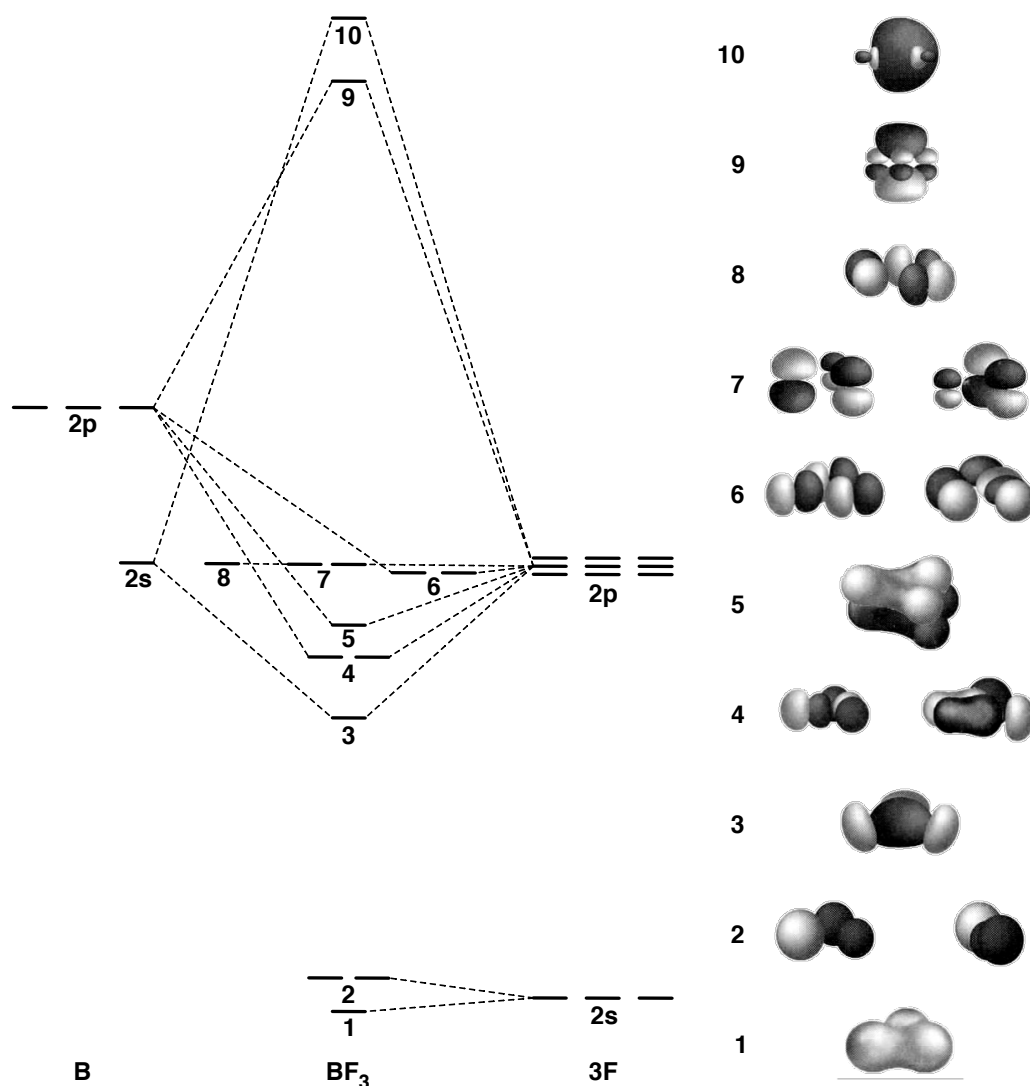


Gruppentheorie  
 Sommersemester 2019

Übungsblatt 7: Irreduzible Darstellungen und Charaktere

Aufgabe 1

Tragen Sie in folgendem Diagramm für  $\text{BF}_3$  die Mulliken-Symbole für die 10 durchnummerierten Molekülorbitale ein.



