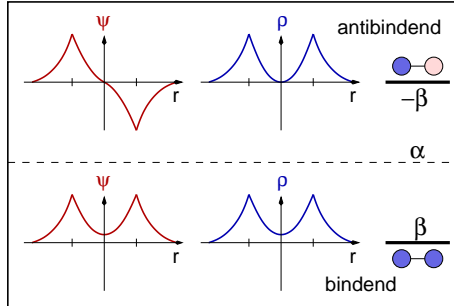


2. LCAO-Ansatz: Der Festkörper als 'Riesenmolekül' (Forts.)

2.1.2. Molekülorbitale

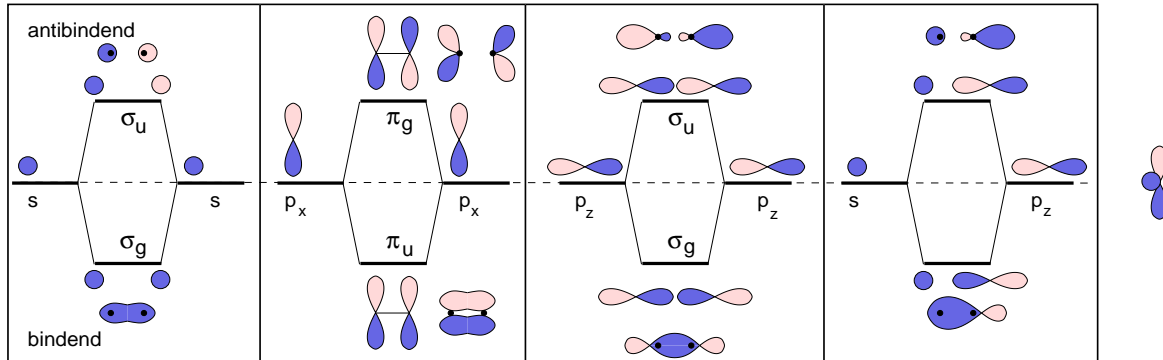
H₂⁺:



Charaktertafel der Punktgruppe D_{∞h} (Ausschnitt)

	E ... ∞σ _v	i ... ∞C ₂		
Σ _g ⁺	1 ... 1	1 ... 1	R _z (R _x , R _y)	x ² + y ² , z ² (xz, yz)
Σ _g ⁻	1 ... -1	1 ... -1		
Π _g	2 ... 0	2 ... 0		
...				
Σ _u ⁺	1 ... 1	-1 ... -1	z	
Σ _u ⁻	1 ... -1	-1 ... 1		
Π _u	2 ... 0	-2 ... 0	(x,y)	
...				
2 1s	2 ... 2	0	0	σ _g ⁺ + σ _u ⁺
2 p _z	2 ... 2	0	0	σ _g ⁺ + σ _u ⁺
2 p _{x,y}	4 ... 0	0	0	π _g + π _u

verschiedene MO's als LC von AO



Mulliken-Symbole für die irreduziblen Darstellungen

Dimension der Darstellung	Charakter bei					Symbole
	E	C _n	i	σ _h	C _{2_oder_σ_v}	
1	1	1				A
	1	-1				B
2	2					E
3	3					T
			1 -1	1 -1	1 -1	g (gerade, tiefgestellt) u (ungerade, tiefgestellt) ' (einfach gestrichen) " (doppelt gestrichen) 1 (tiefgestellt) 2 (tiefgestellt)