Cvičení: Indukovaná reprezentace a Frobeniův teorém

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

$$H \sim C_s = \{E, \sigma_v\}$$

$$C_{3v} \neq C_3 \otimes C_s$$

C_s	E	σ_v
A'	1	1
A''	1	−1

• zkonstruujeme $A' \uparrow C_{3v}$

$$C_{3v} = \underset{p_1}{E}H + \underset{p_2}{C_3}H + \underset{p_3}{C_3^2}H = \{E, \sigma_v\} + \{C_3, \sigma_v''\} + \{C_3^2, \sigma_v'\}$$

E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ_v''
C_3	C_3^2	E	σ_v''	σ_v	σ_v'
C_3^2	E	C_3	σ_v'	σ_v''	σ_v
σ_v	σ_v'	σ_v''	E	C_3	C_3^2
σ_v'	σ_v''	σ_v	C_3^2	E	C_3
σ_v''	σ_v	σ_v'	C_3	C_3^2	E

$$D_G(g)_{sj,ti} = \delta_{st}(g)\,\underbrace{D_H(p_s^{-1} g\, p_s)}_{=1\ \forall g, p_s}$$
$$= \delta_{st}(g) = \begin{cases} 1 & g p_t \in p_s H \\ 0 & \text{jinde} \end{cases}$$

$$D_G(E) = \begin{array}{c} \xrightarrow{t} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array} \downarrow s \quad \Leftrightarrow \quad \begin{array}{c|c} & E \quad C_3 \quad C_3^2 \\ \hline E & \\ C_3 & \begin{pmatrix} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix} \\ C_3^2 & \end{array}$$

NOTE: induced repre from a 1D repre is always monomial (in this case they are even perm. matrices) → 1 nonzero in each row & col.

$$D_G(C_3) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$p_s = E \Rightarrow C_3 p_t \in \{E, \sigma_v\} \Rightarrow p_t = C_3^2$

$p_s = C_3 \Rightarrow C_3 p_t \in \{C_3, \sigma_v''\} \Rightarrow p_t = E$

$p_s = C_3^2 \Rightarrow C_3 p_t \in \{C_3^2, \sigma_v'\} \Rightarrow p_t = C_3$

$$D_G(C_3^2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad D(\sigma_v) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$\sigma_v p_t \in \{E, \sigma_v\} \Rightarrow E$

$\sigma_v p_t \in \{C_3, \sigma_v''\} \Rightarrow C_3^2$

$\sigma_v p_t \in \{C_3^2, \sigma_v'\} \Rightarrow C_3$

$$D(\sigma_v') = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = C_3 \cdot \sigma_v \cdot \underbrace{C_3^{-1}}_{= C_3^2} \qquad D(\sigma_v'') = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \chi^{A'\uparrow G}(E) = 3 \qquad \chi^{A'\uparrow G}(C_3) = 0 \qquad \chi^{A'\uparrow G}(\sigma_v) = 1$$

NB: srov. regulární reprezentace: je to indukovaná reprez. triviální reprezentace podgrupy $\{E\}$ (d.cv.)

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0
$A'\uparrow G$	3	0	1
$A''\uparrow G$	3	0	-1

$\Rightarrow A'\uparrow G = A_1 \oplus E$

$\Rightarrow A''\uparrow G = A_2 \oplus E$

Subdukce:

C_s	E	σ_v	
$A_1\downarrow C_s$	1	1	$= A'$
$A_2\downarrow C_s$	1	-1	$= A''$
$E\downarrow C_s$	2	0	$= A'\oplus A''$

$\Rightarrow$ Frobenius: A' jednou v $A_1\downarrow C_s$ a také A_1 jednou v $A'\uparrow G$
A'' jednou v $E\downarrow C_s$ a také E jednou v $A''\uparrow G$

• výpočet charakterů $A''\uparrow G$ přímo:

$$\chi^{\nu\uparrow G}(g) = \sum_s \delta_{ss}(g)\, \chi^{\nu}_H(p_s^{-1} g\, p_s^{-1}) \qquad \delta_{ss}(g) = 1 \Leftrightarrow g p_s \in p_s H$$

