

Hinweise zur Klausur zur Theoretischen Chemie I
Molekülsymmetrie und Gruppentheorie, SS 2018
20. Juli 2018

- Klausur: Freitag 20.7.2018 von **11 Uhr** bis **13 Uhr** im Theoretikum (**INF 306**) **HS 2**
- Studentenausweis bitte mitbringen
- Es sind keine Hilfsmittel erlaubt außer einem Taschenrechner (nicht programmierbar) und dem Bestimmungsschema für Punktgruppen.
- Die Reduktionsformel kann man sich für 1 Punkt „erkaufen“.
- **Ausreduzieren:**

Wenn man direkt sieht in welche irreduziblen Darstellungen eine reduzierbare Darstellung zerfällt, gibt es 2 Möglichkeiten zur Lösung der Aufgabe:

Beispiel:

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
Γ^{red}	3	0	1

Es ist direkt ersichtlich, dass Γ^{red} in $A_1 \oplus E$ zerfällt.

1. Ausreduktion nur für die entsprechenden irreduziblen Darstellungen

$$a_{A_1} = \frac{1}{6} \cdot (3 + 0 + 3) = 1$$

$$a_E = \frac{1}{6} \cdot (6 + 0 + 0) = 1$$

2. Aufsummieren der irreduziblen Darstellungen zur reduzierbaren Darstellung

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
E	2	-1	0
Γ^{red}	3	0	1

- **Direkte Produkte:**

1. Bei „Quadraten“ von 1-dimensionalen irreduziblen Darstellungen kann mit Verweis auf die Vorlesung das Ergebnis direkt aufgeschrieben werden.
2. Bei Produkten zwischen verschiedenen irreduziblen Darstellungen soll das direkte Produkt (z.B. tabellarisch) ausgerechnet werden.

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0
$A_2 \otimes E$	2	-1	0

→ E

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
E	2	-1	0
E	2	-1	0
$E \otimes E$	4	1	0

Zerfällt zu: $A_1 \oplus A_2 \oplus E$

Die entstehende Darstellung muss u.U. ausreduziert werden:

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0
$E \otimes E$	4	1	0

- **Übergangsdipolmoment:**

Es muss nur gezeigt werden, dass sich mit einer der Komponenten des Dipoloperators die totalsymmetrische Darstellung ergibt.

Außerdem darf die Inversionssymmetrie bei den direkten Produkten ausgenutzt werden, wenn die entsprechende dazugehörige Regel angegeben wird.
