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 reduziblen Darstellung in irreduzible Darstellungen**

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

mit

R	Symmetrieoperation
a_i	Häufigkeit der i-ten Darstellung
h	Gruppenordnung
χ(R)	Charakter der reduziblen Darstellung bei R
χ_i(R)	Charakter der irreduziblen Darstellung i bei R

Mulliken-Symbole für die irreduziblen Darstellungen

Dimension der Darstellung	Charakter bei E	C_n	i	σ_h	C_2_oder_σ_v	Symbole
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. H_2O

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

	Symmetrieoperation E	C_2	σ_v(xz)	σ'_v(yz)	Symbol der 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	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