Übungsblatt 4 zur “Theoretischen Chemie 1”
Molekülsymmetrie und Gruppentheorie

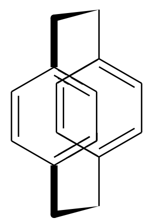
SS 2014 Prof. H. Köppel

Abgabetermin 19.05.2014 (11:00)

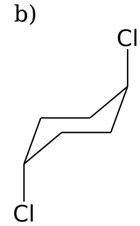
Aufgabe 1

Bestimmen Sie die Punktgruppen der unten abgebildeten Moleküle.

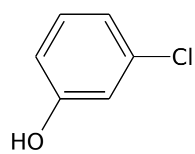
a)



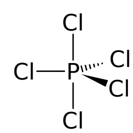
b)



c)



d)



(4P)

Aufgabe 2

Zeigen Sie, dass sich die Punktgruppe D_{3h} als direktes Produkt der Punktgruppen D_3 und C_s auffassen lässt. Verifizieren Sie dazu auch, dass die Symmetrie-Operationen von D_3 und C_s miteinander kommutieren. (4P)

Aufgabe 3

Zwei Gruppenelemente A und B sind zueinander konjugiert, wenn es ein Element X der Gruppe gibt mit:

$$X^{-1} \circ A \circ X = B$$

In der Vorlesung wurde graphisch gezeigt, dass in der C_{3v}-Punktgruppe die Symmetrielemente C_3 und C_3^2 miteinander konjugiert sind. Belegen Sie diesen Sachverhalt nun mithilfe der folgenden Transformationsmatrizen:

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{C_3} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad \mathbf{C_3^2} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$\sigma_\mathbf{v} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \sigma'_\mathbf{v} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad \sigma''_\mathbf{v} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Zeigen Sie, dass die Spiegelebenen σ_v und σ'_v ebenfalls zueinander konjugiert sind. Benutzen Sie dabei $X = C_3$ oder $X = C_3^2$ sowie die obigen Transformationsmatrizen. Führen Sie den Beweis sodann geometrisch analog zur Vorlesung. (8P)
