

## Задачи к лекции 2

ПО КУРСУ “ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ ГРУПП К ФИЗИКЕ И ХИМИИ”, 20-31 июля 2013, г. ДУБНА

Курносков Никон

Задачи можно рассказывать мне (213-Б), если возникают какие-то вопросы, то смело их задавайте!

1. а) Каким представлениям соответствуют нормальные колебания молекул аммиака ( $\text{NH}_3$ ), который имеет структуру пирамиды с атомом  $N$  в вершине и атомами  $H$  в основании?

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

б) Распишите нормальные колебания молекулы  $\text{SF}_6$ . Сколько ИК-активных колебаний, а сколько раман-?

repr. basis functions	$E$	$3C_2$	$6C_4$	$6C_2'$	$8C_3$	$i$	$3iC_2'$	$6iC_4$	$6iC_2'$	$8iC_3$
$A_1^+$ 1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$A_2^+$ $\left\{ \begin{matrix} x^4(y^2 - z^2) + \\ y^4(z^2 - x^2) + \\ z^4(x^2 - y^2) \end{matrix} \right\}$	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
$E^+$ $\left\{ \begin{matrix} x^2 - y^2 \\ 2z^2 - x^2 - y^2 \end{matrix} \right\}$	2	2	0	0	-1	2	2	0	0	-1
$T_1^-$ $x, y, z$	3	-1	1	-1	0	-3	1	-1	1	0
$T_2^-$ $z(x^2 - y^2), \dots$	3	-1	-1	1	0	-3	1	1	-1	0
$A_1^-$ $\left\{ \begin{matrix} xyz[x^4(y^2 - z^2) + \\ y^4(z^2 - x^2) + \\ z^4(x^2 - y^2)] \end{matrix} \right\}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
$A_2^-$ $xyz$	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1
$E^-$ $xyz(x^2 - y^2), \dots$	2	2	0	0	-1	-2	-2	0	0	1
$T_1^+$ $xy(x^2 - y^2), \dots$	3	-1	1	-1	0	3	-1	1	-1	0
$T_2^+$ $xy, yz, zx$	3	-1	-1	1	0	3	-1	-1	1	0

в) Как будут выглядеть эти колебания?

2. Выведите таблицу характеров группы  $D_{3d}$ .

**Указание:** Воспользуйтесь группой  $D_3$ .

3. Напишите валентные орбитали для атомов водорода (H) и азота (N) молекулы  $\text{NH}_3$ .

4. Пользуясь проекционными операторами выпишите молекулярные орбитали как линейную комбинацию атомных для циклической молекулы  $C_4H_4$ .

**Указание:** Очень схоже с примером из лекции.

5. Задачи 7, 8 из листочка 1.

6. Сколько всего кристаллографических (т.е. которые могут отвечать симметрии узлов трёхмерной решётки) точечных групп?

7\*. Известно, что для комплекса металла с четырьмя электронами нет неспаренных, т.е. отдельно расположенных на орбитали, электронов, но энергетических уровней всего два. При этом его симметрия не октаэдрическая. Какая она может быть?

**Указание:** рассмотрите группу симметрий тетраэдра.