

Kémiai matematika

12. gyakorlat

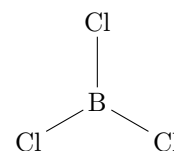
Busai Ágota
agota.busai@gmail.com
www.math.bme.hu/~bgotti

2016.12.08.

Az előző gyakorlatról megmaradt feladatok:

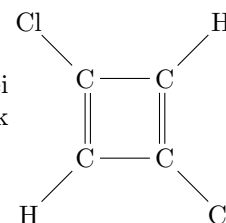
- (a) Szerkesszük meg a C_{3v} csoport szorzótábláját (tipp: ammónia)!
- (b) Határozd meg a C_{3v} csoport részcsoportjait!
- (c) Keressük meg C_{3v} -ben a konjugáltosztályokat!
- (d) Ábrázoljuk a C_{3v} csoportot!
- (e) Adjuk meg a fenti Γ ábrázolás karaktereit!
- (f) Redukálható-e a Γ ábrázolás? Ha igen, bontsuk fel Γ -t irreducibilis reprezentációk direkt összegére!

-
1. Milyen szimmetriaelemei vannak a bór-trikloridnak? Milyen szimmetriacsoportot alkotnak az ezek által generált szimmetriaműveletek?



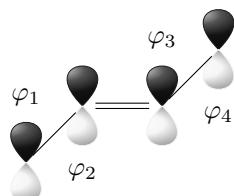
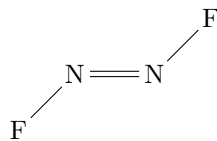
- HF ♥ 2. Szerkesszük meg a D_{3h} szimmetria-pontcsoport karaktertábláját!

3. Milyen szimmetriacsoportot alkotnak a ciklobutadién-1,3-Cl szimmetriaelemei által generált szimmetriaműveletek? Ábrázoljuk a csoportot, majd redukáljuk a kapott reprezentációt, amennyiben az nem irreducibilis!



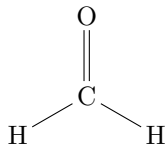
4. Az előző feladatban elkészítettük a ciklobutadién-1,3-Cl (C_{2h}) egy ábrázolását és felbontottuk azt irreducibilis reprezentációk direktösszegére.
 - (a) Adjuk meg a molekula normálrezgéseinek szimmetriáit!
 - (b) Mely rezgések IR- és mely rezgések Raman-aktívak?
 - (c) Szerkesszük meg az irreducibilis ábrázolások bázisfüggvényeit!

5. Tekintsük a transz-dinitrogén-fluorid molekulát (N_2F_2)!



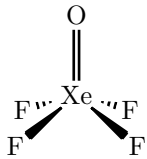
- (a) Ábrázoljuk a C_{2h} csoportot a molekulát alkotó atomok p_z pályái alkotta bázisban!
- (b) Bontsuk fel a fenti ábrázolást irreducibilis reprezentációk direktösszegére!
- (c) Szerkesszük meg az irreducibilis reprezentációk bázisvektorait!

6. Tekintsük a formaldehid molekulát (CHOH)! Legyen az xz sík a molekulasisík, a z tengely pedig a kétfogású tengely.



- (a) Ábrázoljuk a C_{2v} csoportot a molekula atomjainak x , y és z irányú elmozdulásvektoraival!
- (b) Redukáljuk a fenti ábrázolást!
- (c) Szerkesszünk a B_2 irreducibilis reprezentáció szerint transzformálódó vektort a H-atomok elmozdulásvektoraiból kiindulva!
- (d) Tudunk-e az A_2 irrep szerint transzformálódó kombinációt szerkeszteni?
- (e) Molekularezgést írna-e le egy, az A_2 irreducibilis reprezentációra invariáns kombinációja a bázisvektoroknak?

7. Tekintsük a xenon-oxi-tetrafluorid molekulát ($XeOF_4$, négyzet alapú gúla)! Legyen Xe az origóban, O a z tengely mentén, a fluor atomok az xz és yz síkban, a σ_v szimmetriaműveletek a fluor atomokat tartalmazó síkokra való tükrözést, a σ_d szimmetriaműveletek a fluor atomok szögfelező síkjaira való tükrözéseket jelöljék.



- (a) Ábrázoljuk a C_{4v} csoportot a molekula atomjainak x , y és z irányú elmozdulásvektorai alkotta bázisán!
- (b) Bontsuk irreducibilis reprezentációk direktösszegére a fenti ábrázolást!
- (c) Mik a molekula normálrezgéseinek szimmetriái?
- (d) Szerkesszünk B_2 szimmetriájú kombinációt a megadott bázisvektorokból kiindulva!

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$		
A_1	1	1	1	z	$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	-1	R_z	
E	2	-1	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy)(xz, yz)$

C_{2h}	E	C_2	i	σ_h		
A_g	1	1	1	1	R_z	x^2, y^2, z^2, xy
B_g	1	-1	1	-1	R_x, R_y	xz, yz
A_u	1	1	-1	-1	z	
B_u	1	-1	-1	1	x, y	

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

C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
A_1	1	1	1	1	1	z	$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	1	-1	-1	R_z	
B_1	1	-1	1	1	-1		$x^2 - y^2$
B_2	1	-1	1	-1	1		xy
E	2	0	-2	0	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	(xz, yz)