

Symmetrie und Struktur

Eine Einführung in die Gruppentheorie

Von Prof. Sidney F. A. Kettle
University of East Anglia, Norwich

Aus dem Englischen übersetzt von
Dr. Elke Buchholz, Aachen

Mit 167 Bildern und 48 Tabellen



B. G. Teubner Stuttgart 1994

Inhalt

1 Theorien im Widerstreit	1
1.1 Einleitung	1
1.2 Das Ammoniakmolekül	1
1.2.1 Das Atomorbital-Modell	1
1.2.2 Das Hybridorbital-Modell	1
1.2.3 Das Modell der Elektronenabstoßung	1
1.2.4 Das Elektronenspinabstoßungsmodell	1
1.2.5 Genaue Berechnungen	1
Literatur	2
2 Die Symmetrie des Wassermoleküls	2
2.1 Symmetrieeoperationen und Symmetrieelemente	2
2.2 Die Multiplikation von Symmetrieeoperationen	2
2.3 Multiplikationstafeln von Gruppen	3
2.4 Charaktertafeln	4
2.5 Zusammenfassung	4
3 Die Elektronenstruktur des Wassermoleküls	4
3.1 Die Orthonormalitätseigenschaften irreduzibler Darstellungen	4
3.2 Die Transformationseigenschaften von Atomorbitalen im Wassermolekül	4
3.3 Reduzible Darstellungen	5
3.4 Symmetrieangepaßte Kombinationen	5
3.5 Die bindenden Wechselwirkungen in H_2O und ihre Winkelabhängigkeit	5
3.6 Das Molekülorbital-Energieniveaudiagramm für H_2O	6
3.7 Der Vergleich mit dem Experiment	6
3.8 Das Walsh-Diagramm für dreiatomige Dihydride	6
3.9 Einfache Modelle für die Bindung in H_2O	6
3.10 Einordnung der einfachen Modelle gegenüber dem Symmetriekonzept	6
3.11 Zusammenfassung	6
Literatur	6

4 Die D_{2h}-Charaktertafel und die Elektronenstrukturen von Ethylen und Diboran	75
4.1 Die Symmetrie des Ethylenmoleküls	75
4.2 Die Charaktertafeln und Multiplikationstafeln der Gruppe D_{2h}	79
4.3 Direkte Produkte von Gruppen	81
4.4 Die Symmetrie der Kohlenstoff-Atomorbitale im Ethylen	84
4.5 Die Symmetrie der Wasserstoff-1s-Orbitale im Ethylen	92
4.6 Die Projektionsoperatormethode	94
4.7 Die Bindung im Ethylenmolekül	97
4.8 Die Bindung im Diboranmolekül	101
4.9 Vergleich mit anderen Modellen	106
4.10 Zusammenfassung	110
Literatur	111
5 Die Elektronenstruktur von Brompentafluorid, BrF_5	112
5.1 Die Symmetrioperationen der Gruppe C_{4v}	114
5.2 Probleme beim Arbeiten mit der Gruppe C_{4v}	116
5.3 Die Orthonormalitätsbeziehungen	119
5.4 Die Ableitung der C_{4v} -Charaktertafel mit Hilfe der Orthonormalitätstheoreme	122
5.5 Die Bindung im BrF_5 -Molekül	128
5.6 Zusammenfassung	139
Lösung von Aufgabe 5.12	139
Literatur	140
6 Die Elektronenstruktur des Ammoniakmoleküls	141
6.1 Die Symmetrie des Ammoniakmoleküls	141
6.2 Die Bindung im Ammoniakmolekül	147
6.3 Zusammenfassung	156
Literatur	156
7 Die Elektronenstruktur von Molekülen mit kubischer Symmetrie	157
7.1 Die Symmetrioperationen des Oktaeders	159
7.2 Die Bindung im SF_6 -Molekül	168
7.3 Oktaedrische Übergangsmetallkomplexe	183
7.4 Die Bindung in tetraedrischen Molekülen	193
7.5 Die Bestimmung der Punktgruppe eines Moleküls	196
7.6 Zusammenfassung	200
Antworten zu Aufgabe 7.26	201
Literatur	201

8 Gruppen und Untergruppen	202
8.1 Invariante und nicht-invariante Untergruppen	202
8.2 Korrelationstabellen	207
8.3 Zusammenfassung	213
9 Schwingungen von Molekülen	214
9.1 Normalschwingungen	214
9.2 Symmetriekoordinaten	216
9.3 Die Methode der ganzheitlichen Betrachtung eines Moleküls	223
9.4 Die Schwingungen bereits schwingender Moleküle	226
9.5 Zusammenfassung	229
10 Direkte Produkte	230
10.1 Die Symmetrie von Produktfunktionen	230
10.2 Konfigurationen und Zustände	234
10.3 Direkte Produkte und quantenmechanische Integrale	240
10.4 Spektroskopische Auswahlregeln	246
10.5 Zusammenfassung	253
Literatur	254
11 π-Elektronensysteme	255
11.1 Quadratisches Cyclobutadien und die Gruppe C_4	255
11.2 Optische Aktivität	259
11.3 Das Arbeiten mit komplexen Charakteren	260
11.4 Die π -Orbitale des Cyclobutadiens	261
11.5 Die Energie der π -Orbitale von Cyclobutadien in der Hückelschen Näherung	264
11.6 Symmetrie und chemische Reaktionen	270
11.7 Zusammenfassung	275
Anhang 1 Gruppen und Klassen: Definitionen und Beispiele	276
A1.1 Gruppen	276
A1.2 Einige Beispiele für Gruppen	278
A1.3 Die Klassen einer Gruppe	281
A1.4 Klassenalgebra	286
Anhang 2 Die Matrizendarstellungen von Gruppen	289
A2.1 Matrizenalgebra und Symmetrioperationen	289
A2.2 Direkte Produkte	300
A2.3 Die Orthonormalitätsbeziehungen	307
A2.4 Die Reduktion reduzibler Darstellungen	319

Anhang 3 Die Charaktertafeln der wichtigeren Punktgruppen	326
A3.1 Die Ikosaeder-Gruppen	327
A3.2 Kubische Punktgruppen	329
A3.3 Die Gruppen D_{nh}	332
A3.4 Die Gruppen D_{nd}	338
A3.5 Die Gruppen D_n	345
A3.6 Die Gruppen C_{nv}	350
A3.7 Die Gruppen C_{nh}	353
A3.8 Die Gruppen C_n	355
A3.9 Die Gruppen S_n (n gerade) (einschließlich C_i)	358
A3.10 Die Gruppe C_s und die triviale Gruppe C_1	360
A3.11 Die unendlichen Drehgruppen (linearen Gruppen) $C_{\infty v}$ und $D_{\infty h}$	360
Anhang 4 Die Fluor-Gruppenorbitale mit p-Symmetrie in SF_6	363
Ligandengruppenorbitale komplexer Ionen	371
Literatur	379
Anhang 5 Die Gruppen $C_{\infty v}$ und $D_{\infty h}$	380
Literatur	385
Weiterführende Literatur	386
Sachverzeichnis	388