

Übungsblatt 4**Aufgabe 12: Symmetrie**

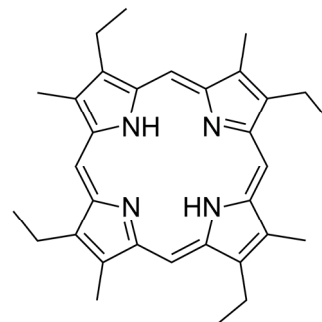
- (a) Erklären Sie den Unterschied zwischen Symmetrieelement und Symmetrieoperation.
 (b) Was sind eigentliche und uneigentliche Symmetrieoperationen? Nennen Sie jeweils ein Beispiel.
 (c) Bestimmen Sie sämtliche Symmetrieelemente folgender Moleküle: H_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , C_6H_6 (Benzol), Cyclohexan (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?

