

Quantum Chemie, Werkcollege week 6

Vraag 1: improper rotatie

Gebruik de resultaten van vorige week

1a. Laat zien dat:

$$\sigma(\mathbf{n})\mathbf{R}(\mathbf{n}, \phi) = \mathbf{R}(\mathbf{n}, \phi)\sigma(\mathbf{n}).$$

1b. Gegeven de improper rotatie:

$$\mathbf{S}(\mathbf{n}, \phi) = \sigma(\mathbf{n})\mathbf{R}(\mathbf{n}, \phi).$$

Laat zien dat $\mathbf{S}(\mathbf{n}, \pi) = -\mathbf{1}$.

1c. Bepaal het karakter van een improper rotatie.

Vraag 2: G.O.T.

Gegeven het G.O.T.

$$\sum_{\hat{g} \in G} \mathbf{D}_{mn}^{(\alpha)}(\hat{g})\mathbf{D}_{m'n'}^{(\beta)}(\hat{g}^{-1}) = \frac{{}^oG}{{}^o\Gamma(\alpha)} \delta_{\alpha\beta} \delta_{mm'} \delta_{nn'}$$

2a. Laat zien dat

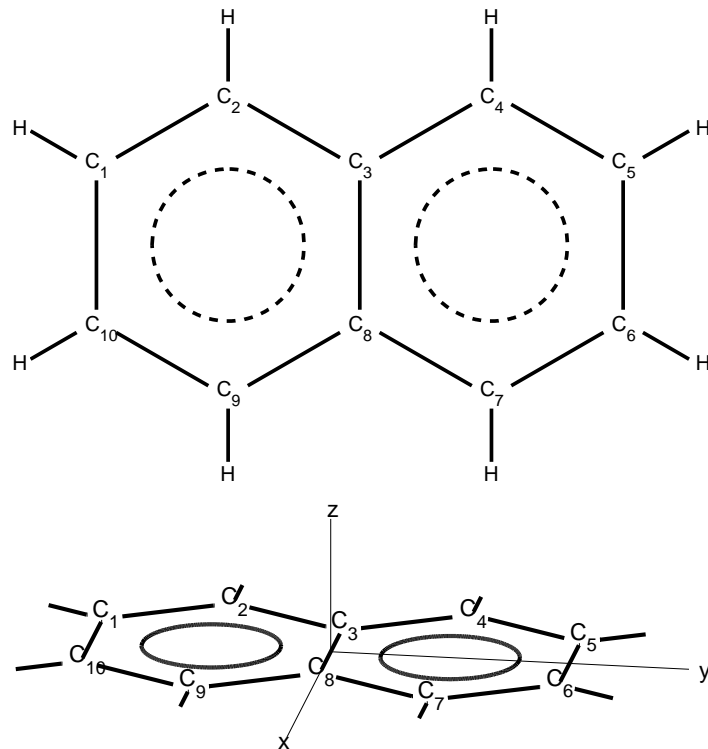
$$\begin{aligned} \sum_{\hat{g} \in G} \chi^{(\alpha)}(\hat{g})\chi^{(\beta)}(\hat{g}^{-1}) &= {}^oG\delta_{\alpha\beta}. \\ \sum_{C \subset G} {}^oC\chi^{(\alpha)}(C)\chi^{(\beta)}(C)^* &= {}^oG\delta_{\alpha\beta}. \end{aligned}$$

2b. Laat zien dat $\chi^{(\alpha)}(\hat{g}^{-1}) = \chi^{(\alpha)}(\hat{g})^*$.

2c. Bepaal de karakter tabel van C_{3v} gegeven het bovenstaande en de orthogonaliteitsrelatie voor de kolommen van de karakertabel:

$$\sum_{\alpha} \chi^{(\alpha)}(C)\chi^{(\alpha)}(C')^* = \delta_{CC'} \frac{{}^oG}{{}^oC}.$$

Vraag 3: Naftaleen



D_{2h}	E	C_{2x}	C_{2y}	C_{2z}	σ_{xy}	σ_{xz}	σ_{yz}	i
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1
A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
B_{1g}	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
B_{1u}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
B_{2g}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
B_{2u}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
B_{3g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
B_{3u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1

- 3a. Gegeven de karaktertabel van D_{2h} , geef het aantal MOs per irreducibele representatie voor de Hückel basis van naftaleen. Maak gebruik van:

$$n_\alpha = \frac{1}{oG} \sum_{C \in G} {}^o C \chi^{(\alpha)}(g)^* \chi(g).$$