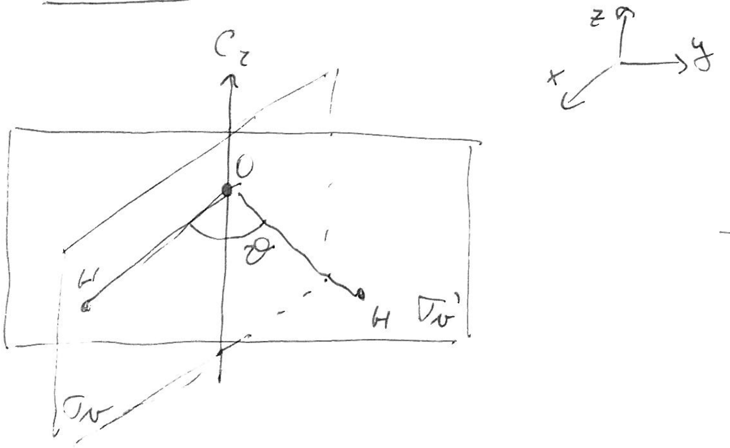
$g = E \Rightarrow E p_s \in p_s H \ \forall p_s \ \&\ \chi^{\nu}_H(p_s^{-1} E p_s) = \chi^{\nu}_H(E) = 1 \Rightarrow \chi(E) = 3$

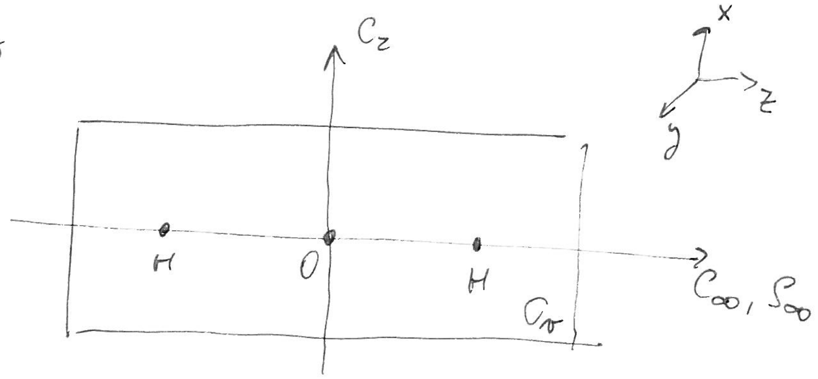
$g = C_3 \Rightarrow C_3 p_s \in p_s H$ nelze splnit $\Rightarrow \chi(C_3) = 0$

$g = \sigma_v \Rightarrow \sigma_v p_s \in p_s H$ pro $p_s = E \Rightarrow \chi^{\nu}_H(\sigma_v) = -1 \Rightarrow \chi(\sigma_v) = -1$

PŘÍKLADY

1, H_2O^- v rovnovážné (C_{2v}) a lineární geometrii ($D_{\infty h}$)





C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ_v'	
A_1	1	1	1	1	z
A_2	1	1	−1	−1	R_z
B_1	1	−1	1	−1	x, R_y
B_2	1	−1	−1	1	y, R_x

$D_{\infty h}$	E	$2C_\infty^\varphi \ldots$	$\infty\sigma_v$	i	$2S_\infty^\varphi \ldots$	∞C_2	
Π_g	2	$2\cos\varphi$	0	2	$-2\cos\varphi$	0	(R_x, R_y)
Π_u	2	$2\cos\varphi$	0	−2	$2\cos\varphi$	0	(x, y)
Π_g	2		0		−2	0	(R_z, R_x)
Π_u	2		0		2	0	(z, x)

NB: · ~~tato~~ je „std. orientace", kde $\langle z \rangle$ v C_{2v} a $D_{\infty h}$ nesouhlasí

$\Rightarrow$ přiřazení x, y, z do IR je zavádějící

korespondence:

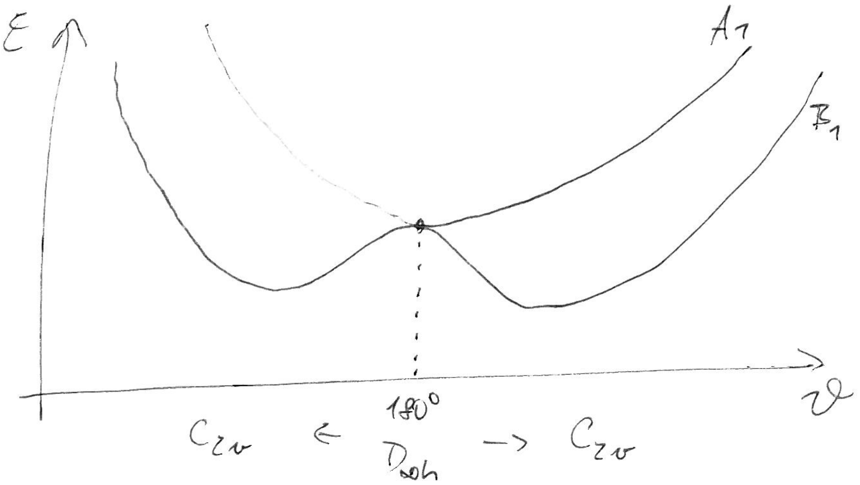
$E \leftrightarrow E \quad C_2 \leftrightarrow \infty C_2 \quad \sigma_v' \leftrightarrow \sigma_v \quad \sigma_v \leftrightarrow S_\infty^{2\pi}$

