

Theoretische Chemie – Quantenmechanik II

Übungsblatt Nr. 1, 09.05.2016

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Aufgaben werden besprochen im Seminar am 02.06.2016, N25/2103

Aufgabe 1: Sauerstofforbitale des Wassermoleküls

In der Abbildung ist das Wassermolekül und seine Symmetrieoperationen 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.

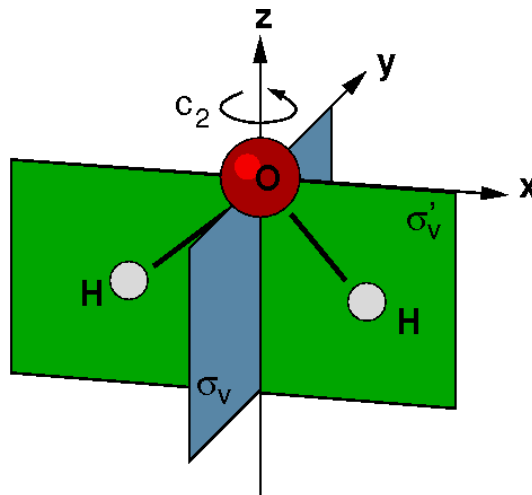


Abbildung 1: Das H_2O Molekül und seine Symmetrieoperationen.

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

C_{2v}	E	c_2	σ_v	σ'_v		E	c_2	σ_v	σ'_v
E	E	c_2	σ_v	σ'_v	A_1	1	1	1	1
c_2	c_2	E	σ'_v	σ_v	A_2	1	1	-1	-1
σ_v	σ_v	σ'_v	E	c_2	B_1	1	-1	1	-1
σ'_v	σ'_v	σ_v	c_2	E	B_2	1	-1	-1	1