Universität Ulm
Abteilung Theoretische Chemie

Prof. Dr. Axel Groß

Theoretische Chemie – Quantenmechanik II

Übungsblatt Nr. 4, 12.06.2008

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

Die Aufgaben werden besprochen in der Vorlesung am 19.06.2008

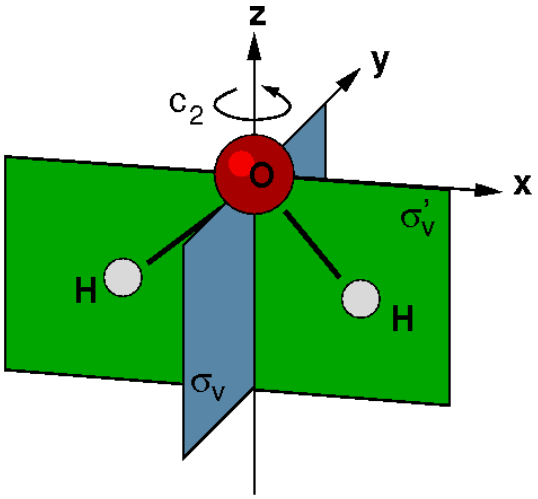

Abbildung 1: Das H_2O Molekül und seine Symmetrieoperationen.

Aufgabe 6: 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^{O} der Symmetriegruppe seien die $2s$ und $2p$ Orbitale $|2s^{\mathrm{O}}\rangle$, $|2p_x^{\mathrm{O}}\rangle$, $|2p_y^{\mathrm{O}}\rangle$ und $|2p_z^{\mathrm{O}}\rangle$ des Sauerstoffatoms gewählt.

a) Schreiben Sie die Darstellung D^{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	σ_v	σ_v'
E	E	c_2	σ_v	σ_v'
c_2	c_2	E	σ_v'	σ_v
σ_v	σ_v	σ_v'	E	c_2
σ_v'	σ_v'	σ_v	c_2	E

	E	c_2	σ_v	σ_v'
A_1	1	1	1	1
B_1	1	1	-1	-1
A_2	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1