$x \leftrightarrow y \quad y \leftrightarrow z \quad z \leftrightarrow x$

$\Rightarrow$ štěpení

$\Pi_u = A_1 + B_1 \qquad (\chi(\sigma_v) = 2,\ \chi(\sigma_v') = \chi(C_2) = 0) \quad = (z, x)$ ✓

$\Pi_g = A_2 + B_2 \qquad (\chi(\sigma_v) = -2,\ \chi(\sigma_v') = \chi(C_2) = 0) \quad = (R_z, R_x)$ ✓

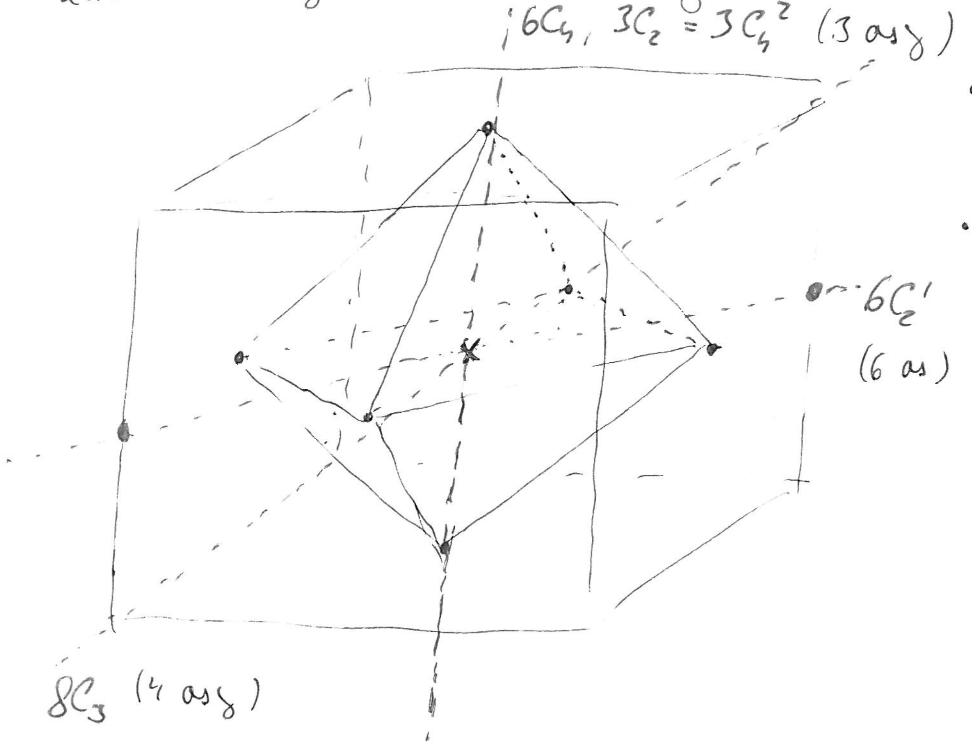


2, Štěpení hladin atomu v kubické krystalové mřížce

NB: charaktery $O(3)$: - bude nás zajímat jen $SO(3)$

$$\chi^l(C_\varphi) = \frac{\sin[(l+1/2)\varphi]}{\sin \varphi/2} \qquad \chi^l(S_\varphi) = (-1)^l \chi^l(C_\varphi)$$

- atom (plná rotační symetrie) umístíme do středu buňky kubické krystalové mřížky



- grupa pravidelného osmistěnu $O_h \subset O(3)$
- pro zjednodušení budeme pracovat s grupou $O \subset SO(3)$ (neuvažujeme inverzi a nevlastní rotace)

