

# Übungsblatt 11 zur “Theoretischen Chemie 1” Molekülsymmetrie und Gruppentheorie

SS 2014 Prof. H. Köppel  
Abgabetermin 07.07.2014 (11:00)

---

## Aufgabe 1

Die drei SALCs der 3 s-Funktionen von Blatt 10, Aufgabe 1 transformieren sich wie die irreduziblen Darstellungen  $A'_1$  und  $E'$  der Punktgruppe  $D_{3h}$ .

- a) Bei Abknicken an einem der Zentren reduziert sich die Punktgruppe von  $D_{3h}$  nach  $C_{2v}$ . Welches Zentrum müssen Sie wählen, damit die  $s_{E_x}$ - und  $s_{E_y}$ -Linearkombinationen auch beim Abknicken symmetriegerecht transformieren (Basis von irreduzibler Darstellung bilden)? Gemäß welcher irreduziblen Darstellung von  $C_{2v}$  transformieren sie sich? (2P)
- b) Zerlegen Sie die irreduzible Darstellung  $E'$  von  $D_{3h}$  in die irreduziblen Bestandteile von  $C_{2v}$  und vergleichen Sie mit dem Ergebnis von a). (2P)
- 

## Aufgabe 2

In welche irreduziblen Darstellungen der entsprechenden Punktgruppen können die folgenden direkten Produktdarstellungen zerlegt werden:

- a)  $A_1 \otimes A_2$  für  $D_3$   
b)  $A_2 \otimes E$  für  $D_3$   
c)  $A_{1u} \otimes E_u$  für  $D_{4h}$

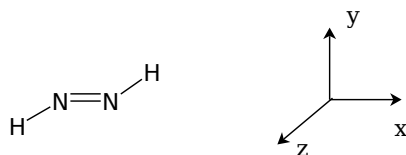
Dabei ergibt sich der Charakter  $\chi^{\mu \otimes \nu}(R)$  der Produktdarstellung  $\Gamma^\mu \otimes \Gamma^\nu$  zur Symmetriemultiplikation  $R$  durch  $\chi^{\mu \otimes \nu}(R) = \chi^\mu(R)\chi^\nu(R)$ . (Hier sind  $\chi^\mu(R)$  bzw.  $\chi^\nu(R)$  die Charaktere zu den Darstellungen  $\Gamma^\mu$  bzw.  $\Gamma^\nu$ .) (3P)

**Hinweis:** Für nichtentartete irreduzible Darstellungen wurde der Ausdruck für  $\chi^{\mu \otimes \nu}(R)$  in der Vorlesung am 2.7. gezeigt, für entartete irreduzible Darstellungen folgt dies am 9.7.

---

## Aufgabe 3

Bestimmen Sie analog zur Vorgehensweise bei  $\text{NH}_3$  die Symmetrie der Molekülorbitale des trans-Diimins ( $C_{2h}$ -Symmetrie).



Untersuchen Sie hierzu das Transformationsverhalten der 1s-Orbitale der Wasserstoffatome sowie der 2s-, 2p<sub>x</sub>-, 2p<sub>y</sub>- und 2p<sub>z</sub>-Orbitale der Stickstoffatome unter den Symmetriebedingungen von C<sub>2h</sub>. Gemäß Vorlesung definiert die Gesamtheit dieser Atomorbitale das Transformationsverhalten der daraus konstruierbaren Molekülorbitale. (6P)

**Hinweis:** Das planare Molekül liegt in der xy-Ebene, die N=N Bindung in der x-Achse.

#### Aufgabe 4

In der Vorlesung wurde das Transformationsverhalten (Charaktere) der 5 d-Funktionen bei einigen relevanten Drehspiegelungen bestimmt. Benutzen Sie dieses Ergebnis sowie die weiteren von Blatt 10, Aufgabe 2 und zerlegen Sie diese Darstellung in die irreduziblen Bestandteile der Punktgruppen (4P)

a) T<sub>d</sub>

b) O<sub>h</sub>

Die Charaktertafeln der Punktgruppen O<sub>h</sub> und T<sub>d</sub> finden Sie auf dem Beiblatt zu Kapitel III.2.

#### Benötigte Charaktertafeln

D <sub>4h</sub>	E	2C <sub>4</sub>	C <sub>2</sub>	2C' <sub>2</sub>	2C'' <sub>2</sub>	i	2S <sub>4</sub>	σ <sub>h</sub>	2σ <sub>v</sub>	2σ <sub>v</sub>
A <sub>1g</sub>	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A <sub>2g</sub>	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1
B <sub>1g</sub>	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1
B <sub>2g</sub>	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1
E <sub>g</sub>	2	0	-2	0	0	2	0	-2	0	0
A <sub>1u</sub>	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
A <sub>2u</sub>	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
B <sub>1u</sub>	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1
B <sub>2u</sub>	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
E <sub>u</sub>	2	0	-2	0	0	-2	0	2	0	0

C <sub>2v</sub>	E	C <sub>2</sub>	σ <sub>v</sub>	σ' <sub>v</sub>
A <sub>1</sub>	1	1	1	1
A <sub>2</sub>	1	1	-1	-1
B <sub>1</sub>	1	-1	1	-1
B <sub>2</sub>	1	-1	-1	1

C <sub>2h</sub>	E	C <sub>2</sub>	i	σ <sub>h</sub>
A <sub>g</sub>	1	1	1	1
B <sub>g</sub>	1	-1	1	-1
A <sub>u</sub>	1	1	-1	-1
B <sub>u</sub>	1	-1	-1	1

D <sub>3</sub>	E	2C <sub>3</sub>	3C <sub>2</sub>
A <sub>1</sub>	1	1	1
A <sub>2</sub>	1	1	-1
E	2	-1	0