

22) Welche Symmetrieelemente enthalten die folgenden Moleküle, und zu welchen Punktgruppen gehören sie:

(a) Schwefeltetraclorid, (b) NO_2 , (c) Anthracen, (d) alle möglichen Difluorbenzol, (e) $\text{Fe}_2(\text{CO})_9$, (f) trans- $\text{CHCl}=\text{CHCl}$, (g) ein vierbeiniger Tisch.

23) Ist das Integral $\int p_z x p_z d\tau$ in einem Molekül der Punktgruppe C_{4v} null? Versuchen Sie die Frage mithilfe der Symmetrieeigenschaften der Funktionen zu erklären.

24) Benutzen Sie als Basis im H_2O -Molekül die $\text{H}1s$ -Orbitale und die vier Valenzorbitale des Sauerstoffatoms. Konstruieren Sie die 6×6 Matrizen der Matrixdarstellung der Gruppe in dieser Basis. Zeigen Sie durch explizite Matrixmultiplikation, dass folgendes gilt: (a) $C_2\sigma_v = \sigma'_v$ und (b) $\sigma_v\sigma'_v = C_2$. (c) Bestimmen Sie durch Summierung der Diagonalelemente die Charakteren und zeigen sie, dass die Darstellung reduzibel ist. (d) Zeigen Sie, zu welchen irreduziblen Darstellungen sich die reduzible Darstellung ausreduzieren läßt.

25) Welche Schwingungen sind beim SF_2 -Molekül meßbar?

(a) Symmetrie-Rassen der Translation?

(b) Symmetrie-Rassen der Rotation?

(c) Wieviel Schwingungsfreiheitsgrade hat SF_2 ?

(d) Berechne den Charakter χ und reduziere aus.

(e) Was bleibt für die Schwingungen übrig? Zahl der Normalschwingungen?

(f) Welche Schwingungen sieht man im IR-Spektrum, welche im Raman-Spektrum?

(g) Skizziere und charakterisiere die Normalmoden.