

Besprechung am 20.01.2017

## Übungsblatt 10

### 1) Molekülorbitale von Ethan

Mit Hilfe der Symmetrieanalyse können Aussagen darüber getroffen werden, welche Atomorbitale (AOs) zu verschiedenen Molekülorbitalen und damit zu bestimmten Bindungen in einem Molekül beitragen können. Betrachten Sie gestaffeltes Ethan.

- Bestimmen Sie die Punktgruppe von gestaffeltem  $C_2H_6$ .
- Betrachten Sie zunächst die  $1s$ -Orbitale der vier Wasserstoff-Atome, welche eine gemeinsame Basis bilden sollen. Leiten Sie mit Hilfe der passenden Charaktertafel eine reduzierbare Darstellung  $\Gamma_{H, ges}$  der Wasserstoff-AOs her, welche eine Summe aus irreduziblen Darstellungen bildet.
- Betrachten Sie nun die  $2s$ - und  $2p$ -Orbitale der beiden (zentralen) Kohlenstoff-Atome als eine zweite gemeinsame Basis und leiten Sie eine reduzierbare Darstellung  $\Gamma_{C, ges}$  der AOs von Kohlenstoff her. Klassifizieren Sie, welche irreduziblen Darstellungen von  $\Gamma_{C, ges}$  an den  $\sigma$ -Bindungen mit den H-Atomen beteiligt sind und welche zur Bindung der C-Atome untereinander beitragen.

### 2) SALC: Molekülorbitale von $XeF_4$

Betrachten Sie die SALC  $p_1 = p_A + p_B + p_C + p_D$  der (im Uhrzeigersinn nummerierten) Fluor  $2p_z$ -Orbitale in dem quadratisch planaren Molekül  $XeF_4$ . Bestimmen Sie unter Verwendung der reduzierten Symmetrie  $D_4$  (anstatt der korrekten Punktgruppe; als Vereinfachung) welche  $s$ -,  $p$ - und  $d$ -Orbitale mit dem zentralen Xenonatom  $p_1$  überlappen können. Welche Orbitale überlappen mit  $p_2 = p_A - p_C$  bzw.  $p_4 = p_A - p_B + p_C - p_D$ ?

Besprechung am 20.01.2017

### 3) Symmetrie von f-Orbitalen

Bestimmen Sie für die f-Orbitale, welcher irreduziblen Darstellung diese jeweils in der Punktgruppe  $C_{2h}$  entsprechen.

