

## Theoretische Chemie – Quantenmechanik II

### Übungsblatt Nr. 3, 19.05.2014

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in der Übung am 02.06.2013

#### Aufgabe 4: Sauerstofforbitale des Wassermoleküls

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

- Schreiben Sie die Darstellung  $D^O$  explizit hin und bestimmen die darin enthaltenen irreduziblen Darstellungen.
- Bestimmen Sie die Basen der irreduziblen Darstellungen mit Hilfe der Projektionsoperatoren.

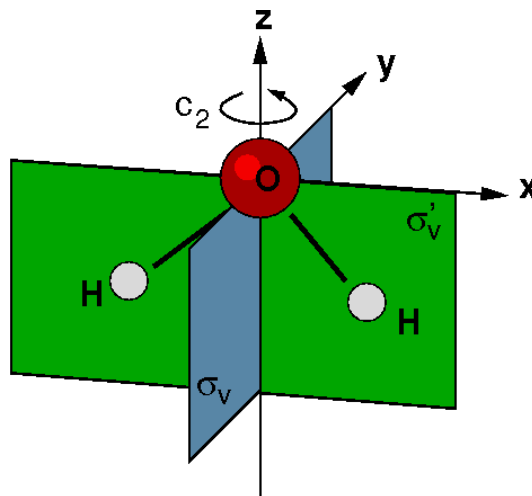


Abbildung 1: Das  $H_2O$  Molekül und seine Symmetrieeoperationen.

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

$C_{2v}$	$E$	$c_2$	$\sigma_v$	$\sigma'_v$		$E$	$c_2$	$\sigma_v$	$\sigma'_v$
$E$	$E$	$c_2$	$\sigma_v$	$\sigma'_v$	$A_1$	1	1	1	1
$c_2$	$c_2$	$E$	$\sigma'_v$	$\sigma_v$	$A_2$	1	1	-1	-1
$\sigma_v$	$\sigma_v$	$\sigma'_v$	$E$	$c_2$	$B_1$	1	-1	1	-1
$\sigma'_v$	$\sigma'_v$	$\sigma_v$	$c_2$	$E$	$B_2$	1	-1	-1	1