Gruppentheorie

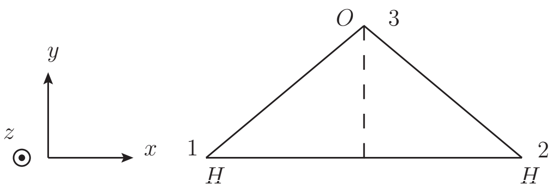
Frühlingssemester 2016

Übungsblatt 6
Besprechung Fr. 3.6

1. Berechnen Sie die Charaktertafel der Vierergruppe D_2 (die Symmetriegruppe eines Rechtecks). Nutzen Sie dabei die Darstellungen, welche auf D_2 von ihren Faktorgruppen induziert werden.

2. Sei eine Gruppe G mit Darstellung $U(G)$ auf einem Vektorraum V. Sei ein Operator $P^j_{\mu i}$ definiert als
$$P^j_{\mu i} = \frac{n_\mu}{n_G} \sum_{g \in G} D^{-1}_\mu(g)^j_i U(g),$$
wobei $D_\mu(g)$ eine irreduzible Matrixdarstellung von G ist. Beweisen Sie, dass für ein beliebiger Vektor $\mathbf{v} \in V$
$$U(g) P^j_{\mu i} \mathbf{v} = P^j_{\mu k} \mathbf{v} D_\mu(g)^k_i,$$
gilt. Über i, j und μ wird dabei nicht summiert. Für ein fixes j transformieren die Vektoren $\mathbf{w}_i = P^j_{\mu i}\mathbf{v}$, $i = 1, \ldots, n_\mu$, demnach gemäss der irreduziblen Darstellung D_μ.

3. In dieser Übung werden Vibrationsmoden des Wassermoleküls (H_2O) betrachtet. Die Gleichgewichtskonfiguration ist unten abgebildet:



   (a) Die Symmetriegruppe des Moleküls enthält nebst der Einheit eine zweizählige Rotation um die y-Achse durch den Sauerstoffatom (a), eine Spiegelung an der y-z-Ebene (b) sowie das Produkt der zwei Transformationen (ab). Sowohl (a) als auch (b) vertauschen die Wasserstoffatome.
   Zeigen Sie, dass diese Symmetriegruppe isomorph zu D_2 ist.

   (b) Die Auslenkung der Atome wird mit den Koordinaten (x_1, y_1, z_1) und (x_2, y_2, z_2) für die Wasserstoffatome und (x_3, y_3, z_3) für den Sauerstoffatom parametrisiert.

Die Wirkung von (a) ist dann:

$$\begin{aligned} a : (x_1, y_1, z_1) &\to (-x_2, y_2, -z_2) \\ (x_2, y_2, z_2) &\to (-x_1, y_1, -z_1) \\ (x_3, y_3, z_3) &\to (-x_3, y_3, -z_3). \end{aligned}$$

Berechnen Sie die Spur der zugehörigen 9-dimensionalen Darstellungsmatrix $D^9(a)$ (Sie müssen die volle Matrix nicht berechnen, sondern es reicht, die Diagonalelemente anzugeben). Verfahren Sie gleich um die Charaktere der restlichen Elemente der Gruppe in dieser Darstellung zu bestimmen.

(c) Die Charaktertafel von D_2 und somit der Symmetriegruppe des Moleküls ist (siehe Aufgabe 1):

	e	a	b	ab
1	1	1	1	1
2	1	1	-1	-1
3	1	-1	1	-1
4	1	-1	-1	1

Bestimmen Sie damit die Zerlegung von D^9 in irreduzible Darstellungen.

(d) Nicht alle irreduziblen Darstellungen in dieser Zerlegung entsprechen Vibrationsmoden vom Molekül. Es werden 3 uniforme Translationen in x-, y- und z-Richtung erwartet sowie 3 Rotationen. Es soll bestimmt werden, in welche irreduzible Darstellung diese transformieren und die entsprechenden irreduziblen aus der Zerlegung von D^9 entfernt werden. So lebt die Translation in x-Richtung im eindimensionalen Unterraum, der von der Verschiebung $x_1 = x_2 = x_3 = q_x$ aufgespannt wird (die restlichen Koordinaten sind null). Diese transformiert wie:

$$\begin{aligned} q_x &\xrightarrow{e} q_x \\ q_x &\xrightarrow{a} -q_x \\ q_x &\xrightarrow{b} -q_x \\ q_x &\xrightarrow{ab} q_x \end{aligned}$$

Der Vergleich mit der Charaktertafel führt zum Schluss, dass die Verschiebung in x-Richtung gemäss der Darstellung $\mu = 4$ transformiert. Mit den Rotationen kann gleich verfahren werden, zum Beispiel wird die infinitesimale Rotation um die y-Achse durch $z_1 = -z_2 = r_y$ parametrisiert.
Zeigen Sie dann, dass die Vibrationsmoden gemäss der reduzierten Zerlegung

$$D^9_{vib} = 2D_1 \oplus D_4$$

transformieren.