

Oplossingen Symmetrie - Week 2

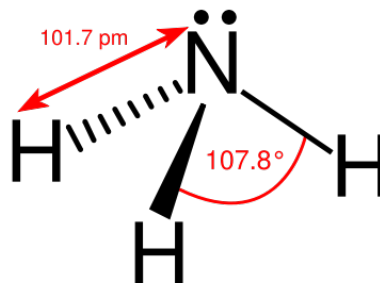
Opgaven 11.1

Volgens opgaven EN3 geldt $V \simeq 2A_{1g} \oplus A_{2g} \oplus 2B_{2g} \oplus E_{1g} \oplus 4E_{2g} \oplus A_{2u} \oplus 2B_{1u} \oplus 2B_{2u} \oplus 3E_{1u} \oplus 2E_{2u}$. Het vibratiespectrum van benzeen bevat dus hoogstens 20 frequenties.

In het infraroodspectrum zie je daarvan alleen de vier waarvan het type voorkomt in π , namelijk de $A_{2u} \oplus 3E_{1u}$.

Opgaven 11.2

Hier een voorstelling¹ van ammoniak: Aangezien het N atoom op zijn plek



blijft en het molecuul niet plat is, is de symmetriegroep van NH_3 gelijk aan D_3 . Voorbeeld 10.17 geeft karaktertabel.

D_3	E	$2C_3$	$3C_2$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-2	0

Bereken de andere karakters.

D_3	E	$2C_3$	$3C_2$
χ_π	3	0	1
χ_ρ	4	1	2
χ_Π	12	0	2
$\det \cdot \chi_\pi$	3	0	-1
$\chi_V = \chi_\Pi - \chi_\pi - \det \cdot \chi_\pi$	6	0	2

We berekenen nu de inproducten van χ_V met de irreducibele karakters en gebruiken Schur's orthogonaliteitsrelatie om de multipliciteiten te vinden.

¹van wikipedia

$$(\chi_V | A_1) = \frac{1}{6}(1 \cdot 6 \cdot 1 + 0 + 3 \cdot 2 \cdot 1) = 2,$$

$$(\chi_V | A_2) = \frac{1}{6}(1 \cdot 6 \cdot 1 + 0 - 3 \cdot 2 \cdot 1) = 0,$$

$$(\chi_V | E) = \frac{1}{6}(1 \cdot 6 \cdot 2 + 0 + 0) = 2.$$

V ontbindt dus in $2A_1 \oplus 2E$ en geeft 4 infrarood spectra.