Symmetrie - week 1

EN1

We gaan het molecuul benzeen C_6H_6 bestuderen, dat de vorm heeft van een vlakke regelmatige zeshoek. We bekijken eerst de rotatie-symmetriegroep. Bij een geschikte keuze van het assenstelsel is dat $\mathcal{D}_6$. Daarna bekijken we de volle symmetrie-groep. Deze wordt dan $\mathcal{D}_{6h}$.

We proberen daarbij de notatie-conventies uit de molecuul-fysica te hanteren, de zogenaamde Mulliken notatie. De as van 'de' rotatie van hoogste orde noemt men de hoofdas, Bij onze keuze van coördinaten is dat de as van $r = r_6$ namelijk de lijn opgespannen door $(0, 0, 1)$.

We willen de karaktertabel van D_6 bepalen. Om ons aan te passen aan de conventies in de molecuulfysica labellen we de rijen en kolommen als volgt.

Kolommen, op volgorde:

- De conjugatieklasse van het eenheidselement e heet E.
- De klasse van r heeft 2 elementen van orde 6 en heet $2C_6$.
- De klasse van r^2 heeft 2 elementen van orde 3 en heet $2C_3$.
- De klasse van r^3 heeft 1 element van orde 2 en heet C_2.
- De klasse van tr heeft 3 elementen van orde 2 en heet $3C_2'$.
- De klasse van tr^3 heeft 3 elementen van orde 2 en heet $3C_2''$.

Rijen, op volgorde:

- De triviale representatie heet A_1.
- Andere ééndimensionale representaties die triviaal zijn op het element van hoogste orde r hebben Mulliken notatie A_j met $j > 1$. Hier is dat er maar één, die dus A_2 heet.
- Andere ééndimensionale representaties die niet triviaal zijn op het element van hoogste orde r hebben Mulliken notatie B_j. Degene die triviaal is op t noemen we B_1 en de andere B_2.
- Tweedimensionale irreducibele representaties hebben Mulliken notatie E_j. De standaardrepresentatie noemen we E_1 en de andere E_2.

Bepaal nu de karaktertabel van $\mathcal{D}_6$.

EN2

Met elke conjugatieklasse van $\mathcal{D}_6$ corresponderen er twee van $\mathcal{D}_{6h}$:

- Een door de deelverzameling van $\mathcal{D}_6$ op te vatten als deelverzameling van $\mathcal{D}_{6h}$.
- Een door elke element van de deelverzameling te vermenigvuldigen met P.

Nu wat over de Mulliken notatie voor de conjugatieklassen. Spiegelingen ten opzichte van een vlak worden met een σ aangegeven, en wel

- De spiegeling heet σ_h als het spiegelvlak loodrecht op de hoofdas staat. Hier is dat het horizontale vlak opgespannen door $(1, 0, 0)$ en $(0, 1, 0)$. Dus σ_h is de diagonaalmatrix met diagonaal $+1, +1, -1$, dus Pr_6^3 in de notatie van het diktaat.
- De spiegeling heet σ_v als het spiegelvlak de hoofdas bevat en een van de atomen uit het molecuul. Hier is dat het verticale vlak opgespannen door $(1, 0, 0)$ en $(0, 0, 1)$. Dus σ_v is de diagonaalmatrix met diagonaal $+1, -1, +1$, dus Ptr_6^3 in de notatie van het diktaat.
- De spiegeling heet σ_d als het spiegelvlak de hoofdas bevat en geen van de atomen uit het molecuul. Hier is dat het diagonale vlak opgespannen door $(0, 1, 0)$ en $(0, 0, 1)$. Dus σ_v is de diagonaalmatrix met diagonaal $-1, +1, +1$, dus Pt in de notatie van het diktaat.

In overeenstemming met bovenstaande opmerkingen labellen we de kolommen achtereenvolgens

$$E, 2C_6, 2C_3, C_2, 3C_2, 3C_2', i, 2S_3, 2S_6, \sigma_h, 3\sigma_d, 3\sigma_v.$$

Met elke irreducibele representatie van $\mathcal{D}_6$ corresponderen er twee van $\mathcal{D}_{6h}$:

- Een waarvan de beperking tot $\mathcal{D}_6$ de gegeven representaie is, en die triviaal is op P. Deze krijgt dezelfde naam met extra onderschrift g (voor 'gerade').
- Een waarvan de beperking tot $\mathcal{D}_6$ de gegeven representaie is, en die niet-triviaal is op P. Deze krijgt dezelfde naam met extra onderschrift u (voor 'ungerade').

In overeenstemming met bovenstaande opmerkingen labellen we de kolommen achtereenvolgens

$$A_{1g}, A_{2g}, B_{1g}, B_{2g}, E_{1g}, E_{2g}, A_{1u}, A_{2u}, B_{1u}, B_{2u}, E_{1u}, E_{2u}.$$

Bepaal nu de karaktertabel van $\mathcal{D}_{6h}$.

EN3

Zij $G = D_{6h}$ de symmetriegroep van het benzeen molecuul C_6H_6. Zij $\pi : G \to O(\mathbb{R}^3)$ de standaard representatie met karakter χ_π en zij $\Pi : G \to O(\mathbb{R}^{36})$ de natuurlijke representatie op de vibratieruimte $\mathbb{R}^{36}$ met karakter χ_Π. Bepaal χ_Π (met behulp van de regel van Wigner) en bepaal de multipliciteiten van de irreducibele representaties in Π (met behulp van Schur's otrhogonaliteitsrelatie).