1. A mellékelt folyamatábra segítségével döntsük el a következő molekulákról, hogy melyik pontcsoportba tartoznak!

(a) $POCl_3$ – C_{3v}

(b) PF_5 – D_{3h}

(c) C_6H_6 – D_{6h}

(d) C_2H_6, nyitott állás – D_{3d}

2. Az NH_3 molekula a C_{3v} pontcsoportba tartozik. Vegyünk fel három, a N atomra helyezett, az N−H kötések irányába mutató egyforma hosszúságú vektort.

(a) Ábrázoljuk a pontcsoportot ezen a bázison, és határozzuk meg az ábrázolás karakterét. A mátrixreprezentáció ezen a bázison:

$$\underline{\underline{R}}(\hat{E}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \underline{\underline{R}}(\hat{C}_3) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \underline{\underline{R}}(\hat{C}_3^2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{R}}(\hat{\sigma}_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \underline{\underline{R}}(\hat{\sigma}_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \underline{\underline{R}}(\hat{\sigma}_3) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ezért $\chi_\Gamma(\hat{E}) = 3, \chi_\Gamma(\hat{C}_3) = 0, \chi_\Gamma(\hat{C}_3^2) = 0, \chi_\Gamma(\hat{\sigma_1}) = 1, \chi_\Gamma(\hat{\sigma_2}) = 1, \chi_\Gamma(\hat{\sigma_3}) = 1.$

(b) Redukálható-e az ábrázolás? Ha igen, bontsuk fel irrepek összegére! Igen, redukálható. Pl. onnan látszik, hogy nincs 3 dimenziós irrep. Az i-edik irrep együtthatója a direkt összegben az

$$n_i = \frac{1}{|G|} \sum_{\hat{R} \in G} \chi_i^*(\hat{R}) \chi_\Gamma(\hat{R})$$

képlettel számítható, ahol χ_i az i-edik irrep. karaktere. Innen $n_{A_1} = 1$ (most $|G| = 6$), $n_{A_2} = 0$ és $n_E = 1$, azaz $\Gamma = A_1 \oplus E$.

(c) Határozzuk meg az irreducíbilis reprezentációk szerint transzformálódó bázisvektorokat! Az i-edik irrephez tartozó $\hat{P}_i = \frac{1}{|G|} \sum_{\hat{R} \in G} \chi_i(\hat{R}) \hat{R}$ projekciós operátorral hatva a bázisvektorokra, minden i-re annyi lineárisan független vektort kapunk, amennyi az adott irrep. dimenziója, ezek lesznek a megfelelő vektorok.

$$w = \hat{P}_{A_1} v_1 = \frac{1}{6}(\hat{E}+\hat{C}_3+\hat{C}_3^2+\hat{\sigma}_1+\hat{\sigma}_2+\hat{\sigma}_3)v_1 = \frac{1}{6}(v_1+v_2+v_3+v_1+v_3+v_2) = \frac{1}{3}(v_1+v_2+v_3) = \hat{P}_{A_1} v_2 = \hat{P}_{A_1} v_3$$

$$u_1 = \hat{P}_E v_1 = \frac{1}{6}(2\hat{E} - \hat{C}_3 - \hat{C}_3^2)v_1 = \frac{1}{6}(2v_1 + -v_2 - v_3)$$

$$u_2 = \hat{P}_E v_2 = \frac{1}{6}(2\hat{E} - \hat{C}_3 - \hat{C}_3^2)v_2 = \frac{1}{6}(2v_2 + -v_3 - v_1)$$

$$u_3 = \hat{P}_E v_3 = \frac{1}{6}(2\hat{E} - \hat{C}_3 - \hat{C}_3^2)v_3 = \frac{1}{6}(2v_3 + -v_1 - v_2) = -(u_1 + u_2)$$

3. **Határozzuk meg a propadién pontcsoportját!** D_{2d}.

