

**Übungsblatt 4****Aufgabe 12: Symmetrie**

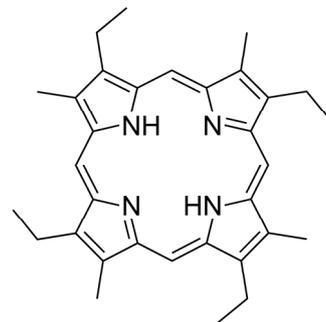
- (a) Erklären Sie den Unterschied zwischen Symmetrieelement und Symmetrieoperation.  
 (b) Was sind eigentliche und uneigentliche Symmetrieoperationen? Nennen Sie jeweils ein Beispiel.  
 (c) Bestimmen Sie sämtliche Symmetrieelemente folgender Moleküle:  $H_2$ ,  $H_2O$ ,  $NH_3$ ,  $CH_4$ ,  $C_6H_6$  (Benzol), Cyclohexan (Sessel),  $SF_6$ ,  $C_{60}$  (Fulleren). Geben Sie dabei auch an, wie häufig ein bestimmtes Symmetrieelement vorkommt. Welche Symmetrieelemente sind nicht mit dem Auftreten eines Dipolmoments vereinbar?

**Aufgabe 13: Gruppentheorie**

- (a) Zeigen Sie, dass die Menge der ganzen Zahlen  $p$  bezüglich der Addition als Verknüpfung eine unendliche Gruppe bildet.  
 (b) Überzeugen Sie sich von folgenden Isomorphismen:  $C_{2v} \cong D_2 \cong C_{2h}$ .  
 (c) Zeigen Sie, dass für Klassen konjugierter Elemente die folgenden Aussagen gültig sind:  
 i. Wenn  $a$  zu  $b$  konjugiert ist, dann ist auch  $b$  zu  $a$  konjugiert (Symmetrie).  
 ii. Wenn  $a$  zu  $b$  und  $b$  zu  $c$  konjugiert ist, dann ist auch  $a$  zu  $c$  konjugiert (Transitivität).  
 (d) Bei der Darstellung von Symmetrieoperationen durch quadratische  $n$ -reihige Matrizen entspricht dem Produkt der Symmetrieoperationen  $R_3 = R_1 R_2$  das Matrixprodukt  $\Gamma(R_3) = \Gamma(R_1) \Gamma(R_2)$ . Überprüfen Sie dies für die Darstellungsmatrizen der Punktgruppe  $C_{3v}$  in Glg. (4.17) und (4.18) in der Vorlesung.  
 (e) Zeigen Sie, dass zwei durch Ähnlichkeitstransformationen verknüpfte Matrizen die gleiche Spur (und damit den gleichen Charakter) haben.

**Aufgabe 14: Punktgruppen einfacher Moleküle**

Bestimmen Sie die Symmetriepunktgruppen folgender Moleküle:  $H_2$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $HCl$ ,  $H_2O$ ,  $SO_2$ ,  $C_6H_6$  (Benzol),  $C_6H_{12}$  (Cyclohexan, Sessel) und Etioporphyrin-I (Konformation wie in Abbildung). Wie ändert sich die Symmetrie des Porphyrins, wenn der entsprechende M(II)-Metalloporphyrin-komplex gebildet wird?

**Aufgabe 15: Symmetrie von Alkanen**

Welche Symmetrie haben  $CH_4$ ,  $CH_3X$ ,  $CH_2X_2$ ,  $CH_2XY$ ,  $CHXYZ$ , wenn  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$  einatomige Substituenten wie  $F$ ,  $Cl$ ,  $Br$  sind? Erweitern Sie den Vorrat an Ligandensorten um  $CH_3$ ,  $CCl_3$ ,  $C_2H_5$  usw. und diskutieren Sie die auftretenden Symmetrien.

**Aufgabe 16: Symmetrie von Cyclobutanderivaten**

Welche Symmetrien haben die abgebildeten Derivate des Cyclobutans, wenn  $X, Y$  einatomige Substituenten sind und Cyclobutan die Symmetrie  $D_{4h}$  hat?

