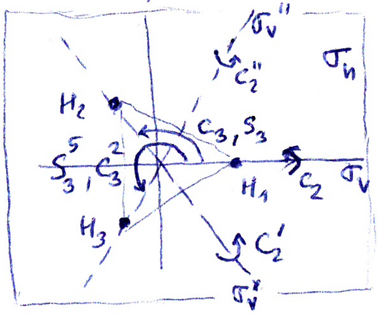
Tabulka charakterů grupy D_{3h} a její podgrupy C_{3v}

- jde o grupu symetrie rovnostranného trojúhelníku, který tvoří v rovnovážné poloze kationt H_3^+
- operace symetrie – celkem 12



podgrupa $C_{3v} = \{E, C_3, C_3^2, \sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$, kde $C_3^2 = C_3^{-1}$

levá třída $\sigma_h C_{3v} = \{\sigma_h, S_3, S_3^5, C_2, C_2', C_2''\}$, kde $S_3^5 = S_3^{-1}$

- dohromady tvoří grupu D_{3h}

- třídy sdružených prvků – vždy do jedné třídy patří operace symetrie, které lze mezi sebou převádět pomocí jiné operace symetrie z dané grupy

tedy

	třída	prvky	sdružení pomocí	
C_{3v}	E	$\{E\}$	—	
C_{3v}	$2C_3$	$\{C_3, C_3^2\}$	σ_v nebo C_2	← oboje mění směr otáčení
C_{3v}	$3\sigma_v$	$\{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$	C_3 a C_3^2	← otočení roviny zrcadlení
	σ_h	$\{\sigma_h\}$	—	
	$2S_3$	$\{S_3, S_3^5\}$	σ_v nebo C_2	← opět otočení směru
	$3C_2$	$\{C_2, C_2', C_2''\}$	C_3 a C_3^2	← otočení osy rotace

tyto nelze převést na sebe

- totéž bychom dostali pomocí multiplikativní tabulky nebo pomocí násobení matic 3×3 reprezent. operace symetrie v $\mathbb{R}^3$

- počty a dimenze ireducibilních repr.
  - C_{3v} má 3 třídy $\Rightarrow$ má i 3 IR $\Rightarrow \sum_{\mu=1}^{3} d_\mu^2 = 6 \Rightarrow \underline{1^2+1^2+2^2} = 6$ jediná možnost
  - D_{3h} má 6 tříd $\Rightarrow$ 6 IR $\Rightarrow \sum_{\mu=1}^{6} d_\mu^2 = 12 \Rightarrow 1^2+1^2+1^2+1^2+2^2+2^2 = 12$ opět jediná možnost

$\Rightarrow$ první sloupec tabulky charakterů (obsahuje dimenze) ($\chi(E) = \dim$ repr.)

a také vždy existuje jednorozměrná triviální (úplně symetrická) IR, $D(g) = (1)$ pro $\forall g \in G$

$\Rightarrow$ první řádek tabulky

D_{3h}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	σ_h	$2S_3$	$3C_2$
Γ^1	1	1	1	1	1	1

– **vektorová repr.** pro D_{3h} – zvolíme hlavní osu C_3 ve směru z

→ jde o reducibilní repr. – z-tová složka se transformuje nezávisle, x a y se mixují

– není třeba konstruovat matice, stačí charaktery

vektorová repr. →

D_{3h}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	σ_h	$2S_3$	$3C_2$
Γ^v	3	0	+1	1	−2	−1
Γ^z	1	1	1	−1	−1	−1
$\Gamma^{(x,y)}$	2	−1	0	2	−1	0

$\chi^v(C_3) = 1 + 2\cos\frac{2\pi}{3} = 0$

$\chi^v(S_3) = -1 + 2\cos\frac{2\pi}{3} = -2$

← $\chi^{(x,y)} = \chi^v - \chi^z$

použijeme Frobeniovo kritérium ireducibility k ověření, že jde o IR: $\sum_{k=1}^{N_c} n_k \chi^*(C_k)\chi(C_k) =$

$$= 1\cdot 2^2 + 2(-1)^2 + 0 + 1\cdot 2^2 + 2(-1)^2 + 0 = 12 = \# D_{3h}$$

⇒ jde tedy o IR

– **pseudovektorová repr.** pro D_{3h} – hlavní osa opět C_3 ve směru z

– jde o repr. $D^R(g) = \det D^v(g) \cdot D^v(g)$

a tedy

D_{3h}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	σ_h	$2S_3$	$3C_2$
Γ^{R_z}	1	1	−1	1	1	−1
$\Gamma^{(R_x,R_y)}$	2	−1	0	−2	1	0

← pouze otočené znaménko u nevlastních rotací (a zrcadlení)

Frobenius: $\sum_{k=1}^{N_c} n_k \chi^*(C_k)\chi(C_k) = 4+2+0+4+2+0 = 12 = \# D_{3h}$

– celková tabulka (již máme 5 IR ze 6)

viz později

C_{3v} / D_{3h}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	σ_h	$2S_3$	$3C_2$	D_{3h}	C_{3v}	D_{3h}	C_{3v}
$A_1 = A_1' = \Gamma^1$	1	1	1	1	1	1		z	x^2+y^2, z^2	x^2+y^2, z^2
$A_2 = A_2' = \Gamma^{R_z}$	1	1	−1	1	1	−1	R_z	R_z		
$E = E' = \Gamma^{(x,y)}$	2	−1	0	2	−1	0	(x,y)	$(x,y), (R_x,R_y)$	(x^2-y^2, xy)	(x^2-y^2, xy), (xz, yz)
$A_1'' = \Gamma^{\det}$	1	1	−1	−1	−1	1				
$A_2'' = \Gamma^z$	1	1	1	−1	−1	−1	z			
$E'' = \Gamma^{(R_x,R_y)}$	2	−1	0	−2	1	0	(R_x,R_y)		(xz, yz)	

poslední IR lze dopočítat např. pomocí $\sum_{\alpha=1}^{N_r} \chi^\alpha(C_i)^* \chi^\alpha(C_j) = \frac{\# G}{n_i}\delta_{ij}$

nebo v tomto případě můžeme vzít antisymetrickou repr. danou vztahem $\chi(g) = \det D(g)$ ← −1 pro nevlastní rotace