$x^2 \rightarrow \underbrace{x^2, y^2, xy}_{D}$

3-τος χώρος αναπαράστασης:

$\varphi_1 = x^2$ | $\tilde{P}_e \varphi_1 = \varphi_1$

$\varphi_2 = y^2$ | $\tilde{P}_e \varphi_2 = \varphi_2$ άρα $\begin{pmatrix} \varphi_1' \\ \varphi_2' \\ \varphi_3' \end{pmatrix} \rightarrow \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{t_r = 3} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \end{pmatrix}$

$\varphi_3 = xy$ | $\tilde{P}_e \varphi_3 = \varphi_3$

$\Rightarrow D = 3$

D_3	e	c_3, c_3^2	c_2, c_2', c_2''
$\chi(A_1)$	1	1	1
$\chi(A_2)$	1	1	-1
$\chi(\Gamma)$	2	-1	0
$\chi(D)$	3	0	1

$\Rightarrow D = A_1 \oplus \Gamma$

$\chi(D)$ | 2 | -1 | 0 $\Rightarrow D = \Gamma$

A_2 $\varphi = x$.

$\varphi_1 = x$

$\varphi_2 = y$

	e	a	b	c	d	...
e						
a						
b						
c						
d						

(g στοιχεία)

Έστω ότι $g = n_1^2 + n_2^2 + \dots + n_k^2$ όπου k ο αριθμός των κλάσεων

$n_1 = 1$, κτλ.

	$\{e\}$	$\{\dots\}$	$\{\dots\}$
A_1	1	1	1

ΟΜΑΔΕΣ ΣΗΜΕΙΟΥ

15/5/200

C_n $\quad \varphi = \frac{2\pi}{n}$

$\{\underbrace{e, C_n, C_n^2, \dots, C_n^{n-1}}_{n \text{ στοιχεία}}\}$ $\quad (C_n^n = e)$

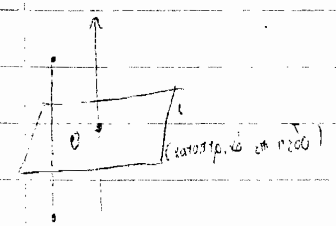
↳ αβελιανή ομάδα άρα έχει n κλάσεις

άρα έχει n αναπαραστάσεις

• $d_1^2 + d_2^2 + \dots + d_n^2 = n \Rightarrow d_1 = d_2 = \dots = d_n = 1$

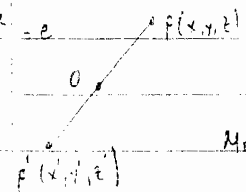
άρα όλες οι αναπαραστάσεις είναι μονοδιάστατες

$\{e, \sigma\}$



(αντιστροφή)

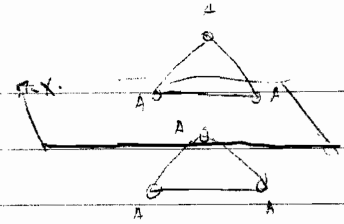
$i^2 = e$ $\quad \{e, i\}$ συμβολίζεται και $\{e, J\}$



Μπορώ επίσης να έχω και γινόμενα των παραπάνω.

Γενικά: $\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \overbrace{\begin{pmatrix} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}}^{A} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$

Θέλουμε η απεικόνιση να είναι ισομετρία $\Rightarrow$ $|A|^2 = 1$



επιτρεπτές συμμετρίες:

e, C_3, C_3^2, σ

$|A|^2 = 1 \Rightarrow |A| = \pm 1$

$|A| = +1$: περιστροφή

$|A| = -1$: αντιστροφή

- $SO(3) = \{$ πίνακες 3×3 με ορίζουσα $1 \}$
- $O(3) = \{$ πίνακες 3×3 με ορίζουσα $\pm 1 \}$

$S_n \equiv C_n \cdot \sigma_h = \sigma_h \cdot C_n$ (περιστροφοανάκλαση)

$S_n^n = (C_n \sigma_h)^n \overset{?}{=} e$

$= C_n^n \sigma_h^n = e \cdot \sigma_h^n \overset{?}{=} e$

: n άρτιος : $S_n^n = e$ άρα $\{e, S_n, S_n^2, \dots, S_n^{n-1}\}$

: n περιττός : $S_n^n = \sigma$ $\quad S_n^{2n} = e$ άρα $\{e, S_n, S_n^2, \dots, S_n^{2n-1}\}$

$i_n \equiv C_n\, i$

προφανώς $i_2 = S_1 = \sigma_h$

Επίσης, $i_6^m = S_3^{6-m}$ (Άσκηση) (θλ. συμβολισμούς)

Hermann - Mauguin (Int.) :

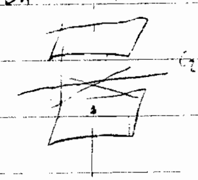
n, $\bar{n}$, m, nm, n/m

Schönflies:

- $\{C_n\}$: $\{e, C_n, C_n^2, \dots, C_n^{n-1}\}$ — n στοιχεία, n κλάσεις

$\{n\}$

- D_n $\quad C_n$ $\quad D_n = \{e, C_n, C_n^2, \dots, C_n^{n-1}, \underbrace{C_2, C_2', C_2'', \dots}_{\# n}\}$ $2n$ στοιχ.

