

Übungsblatt 5 zur "Theoretischen Chemie 1"

Molekülsymmetrie und Gruppentheorie

SS 2014 Prof. H. Köppel

Abgabetermin 26.05.2014 (11:00)

Aufgabe 1

- a) Zeigen Sie, dass die Matrizen von Blatt 1, Aufgabe 4 und von Blatt 2, Aufgabe 1 die Transformationsmatrizen des Ortsvektors für die Punktgruppen C_3 bzw. C_4 darstellen.
- b) Für welche Punktgruppe stellen die Matrizen von Blatt 2, Aufgabe 2b die analogen Transformationsmatrizen (d.h. Darstellungsmatrizen Γ) dar? Begründen Sie die Antwort und weisen Sie nach, dass die Verknüpfungseigenschaft $\Gamma(Q \cdot R) = \Gamma(Q) \cdot \Gamma(R)$ für alle Symmetrieoperationen Q, R der Punktgruppe erfüllt ist.
- c) Machen Sie sich klar, dass aus der genannten Verknüpfungseigenschaft folgt $\Gamma(E) = 1$ und $\Gamma(R^{-1}) = \Gamma(R)^{-1}$. (8P)
-

Aufgabe 2

Die Darstellungsmatrizen der Elemente einer Gruppe werden praktischerweise soweit wie möglich in eine Blockstruktur überführt. Zeigen Sie, dass für Matrizen folgende Aussage zutrifft: Multipliziert man zwei Matrizen mit derselben Blockstruktur, so erhält man eine Matrix, die die gleiche Blockstruktur wie die Ausgangsmatrizen besitzt. In der Produktmatrix stehen in den einzelnen Blöcken jeweils nur die Elemente, die in den entsprechenden Blöcken der Ausgangsmatrizen auftreten. Die einzelnen Blöcke vermischen sich also nicht beim Multiplizieren.

Bilden Sie hierzu das Produkt der Matrizen **A** und **B**.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & 0 \\ b_{21} & b_{22} & 0 \\ 0 & 0 & b_{33} \end{pmatrix}$$

(3P)

Aufgabe 3

Zeigen Sie die Invarianz der Spur eines Produktes von drei Matrizen unter zyklischer Vertauschung. Geben Sie hierzu die Spur von $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{C}$ und $\mathbf{C} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ an. Beachten Sie, dass Summationsindizes umbenannt werden dürfen. Welche Bedeutung hat dies für die Spur der Darstellungsmatrizen von konjugierten Symmetrieelementen? (4P)