   (a) **Készítsük el ezen csoport ábrázolását a $C-H$ kötésekre helyezett, a hidrogén atomok felé mutató, egyforma hosszú vektorok bázisán.** Legyen v_1 és v_2 egyazon C-atomon, hasonlóan v_3 és v_4 a másikon. $\hat{C}_2 v_1 = v_2$, $\hat{C}_2 v_2 = v_1$, $\hat{C}_2 v_3 = v_4$ és $\hat{C}_2 v_4 = v_3$. Az egyik $\hat{C}_2'$ eredménye v_2-v_3 csere és v_1-v_4 csere, a másik ilyen forgatás v_1-v_3 és v_2-v_4 cserét eredményez. Az egyik $\hat{\sigma}_d$ v_1-et és v_2-t helyben hagyja és v_3-at v_4-gyel cserél, a másiknál tükrözésnél v_3, v_4 helyben marad, és v_1-v_2 csere történik. Az egyik $\hat{S}_4$-nél $v_2' = v_3, v_3' = v_1, v_1' = v_4, v_4' = v_2$, a másiknál $v_2' = v_4, v_4' = v_1, v_1' = v_3, v_3' = v_2$.

   Ezért $\chi_\Gamma(\hat{E}) = 4$, $\chi_\Gamma(\hat{S}_4) = 0 = \chi_\Gamma(\hat{C}_2) = \chi_\Gamma(\hat{C}_2')$, $\chi_\Gamma(\hat{\sigma}_d) = 2$.

   (b) **Redukáljuk ezt az ábrázolást a karaktertábla segítségével.**

   Az ismert formula alapján $n_{A_1} = 1$, $n_{B_2} = 1$, $n_E = 1$, azaz $\Gamma = A_1 \oplus B_2 \oplus E$.

   (c) **Keressük meg az irreducíbilis reprezentációk szerint transzformálódó bázisvektorokat.**

   $\hat{P}_{A_1} v_1 = \frac{1}{8}(v_1 + v_4 + v_3 + v_2 + v_4 + v_3 + v_1 + v_2) = \frac{1}{4}(v_1 + v_2 + v_3 + v_4) = \hat{P}_{A_1} v_2 = \hat{P}_{A_1} v_3 = \hat{P}_{A_1} v_4$, ezt a vektort már tényleg minden transzformáció helyben hagyja.

   $\hat{P}_{B_2} v_1 = \frac{1}{8}(v_1 - v_4 - v_3 + v_2 - v_4 - v_3 + v_1 + v_2) = \frac{1}{4}(v_1 + v_2 - v_3 - v_4) = \hat{P}_{B_2} v_2 = -\hat{P}_{B_2} v_3 = -\hat{P}_{B_2} v_4$, ezt a vektort $\hat{E}, \hat{C}_2$ és a két $\hat{\sigma}_d$ helyben hagyja, a többi szimmetriaművelet pedig az ellentettjébe viszi. (V.ö. karaktertábla B_2 sora.)

   $\hat{P}_E v_1 = \frac{1}{8}(2v_1 + 0 + 0 - 2v_2 + 0 + 0 + 0 + 0) = \frac{1}{4}(v_1 - v_2)$

   $\hat{P}_E v_2 = \frac{1}{8}(2v_2 + 0 + 0 - 2v_1 + 0 + 0 + 0 + 0) = \frac{1}{4}(v_2 - v_1) = -\hat{P}_E v_1$

   $\hat{P}_E v_3 = \frac{1}{8}(2v_3 + 0 + 0 - 2v_4 + 0 + 0 + 0 + 0) = \frac{1}{4}(v_3 - v_4)$

   $\hat{P}_E v_4 = \frac{1}{8}(2v_4 + 0 + 0 - 2v_3 + 0 + 0 + 0 + 0) = \frac{1}{4}(v_4 - v_3) = -\hat{P}_E v_3$,

   tehát összesen 2 lineárisan független vektort kaptunk.

4. **Vizsgáljuk a *transz*-$1,2$-diklóretén pontcsoportját.** A csoport C_{2h}.

