikation, wie man bei a) leicht sieht. Die dort resultierende C_2-Drehung entspricht dann, wie der obenstehenden Tabelle zu entnehmen ist, einer 180°-Drehung.

a) $C_4 \circ C_4 = C_4^2 = C_2$

b) $C_3 \circ C_3^{-1} = C_3 \circ C_3^2 = C_3^3 = C_1 = E$

c) $C_4 \circ C_4^3 = C_4^4 = E$

d) $C_4 \circ i = C_4 \circ S_2 = C_4 \circ C_2 \circ \sigma_h = C_4 \circ C_4^2 \circ \sigma_h = C_4^3 \circ \sigma_h = S_4^3$
(Drehung um 270° mit anschließender Ebenenspiegelung)

e) $C_4 \circ C_2 = C_4 \circ C_4^2 = C_4^3$ (270°-Drehung)

f) $C_4 \circ \sigma_h = S_4$

g) $C_4 \circ \sigma_v = \sigma_d$

h) $C_4 \circ S_4 = C_4 \circ C_4 \circ \sigma_h = C_2 \circ \sigma_h = S_2 = i$