Übungsblatt 8 zur “Theoretischen Chemie 1”
Molekülsymmetrie und Gruppentheorie

SS 2014 Prof. H. Köppel

Abgabetermin 16.06.2014 (11:00)

Aufgabe 1

a) Zeigen Sie, dass der Abstand eines Punktes zum Ursprung bei der Anwendung einer Symmetrieoperation invariant bleibt. Vergleichen Sie hierzu den Abstand eines Punktes P mit den Koordinaten x, y, z zum Ursprung mit dem Abstand des Punktes zum Ursprung nach einer Drehung um einen beliebigen Winkel α.
Bestimmen Sie desweiteren den Abstand des Punktes zum Ursprung nach einer Spiegelung an einer Ebene. Wenden Sie hierzu die Ihnen bekannten Matrizen für eine Drehung um einen Winkel α und für eine Spiegelung an einer Ebene, die den Ursprung erhält, an.
Verdeutlichen Sie, dass es sich bei den Darstellungsmatrizen von Symmetrieoperationen immer um orthogonale Matrizen handelt. (4P)

b) Zeigen Sie mit Hilfe von Aufgabenteil a), dass sich die Wellenfunktion

$$\Psi(x, y, z) = \exp(-(x^2 + y^2 + z^2))$$

bezüglich der Symmetrieoperationen einer beliebigen Punktgruppe stets wie die totalsymmetrische Darstellung der entsprechenden Punktgruppe transformiert. (2P)

c) Zeigen Sie analog zu Aufgabenteil a), dass der Abstand zweier Punkte invariant unter beliebigen Symmetrieoperationen ist. (2P)

Aufgabe 2

Bestimmen Sie in Analogie zur Vorlesung die Darstellungsmatrix der Kugelflächenfunktionen:

$$Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\vartheta e^{i\varphi}$$

$$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\vartheta e^{-i\varphi}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\vartheta$$

Bitte wenden

(“komplexe p-Funktionen”) für eine Drehung um die z-Achse um den Winkel α.
Hierfür gilt für die transformierte Funktion

$$\tilde{Y}_{1m}(\vartheta, \varphi) = \hat{O}_R Y_{1m}(\vartheta, \varphi) = Y_{1m}(\vartheta, \varphi - \alpha)$$

Geben Sie die Spur der Darstellungsmatrix an und vergleichen Sie mit derjenigen aus der Vorlesung für reelle p-Funktionen. (8P)
