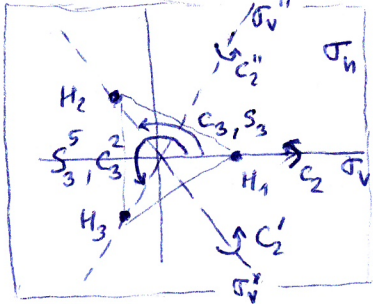


Tabulka charakterů grupy D_{3h} a její podgrupy C_{3v}

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

- operace symetrie - celkem 12



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

$$\text{levá třída } \sigma_h \cdot C_{3v} = \{\sigma_h, S_3, S_3^5, C_2, C_2', C_2''\}$$

- 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
tyto nelze převést na sebe	E	$\{E\}$	—
	$2C_3$	$\{C_3, C_3^2\}$	σ_v nebo C_2 ← obojí není směr otáčení
	$3\sigma_v$	$\{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$	C_3 a C_3^2 ← otáčení roviny zrcadlení
	σ_h	$\{\sigma_h\}$	—
	$2S_3$	$\{S_3, S_3^5\}$	σ_v nebo C_2 ← opět otáčení směru
	$3C_2$	$\{C_2, C_2', C_2''\}$	C_3 a C_3^2 ← otáčení osy rotace

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

- počty a dimenze ireducibilních repr.

$$- C_{3v} \text{ má 3 třídy} \Rightarrow \text{má i 3 IR} \Rightarrow \sum_{n=1}^3 d_n^2 = 6 \Rightarrow \frac{1^2 + 1^2 + 2^2}{\text{jediná možnost}} = 6$$

$$- D_{3h} \text{ má 6 tříd} \Rightarrow 6 \text{ IR} \Rightarrow \sum_{n=1}^6 d_n^2 = 12 \Rightarrow \frac{1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 + 2^2 + 2^2}{\text{opět jediná možnost}} = 12$$

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

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

$$\Rightarrow \text{první řádek tabulky}$$

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

	D_{3h}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	σ_h	$2S_3$	$3C_2$	
vektorová repr. → Γ^v		3	0	+1	1	-2	-1	$\chi^v(C_3) = 1 + 2\cos\frac{2\pi}{3} = 0$
Γ^z		1	1	1	-1	-1	-1	$\chi^v(S_3) = -1 + 2\cos\frac{2\pi}{3} = -2$
$\Gamma^{(x,y)}$		2	-1	0	2	-1	0	$\leftarrow \chi^{(x,y)} = \chi^v - \chi^z$

použijeme Frobeniovo kritérium irreducibility

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}

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 otočení
známénko
u nevládních
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	(x^2-y^2, xy)	(x^2-y^2, xy)
$E = E' = \Gamma^{(x,y)}$	2	-1	0	2	-1	0	(x,y)	$(x,y), (R_x, R_y)$	(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 $\sum_{i=1}^{N_r} \chi^*(C_i) \chi(C_i) = \frac{\#G}{n_i} \delta_{ij}$

nebo v tomto případě můžeme vzít antisymetrickou repr.

danou vztahem $\chi(g) = \det D(g) \leftarrow -1$ pro nevládní rotace

Značení ireducibilních repr. bodových grup

- jednorozměrné A nebo B, pokud je $\chi(C_n) = \pm 1$
 $\uparrow$ A
 $\uparrow$ B

dále indexy A' a A'', pokud $\chi(\sigma_h) = \pm 1$

A_g a A_u , pokud $\chi(i) = \pm 1$ gerade
ungerade

a případy $A_1, A_2, \dots$, nelze-li použít výše uvedené
 nebo je jich několik

Př. H_2O

C_{2v}	E	$C_2(z)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v'(yz)$
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1

B

tyto se přičítají
neuplatní

D_2	E	$C_2(z)$	$C_2'(y)$	$C_2''(x)$
A	1	1	1	1
B_1	1	1	-1	-1
B_2	1	-1	1	-1
B_3	1	-1	-1	1

zde je z-ová
značka u C_2
(nemí jasné, která
je hlavní :-)

- dvourozměrné E, včetně „reálných“ dvourozměrných

u cyklických grup, které jsou kombinací 2 jednorozměrných
 (komplexně sdružených) komplexních IR

- třírozměrné T, čtyřrozm. G a pětirozm. H

- indexy u E, příp. T, G, H podobné jako u E

Př.

T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
E	2	-1	2	0	0
T_1	3	0	-1	1	-1
T_2	3	0	-1	-1	1

σ_d není σ_h ! ne A' a A''
 S_4 není C_4 ! ne B

ovšem u T_h , kde je inverze, jsou A_g, E_g, T_g
 a A_u, E_u, T_u apod.

- speciální značení pro $C_{\infty v}$ a $D_{\infty h}$

$C_{\infty v}: A_1 = \Sigma^+, A_2 = \Sigma^-, E_1 = \pi, E_2 = \Delta$ atd.

$D_{\infty h}: A_{1g} = \Sigma_g^+, A_{2g} = \Sigma_g^-$ apod pro ungerade

$\Sigma, \pi, \Delta, \Phi$ atd.

podle projekce orb. momentu
 do hlavní osy $|M_z| = 0, 1, 2, \dots$