Übungsblatt 6 zur "Theoretischen Chemie 1"
Molekülsymmetrie und Gruppentheorie

SS 2014 Prof. H. Köppel

Abgabetermin 02.06.2014 (11:00)

Aufgabe 1

Verifizieren Sie anhand der Charaktertafeln der Punktgruppen C_{2v} und C_{3v}, dass die Spalten zueinander orthogonal sind und außerdem gemäß folgender Formel "normiert" sind:

$$\sum_i \chi_\mu^{(i)} \chi_\nu^{(i)*} = \frac{h}{g_\mu} \delta_{\mu\nu}$$

Dabei bezeichnet der Summationsindex die i-te irreduzible Darstellung und g_μ die Anzahl der Elemente der μ-ten Klasse. (4P)

Aufgabe 2

Zerlegen Sie die folgenden reduziblen Darstellungen in die entsprechenden irreduziblen Anteile in den angegebenen Punktgruppen:

a) $C_{2v} : \Gamma_{red} = (2, 0, 0, 2)$

b) $C_{2v} : \Gamma_{red} = (3, -1, 1, 1)$

c) $C_{4v} : \Gamma_{red} = (4, 0, 0, 0, -2)$

Mit (...,...,...) werden die Charaktere der reduziblen Darstellung für jede Klasse bezeichnet. Beachten Sie wieviele Symmetrieoperationen zu einer Klasse gehören. Benutzen Sie bei dieser Aufgabe die Formel zu Punkt 7 vom Beiblatt zu Kap. II.2: Charaktere und Charaktertafeln:

$$n_j = \frac{1}{h} \sum_R \chi^j(R)^* \chi(R)$$

Weiterhin benötigen Sie folgende Charaktertafeln der entsprechenden Punktgruppen:

C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1

C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
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

(6P)

Bitte wenden

Aufgabe 3

Untersuchen Sie das Transformationsverhalten des Drehimpulsvektors $\vec{L}$ (klass. Mechanik) bzw. von $\hat{L}$ (Quantenmechanik) unter den Symmetrieoperationen von C_{2v}. Geben Sie die entsprechenden irreduziblen Darstellungen an und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem des Ortsvektors.

$$L_x = (yp_z - zp_y), \qquad L_y = (zp_x - xp_z), \qquad L_z = (xp_y - yp_x)$$

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}), \qquad \hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}), \qquad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})$$

Machen Sie sich klar, dass die Komponenten des Impulsvektors bzw. des Impulsoperators genauso transformieren wie die entsprechenden Komponenten des Ortsvektors. (6P)

Aufgabe 4

Integrieren und zeichnen Sie die folgenden Funktionen im Intervall $[-\pi, \pi]$:

a) $x \sin x$

b) $x^2 \sin x$

c) $xe^{-\alpha x^2}$

Hätte man das Ergebnis aus **b)** und **c)** einfacher durch Symmetriebetrachtungen erhalten können. Wenn ja, erläutern Sie wie. (4P)
