Oplossingen Symmetrie - Week 1

Opgave EN1

De conjugatieklassen zijn dus

$$E = \{1\}, \qquad 2C_6 = \{r, r^5\}, \qquad 2C_3 = \{r^2, r^4\},$$
$$C_2 = \{r^3\}, \qquad 3C_2' = \{t, tr^2, tr^4\}, \qquad 3C_2'' = \{tr, tr^3, tr^5\}$$

waar r staat voor r_6. De irreducibele representaties worden vastgelegd door

$$\rho_{A_1}(r) = (1), \qquad \rho_{A_1}(t) = (1),$$
$$\rho_{A_2}(r) = (1), \qquad \rho_{A_2}(t) = (-1),$$
$$\rho_{B_1}(r) = (-1), \qquad \rho_{B_1}(t) = (1),$$
$$\rho_{B_2}(r) = (-1), \qquad \rho_{B_2}(t) = (-1),$$
$$\rho_{E_1}(r) = \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ +\sqrt{3} & 1 \end{pmatrix} \qquad \rho_{E_1}(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$
$$\rho_{E_2}(r) = \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} -11 & -\sqrt{3} \\ +\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix} \qquad \rho_{E_1}(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

Door matrixvermenigvuldigen zien we voor elk van deze representaties ook wat ze met r^2 en r^3 en tr doen. Als we vervolgens de sporen aflezen vinden we:

$\mathcal{D}_6$	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3C_2'$	$3C_2''$
A_1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	1	-1	-1	1
E_1	2	1	-1	-2	0	0
E_2	2	-1	-1	2	0	0

Opgaven EN2

We vinden:

$\mathcal{D}_{6h}$	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3C_2'$	$3C_2''$	i	$2S_3$	$2S_6$	σ_h	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	1	1	−1	−1	1	1	1	1	−1	−1
B_{1g}	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1
B_{2g}	1	−1	1	−1	−1	1	1	−1	1	−1	−1	1
E_{1g}	2	1	−1	−2	0	0	2	1	−1	−2	0	0
E_{2g}	2	−1	−1	2	0	0	2	−1	−1	2	0	0
A_{1u}	1	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	−1
A_{2u}	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	1	1
B_{1u}	1	−1	1	−1	1	−1	−1	1	−1	1	−1	1
B_{2u}	1	−1	1	−1	−1	1	−1	1	−1	1	1	−1
E_{1u}	2	1	−1	−2	0	0	−2	−1	1	2	0	0
E_{2u}	2	−1	−1	2	0	0	−2	1	1	−2	0	0

waar

$$
\begin{aligned}
&E = \{1\}, \qquad 2C_6 = \{r, r^5\}, \qquad 2C_3 = \{r^2, r^4\},\\
&C_2 = \{r^3\}, \qquad 3C_2' = \{t, tr^2, tr^4\}, \qquad 3C_2'' = \{tr, tr^3, tr^5\},\\
&i = \{P\}, \qquad 2S_3 = \{Pr, Pr^5\}, \qquad 2S_6 = \{Pr^2, Pr^4\},\\
&\sigma_h = \{Pr^3\}, \qquad 3\sigma_d = \{Pt, Ptr^2, Ptr^4\}, \qquad 3\sigma_v = \{Ptr, Ptr^3, Ptr^5\},
\end{aligned}
$$

Opgaven EN3

De waarden van $\chi_\Pi = \chi_\pi \chi_\rho$ zijn $(36, 0, 0, 0, -4, 0, 0, 0, 0, 12, 0, 4)$.
De waarden van $\chi_T = \chi_\pi$ waren $(3, 2, 0, -1, -1, -1, -3, -2, 0, 1, 1, 1)$.
Dus de waarden van $\chi_R = \det \cdot \chi_\pi$ zijn $(3, 2, 0, -1, -1, -1, 3, 2, 0, -1, -1, -1)$.
De waarden van $\chi_V = \chi_\Pi - \chi_T - \chi_R$ zijn dus $(30, -4, 0, 2, -2, 2, 0, 0, 0, 12, 0, 4)$.