### Aufgabe 2

Gegeben seien die Charaktere  $\chi$  einer Darstellung  $\Gamma$  für die verschiedenen Klassen einer Punktgruppe in der Reihenfolge, in der sie in den zugehörigen Charaktertafeln unten auftauchen. Benutzen Sie das Prinzip aus der Vorlesung, um die folgenden Darstellungen zu reduzieren, d.h. auf eine Linearkombination irreduzibler Darstellungen zurückzuführen:

- (a)  $C_{2v}$ :  $\chi = (4, -2, 0, -2)$
- (b)  $C_{3h}$ :  $\chi = (4, 1, 1, 2, -1, -1)$
- (c)  $D_{4d}$ :  $\chi = (6, 0, -2, 0, -2, 0, 0)$
- (d)  $O_h$ :  $\chi = (15, 0, 1, 1, -1, -3, -1, 0, 5, 3)$ .

$C_{2v}$	E	$C_2$	$\sigma_v(xy)$	$\sigma_v(yz)$
A <sub>1</sub>	+1	+1	+1	+1
A <sub>2</sub>	+1	+1	-1	-1
B <sub>1</sub>	+1	-1	+1	-1
B <sub>2</sub>	+1	-1	-1	+1

$C_{3h}$	E	$C_3$	$C_3^2$	$\sigma_h$	$S_3$	$S_3^5$
A'	+1	+1	+1	+1	+1	+1
E' <sub>(1)</sub>	+1	$e^{i\frac{2\pi}{3}}$	$e^{-i\frac{2\pi}{3}}$	+1	$e^{i\frac{2\pi}{3}}$	$e^{-i\frac{2\pi}{3}}$
E' <sub>(2)</sub>	+1	$e^{-i\frac{2\pi}{3}}$	$e^{i\frac{2\pi}{3}}$	+1	$e^{-i\frac{2\pi}{3}}$	$e^{i\frac{2\pi}{3}}$
A''	+1	+1	+1	-1	-1	-1
E'' <sub>(1)</sub>	+1	$e^{i\frac{2\pi}{3}}$	$e^{-i\frac{2\pi}{3}}$	-1	$-e^{i\frac{2\pi}{3}}$	$-e^{-i\frac{2\pi}{3}}$
E'' <sub>(2)</sub>	+1	$e^{-i\frac{2\pi}{3}}$	$e^{i\frac{2\pi}{3}}$	-1	$-e^{-i\frac{2\pi}{3}}$	$-e^{i\frac{2\pi}{3}}$

$D_{4d}$	E	2 S <sub>8</sub>	2 C <sub>4</sub>	2 S <sub>8</sub> <sup>3</sup>	C <sub>2</sub>	4C' <sub>2</sub>	4σ <sub>d</sub>
A <sub>1</sub>	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
A <sub>2</sub>	+1	+1	+1	+1	+1	-1	-1
B <sub>1</sub>	+1	-1	+1	-1	+1	+1	-1
B <sub>2</sub>	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1
E <sub>1</sub>	+2	$+\sqrt{2}$	0	$-\sqrt{2}$	-2	0	0
E <sub>2</sub>	+2	0	-2	0	+2	0	0
E <sub>3</sub>	+2	$-\sqrt{2}$	0	$+\sqrt{2}$	-2	0	0

$\mathbf{O}_h$	E	8 $C_3$	6 $C'_2 = C_4^2$	6 $C_4$	3 $C_2$	i	6 $S_4$	8 $S_6$	3 $\sigma_h$	6 $\sigma_d$
$A_{1g}$	+1	+1	+1	+1	+1	+1	1	+1	+1	+1
$A_{2g}$	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	+1	+1	-1
$E_g$	+2	-1	0	0	+2	+2	0	-1	+2	0
$T_{1g}$	+3	0	-1	+1	-1	+3	1	0	-1	-1
$T_{2g}$	+3	0	+1	-1	-1	+3	-1	0	-1	+1
$A_{1u}$	+1	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1
$A_{2u}$	+1	+1	-1	-1	+1	-1	1	-1	-1	+1
$E_u$	+2	-1	0	0	+2	-2	0	+1	-2	0
$T_{1u}$	+3	0	-1	+1	-1	-3	-1	0	+1	+1
$T_{2u}$	+3	0	+1	-1	-1	-3	1	0	+1	-1

Der Übungszettel wird am Dienstag, den 11.06.2019 in der Übung besprochen