O	E	$8C_3$	$3C_2=C_4^2$	$6C_2'$	$6C_4$	24 elementů
A_1	1	1	1	1	1	$x^2+y^2+z^2$
A_2	1	1	1	−1	−1	
E	2	−1	2	0	0	$(2z^2-x^2-y^2, x^2-y^2)$
T_1	3	0	−1	−1	1	$(x,y,z), (R_x,R_y,R_z)$
T_2	3	0	−1	1	−1	(xy, xz, yz)
$l=0$	1	1	1	1	1	$\Rightarrow A_1$
$l=1$	3	0	−1	−1	1	$\Rightarrow T_1$ $\quad (1+2\cos x)$
$l=2$	5	−1	1	1	−1	$\Rightarrow E+T_2$ $\quad \cos\frac{5}{2}x = (1+2\cos x+2\cos 2x)$

$$\langle l=2|A_1\rangle = (5-8+3+6-6)/24 = 0$$
$$\langle l=2|A_2\rangle = (5-8+3-6+6)/24 = 0$$
$$\langle l=2|E\rangle = (10+8+6)/24 = 1$$
$$\langle l=2|T_1\rangle = (15-3-6-6)/24 = 0$$
$$\langle l=2|T_2\rangle = (15-3+6+6)/24 = 1$$

$\Rightarrow$ 5x degenerovaná hladina se rozštěpí na 2x a 3x degenerované hladiny

NB: vlastně nic nového - už jsme viděli při konstruování tabulky charakterů, jen obráceně (rozklad vec. repre, zařazování kvadr. fcí...)

- mohli bychom pokračovat – krystal umístíme do elmg. pole
  ⇒ dojde k „protažení" základní buňky (řekněme podél ⟨z⟩)
  ⇒ D_4 (jen 1 4-četná osa, zmizí 3-četné, C_2' budou dvě + dvě spojující protější dlouhé hrany a protější stěny)

D_4	E	$C_2 = C_4^2$	$2C_4$	$2C_2'$	$2C_2''$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	−1	−1
B_1	1	1	−1	1	−1
B_2	1	1	−1	−1	1
E	2	−2	0	0	0

$\# D_4 = 8$

$C_2'' \leftrightarrow 6C_2'$ (hrany)

$C_2' \leftrightarrow 3C_2$ (byly 4-četné osy)

O	E	$3C_2 = C_4^2$	$6C_4$	$3C_2' = C_4^2$	$6C_2'$
E	2	2	0	2	0
T_2	3	−1	−1	−1	1

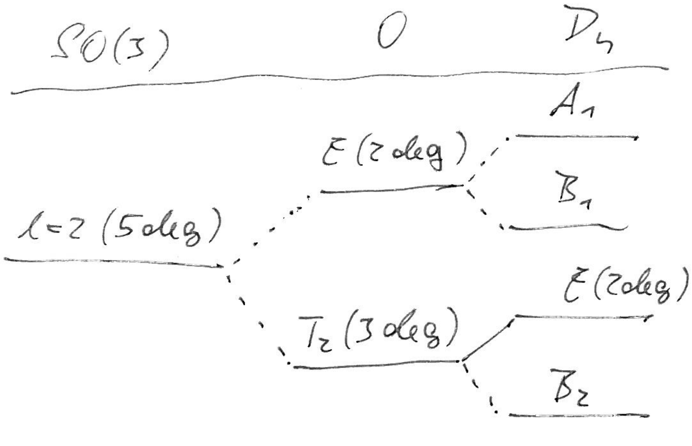
$$\langle E | A_1 \rangle = (2 + 2 + 4)/8 = 1$$
$$\langle E | A_2 \rangle = (2 + 2 - 4) = 0$$
$$\langle E | B_1 \rangle = (2 + 2 + 4)/8 = 1$$

$\Rightarrow E = A_1 + B_1$

$$\langle T_2 | E \rangle = (6 + 2)/8 = 1$$
$$\langle T_2 | B_2 \rangle = (3 - 1 + 2 + 2 + 2)/8 = 1$$

$\Rightarrow T_2 = E + B_2$

⇓ celkem štěpení



3, porucha v QM (z, obecněji)

H_0 (neporušený ham.) ↔ grupa G_0
↓ porucha V
$H = H_0 + V$ ↔ grupa $G \subset G_0$

a, $G = G_0$ … jen posunutí hladin bez změny degenerace, max. může dojít k sejmutí náhodné degenerace (redukované mat. elementy $h^{\alpha} \neq h_0^{\alpha}$, výběrová pravidla jinak stejná)

b, $G \subset G_0$ ⇒ sejmutí degenerace, viz 2, – „porucha" je krystalové pole pro atom