   (a) **Vegyünk fel minden atomon egy-egy darab x, y és z irányú egységvektort! Készítsük el a pontcsoport ábrázolását ezen a bázison (ún. koordinátareprezentáció)! Határozzuk meg az ábrázolás karakterét.** 18 dimenziós ábrázolás, $\chi_\Gamma(\hat{E}) = 18, \chi_\Gamma(\hat{C}_2) = 0, \chi_\Gamma(\hat{i}) = 0, \chi_\Gamma(\hat{\sigma}_h) = 6$.

   (b) **Redukáljuk az ábrázolást a megfelelő karaktertábla segítségével.** $n_{A_g} = 6, n_{B_g} = 3, n_{A_u} = 3, n_{B_u} = 6$.

   (c) **Keressük meg a transzlációs és rotációs szabadsági fokok irrepjeit!** x irányú transzláció: 1 dimenziós ábrázolás, egy darab x irányú vektorral. $\chi_x(\hat{E}) = 1, \chi_x(\hat{C}_2) = -1, \chi_x(\hat{i}) = -1, \chi_x(\hat{\sigma}_h) = 1$, azaz az x irányú transzláció B_u szimmetriájú. Hasonlóan $\chi_y(\hat{E}) = 1, \chi_y(\hat{C}_2) = -1, \chi_y(\hat{i}) = -1, \chi_y(\hat{\sigma}_h) = 1$, ez is B_u szimmetriájú. $\chi_z(\hat{E}) = 1, \chi_z(\hat{C}_2) = 1, \chi_z(\hat{i}) = -1, \chi_z(\hat{\sigma}_h) = -1$, ez A_u szimmetriájú. Ezért $\Gamma_{tr} = 2B_u \oplus A_u$.

   R_z szimmetrája A_g lesz, R_x, R_y-t a tükrözés és a forgatás is megfordítja, az inverzió nem: B_g. Azaz $\Gamma_{rot} = 2B_g \oplus A_g$.

   $\Gamma = \Gamma_{tr} + \Gamma_{rot} + \Gamma_{vibr}$ alapján $\Gamma_{vibr} = 5A_g \oplus B_g \oplus 2A_u \oplus 4B_u$.

5. Az ortogonalitási relációk felhasználásával egészítsük ki a következő karaktertáblát. Adjuk meg a csoport rendjét és a konjugáltosztályok elemeinek számát is! Az első sor kell hogy legyen a totálszimmetrikus reprezentáció, azaz csupa 1-es. Az első oszlopból így $|G| = 1+1+4+9+9 = 24$. Az oszlopok ortogonalitásából kijönnek az első, a második és a negyedik oszlop még hiányzó elemei. Azt is tudjuk, hogy az oszlopok saját magukkal vett szorzata $|G|/n_c$-t ad, ahol n_c az adott oszlopnak megfelelő osztály elemszáma. Innen $n_1 = 1$, $n_2 = 3$, $n_3 = 8$, $n_4 = 6$, és mivel $\sum_c n_c = |G|$, így $n_5 = 6$. Most már a sorok ortogonalitását is használhatjuk, hiszen ismerjük az összes konjugáltosztály elemszámát. Ez alapján megkaphatók az utolsó oszlop hiányzó elemei is.

1	**1**	**1**	**1**	**1**
1	**1**	1	**−1**	−1
2	2	−1	0	**0**
3	−1	0	1	**−1**
3	−1	0	−1	**1**

D_{2d}	E	$2S_4$	C_2	$2C_2'$	$2\sigma_d$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	−1	−1
B_1	1	−1	1	1	−1
B_2	1	−1	1	−1	1
E	2	0	−2	0	0

C_{3v}	E	$\{2C_3\}$	$\{3\sigma\}$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	−1
E	2	−1	0

C_{2h}	E	C_2	i	σ_h
A_g	1	1	1	1
B_g	1	−1	1	−1
A_u	1	1	−1	−1
B_u	1	−1	−1	1