Prof. Dr. Axel Groß
Institut für Theoretische Chemie

# Theoretische Chemie – Quantenmechanik II

**Übungsblatt Nr. 2, 06.05.2013**

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
`http://www.uni-ulm.de/theochem/`

Die Aufgaben werden besprochen in der Übung am 23.05.2013

**Aufgabe 2:** Sauerstofforbitale des Wassermoleküls

In der Abbildung ist das Wassermolekül und seine Symmetrieoperationen gezeigt, die zur Symmetriegruppe $C_{2v}$ gehren. Die zugehörige Multiplikations- und Charakterentafel ist unten in der Tabelle aufgeführt. Als Basis für eine Darstellung $D^{\mathrm{O}}$ der Symmetriegruppe seien die $2s$ und $2p$ Orbitale $\left|2s^{\mathrm{O}}\right\rangle$, $\left|2p_x^{\mathrm{O}}\right\rangle$, $\left|2p_y^{\mathrm{O}}\right\rangle$ und $\left|2p_z^{\mathrm{O}}\right\rangle$ des Sauerstoffatoms gewählt.

a) Schreiben Sie die Darstellung $D^{\mathrm{O}}$ explizit hin und bestimmen die darin enthaltenen irreduziblen Darstellungen.

b) Bestimmen Sie die Basen der irreduziblen Darstellungen mit Hilfe der Projektionsoperatoren.

Tabelle 1: Multiplikations- und Charaktertafel der Symmetriegruppe $C_{2v}$.

| $C_{2v}$ | $E$ | $c_2$ | $\sigma_v$ | $\sigma_v'$ |
|---|---|---|---|---|
| $E$ | $E$ | $c_2$ | $\sigma_v$ | $\sigma_v'$ |
| $c_2$ | $c_2$ | $E$ | $\sigma_v'$ | $\sigma_v$ |
| $\sigma_v$ | $\sigma_v$ | $\sigma_v'$ | $E$ | $c_2$ |
| $\sigma_v'$ | $\sigma_v'$ | $\sigma_v$ | $c_2$ | $E$ |

| | $E$ | $c_2$ | $\sigma_v$ | $\sigma_v'$ |
|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | 1 | 1 | 1 | 1 |
| $A_2$ | 1 | 1 | -1 | -1 |
| $B_1$ | 1 | -1 | 1 | -1 |
| $B_2$ | 1 | -1 | -1 | 1 |