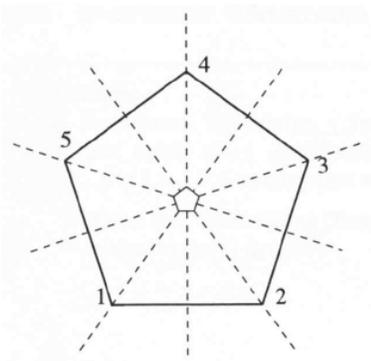


Aufgabenblatt 10

10.1 C_{5v}



Das gleichseitige Fünfeck besitzt die Symmetrie der Gruppe C_{5v} . Dieser Symmetrie sind 10 Gruppenelemente zugeordnet.

- Identifizieren Sie die Gruppenelemente.
- Welche Klassen hat die Gruppe und wieviele Elemente sind in jeder Klasse?
- Wieviele irreduzible Darstellungen gibt es?
- Suchen Sie sich die Charaktertafel aus der Literatur heraus.

10.2 Zweidimensionaler Ortsvektor in C_{5v}

Der Ortsvektor \vec{r} soll gemäß C_{5v} in einem zweidimensionalen kartesischen Koordinatensystem transformiert werden.

- Stellen Sie die 2×2 -Matrizen auf, die die Elemente von C_{5v} in \mathbb{R}^2 darstellen.
- Stellen Sie für diese Darstellung die Charaktertafel auf.
- Ist die gefundene Darstellung reduzibel oder irreduzibel?

10.3 LCAO mit Punktgruppensymmetrie

Die Konstruktion von Versuchszuständen aus atomaren Orbitalen wird *Linear Combination of Atomic Orbitals* (LCAO) genannt.

Ein fiktives Molekül aus fünf gleichen Atomen habe C_{5v} -Symmetrie. Für ein Atom sei die 1s-Wellenfunktion bekannt. Konstruieren Sie die symmetrieadaptierten Wellenfunktionen für das Molekülion (5 Rumpfe und ein Elektron) und zwar einmal mit der C_5 -Symmetrie und einmal mit der C_{5v} -Symmetrie. Überlegen Sie sich zuerst, wie die Operationen auf die 1s-Wellenfunktion wirkt. Erzeugen Sie sich einen invarianten Unterraum und legen Sie dann mit der *basis function generating machine* los.

10.4 Zusatzaufgabe: 3d-Orbitale im Ligandenfeld

Wenn Atome bzw. Ionen in einer chemischen Verbindung von anderen Ionen umgeben sind, kann die Symmetrie dieser Umgebung die atomaren Niveaus des zentralen Atoms/Ions beeinflussen. Diese Betrachtung ist störungstheoretisch zu verstehen, da das mehratomige System in voller Exaktheit ein korreliertes Vielteilchensystem darstellt und Ausdrücke wie „die atomaren Niveaus des zentralen Atoms/Ions“ eigentlich keinen Sinn mehr ergeben. Man schaut sich in störungstheoretischen Ansätzen der Atom- und Molekülphysik sowie in der Chemie zum Beispiel an, welche irreduziblen Darstellungen einer Punktgruppe aus den Eigenfunktionen zu bestimmten Drehimpulsquantenzahlen gebildet werden können.

- a. Machen Sie sich klar, dass aus den Kugelflächenfunktionen zu $l = 2$ die folgenden fünf reellen Funktionen gebildet werden können:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (3 \cos^2 \theta - 1) , \sqrt{6} \sin \theta \cos \theta \cos \phi , \sqrt{6} \sin \theta \cos \theta \sin \phi , \quad (1)$$

$$\sqrt{\frac{3}{2}} \sin^2 \theta \cos(2\phi) , \sqrt{\frac{3}{2}} \sin^2 \theta \sin(2\phi) . \quad (2)$$

- b. Untersuchen Sie, welche irreduziblen Darstellungen aus diesen Funktionen gebildet werden können, wenn die Symmetriegruppe D_4 mit der z -Achse als Drehachse ist.
- c. Viele chemische Umgebungen sind oktaedrisch, die Symmetrie wird dann durch die Gruppe O_h beschrieben. Es treten die beiden irreduziblen Darstellungen E_g und T_{2g} auf. Was bedeutet das? Wieviele Wellenfunktionen gehören zu jeder Darstellung, wenn E_g und T_{2g} die einzigen auftretenden irreduziblen Darstellungen sind?