

2.6. Gruppentheorie II (Forts.)

2.6.2 Irreduzible Darstellungen, Charaktertafeln

Anwendung irreduzibler Darstellungen

Anwendung	Basis
Zahl und Symmetrie von Molekülschwingungen (3N, mit Gesamttranslation/-libration)	kartesische Verschiebungsvektoren
Zahl und Symmetrie von Molekülschwingungen (3N-6, d.h. ohne Gesamttranslation/-libration, Normalkoordinatenanalyse)	interne Verschiebungskooordinaten
Konstruktion von MO's	Atomorbitale
Ligandenfeldtheorie	d-Atomorbitale
Voraussage erlaubter chemischer Reaktionen	Molekülorbitale

Rezept: **Reduktion einer reduzierten Darstellung in irreduzible Darstellungen**

$$a_i = \frac{1}{h} \sum_R \chi(R) \chi_i(R)$$

mit

R Symmetrieeoperation

a_i Häufigkeit der i-ten Darstellung

h Gruppenordnung

χ(R) Charakter der reduzierten Darstellung bei R

χ_i(R) Charakter der irreduziblen Darstellung i bei R

Mulliken-Symbole für die irreduziblen Darstellungen

Dimension der Darstellung	Charakter bei					Symbole
	E	C _n	i	σ _h	<u>C₂-oder-σ_v</u>	
1	1	1				A
	1	-1				B
2	2					E
3	3					T
			1			g (gerade, tiefgestellt)
			-1			u (ungerade, tiefgestellt)
				1		' (einfach gestrichen)
				-1		" (doppelt gestrichen)
					1	1 (tiefgestellt)
					-1	2 (tiefgestellt)

Beispiel C_{2v} z.B. H₂O

Irreduzible Darstellungen der Gesamttranslationen und -librationen in C_{2v}

	Symmetrieeoperation				Symbol der irred. Darstellung
	E	C ₂	σ _v (xz)	σ' _v (yz)	
Translation z	1	1	1	1	A ₁
Translation x	1	-1	1	-1	B ₁
Translation y	1	-1	-1	1	B ₂
Rotation um z	1	1	-1	-1	A ₂
Rotation um x	1	-1	-1	1	B ₂
Rotation um y	1	-1	1	-1	B ₁

Charaktertafel für die Punktgruppe C_{2v}

	E	C ₂	σ _v (xz)	σ' _v (yz)		
A ₁	1	1	1	1	z	x ² , y ² , z ²
A ₂	1	1	-1	-1	R _z	xy
B ₁	1	-1	1	-1	x, R _y	xz
B ₂	1	-1	-1	1	y, R _x	yz