

Räkneövning 5 i atomers och molekylers struktur

(10.3.2000)

1. Till vilka punktgrupper hör följande föremål: a) En vässt sexkantig blyertspenna. b) en ovässt rund blyertspenna. c) hakkorset d) de olympiska ringarna (om man struntar i dess färger) e) Du (ungefär) f) en propeller med tre blad.
2. Till vilka punktgrupper hör följande molekyler: a) cis-1,2-dikloreten. b) trans-1,2-dikloreten. c) 1,1,-dikloreten. d) tetrakloreten. e) kloreten. Vilka av dem är polära? Vilka av dem är kirala?
3. Till vilka punktgrupper hör: a) benzene. b) naftalen Molekylernas grundtillstånd tillhör den totalsymmetriska irreducibla representationen. Till vilka irreducibla representationer hör de exciterade tillstånd som kan nås via dipoltillåtna elektroniska övergångar?
4. Till vilken punktgrupp hör BF_3 ? Konstruera multiplikationstabellen för denna punktgrupp.
5. Till vilken punktgrupp hör eten? Om molekylens placeras så att $\text{C}=\text{C}$ bindningen ligger längs z -axeln. Till vilka irreducibla representationer hör i så fall $p_x(\text{C}_1)$, $p_y(\text{C}_1)$, $p_x(\text{C}_2)$, och $p_y(\text{C}_2)$ som huvudsakligen bildar de molekylära π -orbitalerna.
6. En molekyl tillhör punktgruppen D_4 . De fyra högsta ockuperade molekylorbitalerna bildar tillsammans den reducerbara representationen $\Gamma = 4, 0, 0, 2, 0$ för symmetrioperationerna E , C_2 , C_4 , C_2' och C_2'' . Till vilka irreducibla representationer hör de fyra molekylorbitalerna?