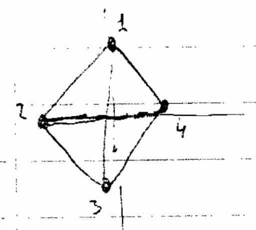


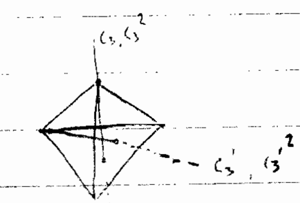
$= \{n22\}$ αν n άρτιος $\quad$ ή $\{n2\}$ αν n περιττός

κλάσεις: $= \begin{cases} \frac{n+3}{2} & \text{αν } n \text{ περιττός} \\ \frac{n+6}{2} & \text{αν } n \text{ άρτιος} \end{cases}$

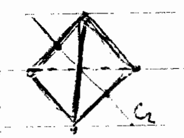
π.χ. για $n=3 \rightsquigarrow 3$ κλάσεις

για $n=4 \rightsquigarrow 5$ κλάσεις





$T = \{e, C_3, C_3^2, C_3', C_3'^2, C_3'', C_3''^2, C_3''', C_3'''^2,$
$C_2, C_2', C_2''\}$ (βασική ομάδα συμμετρίας
$= \{23\}$ ενός κανονικού τετραέδρου)



επίσης $e = C_3^3 = C_3'^3 = \dots$

$e = C_2^2 = C_2'^2 = C_2''^2$

και $e = (C_3 C_2)^2$

$C_3 : 1\,2\,3\,4 \to 1\,4\,2\,3$

$C_3^2 : 1\,2\,3\,4 \to 1\,3\,4\,2$

Υπάρχουν $4! = 24$ τρόποι να αναδιατάξω τις κορυφές.

T_d = η ομάδα αυτή με τα 24 στοιχεία

συμβολίζεται με T_d ($\bar{4}3m$)

Στην T οι κλάσεις είναι:

$\{e\}, \{4C_3\}, \{4C_3^2\}, \{3C_2\}$

Στην T_d οι κλάσεις είναι:

$\{e\}, \{4C_3, 4C_3^2\}, \{6\,\dot{J}C_2\}, \{3C_4^2\}, \{3\dot{J}C_4, 3\dot{J}C_4^3\}$

Αριθμός μη αναγώγιμων αναπαραστάσεων:

T : $12 = d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 + d_4^2 \xRightarrow{d_1=1}$

$11 = d_2^2 + d_3^2 + d_4^2 \Rightarrow 2 \le d_4 \le 3$

- Αν $d_4 = 3$ τότε $d_1 = d_2 = d_3 = 1$
- Αν $d_4 = 2$ τότε $d_2^2 + d_3^2 = 7$ που δεν γίνεται

T_d : $d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 + d_4^2 + d_5^2 = 24 \xRightarrow{d_1=1}$

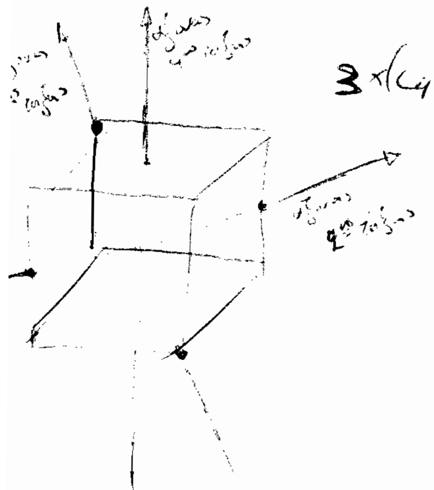
$d_2^2 + d_3^2 + d_4^2 + d_5^2 = 23 \Rightarrow 3 \le d_5 \le 4$

- Αν $d_5 = 4$ $d_2^2 + d_3^2 + d_4^2 = 7$ δεν γίνεται
- Άρα $d_5 = 3 \Rightarrow d_2^2 + d_3^2 + d_4^2 = 14$

