Übungsblatt 2 zur “Theoretischen Chemie I”
Molekülsymmetrie und Gruppentheorie

SS 2014 Prof. H. Köppel

Abgabetermin 05.05.2014 (11:00)

Aufgabe 1.
Die Menge der 2×2 Matrizen

$$\left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\}$$

bildet unter der Verknüpfung der Matrixmultiplikation eine Gruppe. Stellen Sie die allgemeine Multiplikationstafel auf (Elementbezeichnungen E, A, B, C). Gibt es Parallelen zur Aufgabe 2a von Blatt 1? (4P)

Aufgabe 2.
Gegeben sind die Matrizen M_i:

a)

$$M_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad M_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad M_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

b)

$$M_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, M_2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, M_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, M_4 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Bilden diese Matrizen bezüglich der Matrixmultiplikation eine Gruppe? Wenn ja, welche?

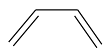
(4P)

Bitte wenden

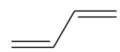
Aufgabe 3.

Bestimmen Sie alle Symmetrieelemente der folgenden Moleküle. Beachten Sie bei d) die absolute Lage der Phenylgruppen im Raum.

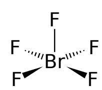
a)



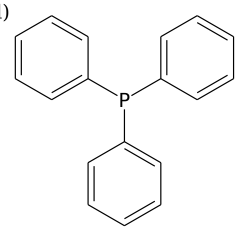
b)



c)



d)



(4P)

Aufgabe 4.

a) Zeigen Sie, dass in der (x,y)-Ebene für eine Spiegelung an einer beliebigen Ursprungsgeraden mit dem Steigungswinkel α folgende Transformationsmatrix gilt:

$$\mathbf{M}(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos 2\alpha & \sin 2\alpha \\ \sin 2\alpha & -\cos 2\alpha \end{pmatrix}$$

Studieren Sie dazu in Analogie zum Vorlesungsmitschrieb die Wirkung dieser Matrix auf einen beliebigen Ortsvektor $\overrightarrow{r} = \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix}$.

b) Zeigen Sie, dass für eine auf **a)** folgende zweite Spiegelung an einer weiteren Ursprungsgerade mit dem Steigungswinkel β folgende Relation gilt:

$$\mathbf{M}(\beta) \cdot \mathbf{M}(\alpha) = \mathbf{C}(\mathbf{2}(\beta - \alpha))$$

C steht in dieser Gleichung für die Rotationsmatrix. Was ist der Drehwinkel? (5P)

Aufgabe 5.

Zeigen Sie anhand der Transformationsmatrizen zu den entsprechenden Symmetrieoperationen (den sogenannten Darstellungsmatrizen), dass folgende Kommutatorrelationen gelten (wobei σ für eine Spiegelung an der (x,y)-Ebene steht und C_n^k für eine Rotation um die z-Achse):

a) $[C_n^k, \sigma] = 0$

b) $[i, C_n^k] = 0$

c) $[i, \sigma] = 0$ (3P)