We bepalen de scalaire producten:

$$\begin{aligned}
(\chi_V \mid \chi_{A_{1g}}) &= (1\cdot 30\cdot 1 + 2\cdot(-4)\cdot 1 + 1\cdot 2\cdot 1 + 3\cdot(-2)\cdot 1 + 3\cdot 2\cdot 1 \\
&\qquad + 1\cdot 12\cdot 1 + 3\cdot 4\cdot 1)/24 = 2 \\
(\chi_V \mid \chi_{A_{2g}}) &= (1\cdot 30\cdot 1 + 2\cdot(-4)\cdot 1 + 1\cdot 2\cdot 1 + 3\cdot(-2)\cdot(-1) + 3\cdot 2\cdot(-1) \\
&\qquad + 1\cdot 12\cdot 1 + 3\cdot 4\cdot(-1))/24 = 1 \\
(\chi_V \mid \chi_{B_{1g}}) &= (1\cdot 30\cdot 1 + 2\cdot(-4)\cdot(-1) + 1\cdot 2\cdot(-1) + 3\cdot(-2)\cdot 1 + 3\cdot 2\cdot(-1) \\
&\qquad + 1\cdot 12\cdot(-1) + 3\cdot 4\cdot(-1))/24 = 0 \\
(\chi_V \mid \chi_{B_{2g}}) &= (1\cdot 30\cdot 1 + 2\cdot(-4)\cdot(-1) + 1\cdot 2\cdot(-1) + 3\cdot(-2)\cdot(-1) + 3\cdot 2\cdot 1 \\
&\qquad + 1\cdot 12\cdot(-1) + 3\cdot 4\cdot 1)/24 = 2 \\
(\chi_V \mid \chi_{E_{1g}}) &= (1\cdot 30\cdot 2 + 2\cdot(-4)\cdot 1 + 1\cdot 2\cdot(-2) + 3\cdot 2\cdot 0 \\
&\qquad + 1\cdot 12\cdot(-2) + 3\cdot 4\cdot 0)/24 = 1 \\
(\chi_V \mid \chi_{E_{2g}}) &= (1\cdot 30\cdot 2 + 2\cdot(-4)\cdot(-1) + 1\cdot 2\cdot 2 + 3\cdot 2\cdot 0 \\
&\qquad + 1\cdot 12\cdot 2 + 3\cdot 4\cdot 0)/24 = 4 \\
(\chi_V \mid \chi_{A_{1u}}) &= (1\cdot 30\cdot 1 + 2\cdot(-4)\cdot 1 + 1\cdot 2\cdot 1 + 3\cdot(-2)\cdot 1 + 3\cdot 2\cdot 1 \\
&\qquad + 1\cdot 12\cdot(-1) + 3\cdot 4\cdot(-1))/24 = 0 \\
(\chi_V \mid \chi_{A_{2u}}) &= (1\cdot 30\cdot 1 + 2\cdot(-4)\cdot 1 + 1\cdot 2\cdot 1 + 3\cdot(-2)\cdot(-1) + 3\cdot 2\cdot(-1) \\
&\qquad + 1\cdot 12\cdot(-1) + 3\cdot 4\cdot 1)/24 = 1 \\
(\chi_V \mid \chi_{B_{1u}}) &= (1\cdot 30\cdot 1 + 2\cdot(-4)\cdot(-1) + 1\cdot 2\cdot(-1) + 3\cdot(-2)\cdot 1 + 3\cdot 2\cdot(-1) \\
&\qquad + 1\cdot 12\cdot 1 + 3\cdot 4\cdot 1)/24 = 2 \\
(\chi_V \mid \chi_{B_{2u}}) &= (1\cdot 30\cdot 1 + 2\cdot(-4)\cdot(-1) + 1\cdot 2\cdot(-1) + 3\cdot(-2)\cdot(-1) + 3\cdot 2\cdot 1 \\
&\qquad + 1\cdot 12\cdot 1 + 3\cdot 4\cdot(-1))/24 = 2 \\
(\chi_V \mid \chi_{E_{1u}}) &= (1\cdot 30\cdot 2 + 2\cdot(-4)\cdot 1 + 1\cdot 2\cdot(-2) + 3\cdot 2\cdot 0 \\
&\qquad + 1\cdot 12\cdot 2 + 3\cdot 4\cdot 0)/24 = 3 \\
(\chi_V \mid \chi_{E_{2u}}) &= (1\cdot 30\cdot 2 + 2\cdot(-4)\cdot(-1) + 1\cdot 2\cdot 2 + 3\cdot 2\cdot 0 \\
&\qquad + 1\cdot 12\cdot(-2) + 3\cdot 4\cdot 0)/24 = 2
\end{aligned}$$