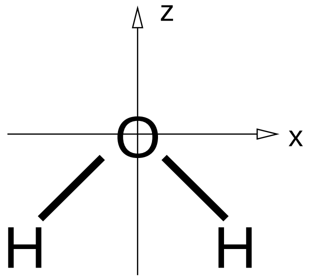
6.4. Darstellungstheorie

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

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



	Symmetrieoperation				Symbol der
	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$	irred. Darstellung
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

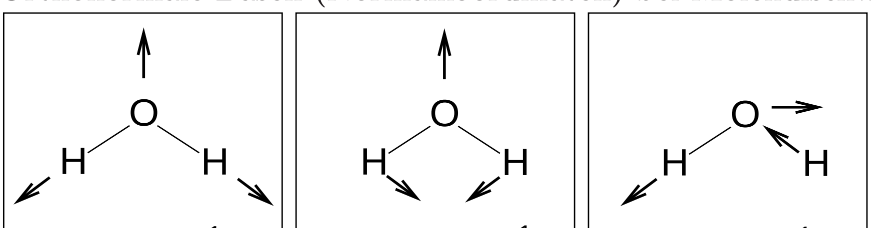
Charaktertafel für die Punktgruppe C_{2v}

	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$		
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

Mulliken-Symbole für ausgewählte Charaktere irreduzibler Darstellungen

Dimension der Darstellung	Charakter bei					Symbole
	E	C_n	i	σ_h	$\underbrace{C_2 \text{ oder } \sigma_v}$	
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)

Orthonormale Basen (Normalkoordinaten) bei Molekülschwingungen



A1 (3652 cm^{-1}) A1 (1595 cm^{-1}) B2 (3756 cm^{-1})