$\Rightarrow d_4 = 3$ $d_2^2 + d_3^2 = 5$

άρα $d_1 = d_2 = 1$, $d_3 = 2$, $d_4 = d_5 = 3$

Θεωρία Ομάδων (1) [redacted] ~~22~~/05/2006



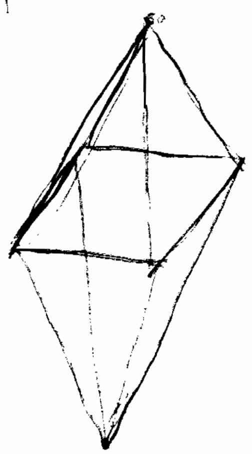
$3\times(C_4, C_4^2, C_4^3)$ άρα 9 στοιχεία + 1 e

$6\times C_2$ " 6

$4\times C_3 (C_3^2)$ " 8

Σύνολο 24 στοιχεία

$O(432)$

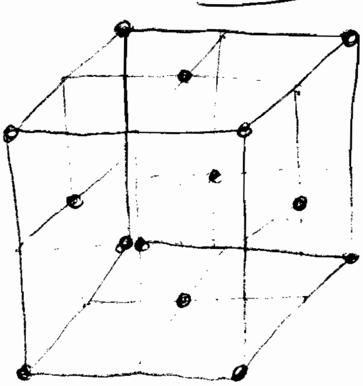


$O \equiv \{e\}, \{3C_4, 3C_4^3\}, \{3C_4^2\}, \{4C_3, 4C_3^2\}, \{6C_2\}$

$T_d(1,2,3,4)$ (24)

T (κανονική υποομάδα)/[illegible] περιέχει πλήρεις (12)

NaCl



$\pm x, \pm y, \pm z$

O_h (48)

Πολ/σμός με την $C_i \equiv \{e, J\}$

$C_n \xrightarrow{\{C_i\}} C_{nh}$ n=άρτιος

S_{2n} n=περιττός

$D_n \longrightarrow D_{nh}$ n=άρτιος

D_{nd} n=περιττός

$T \to T_h = T \otimes C_i$

$O \to O_h = O \otimes C_i$

$J \to J_h = J \otimes C_i$

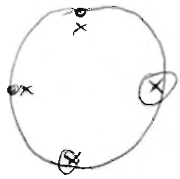
$C_3 \otimes C_i$

$E, C_3, C_3^2, jE, jC_3, jC_3^2\}$

C_3

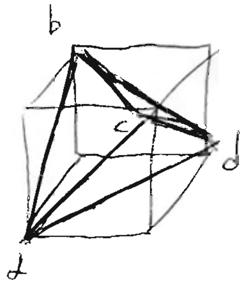
$\longrightarrow \quad S_6$

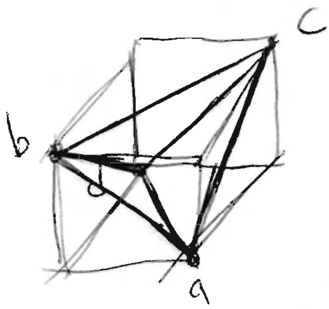
$C_4 \otimes C_i = C_{4h}$



κατασκευή του T_d

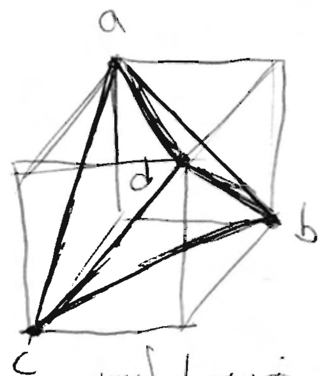
C_4





περιστροφή κατά 90°

jx



αντιδιαμετρικά

$$O = T + C_4 T \Rightarrow T_d = T + j \cdot C_4 \cdot T$$

$$C_{2n} = C_n + C_{2n} \cdot C_n \Rightarrow S_{2n} \ (n = \text{άρτιος})$$

$$C_{nh} \ (n = \text{περιττός})$$

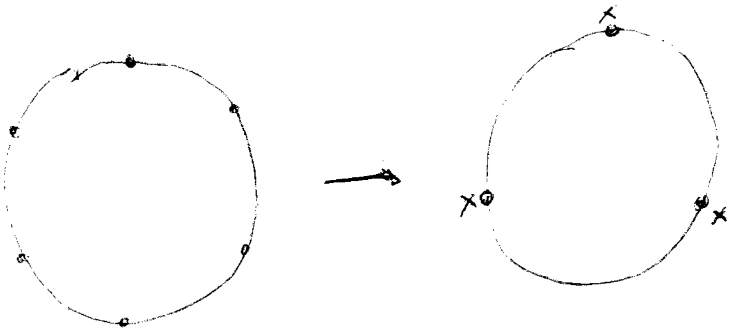
$$D_n = C_n + C_2 C_n \Rightarrow C_{nv}$$

$$D_{2n} = D_n + C_{2n} D_n \Rightarrow D_{nd} \ (n = \text{άρτιος})$$

$$D_{nh} \ (n = \text{περιττός})$$

Θεωρία Ομάδων

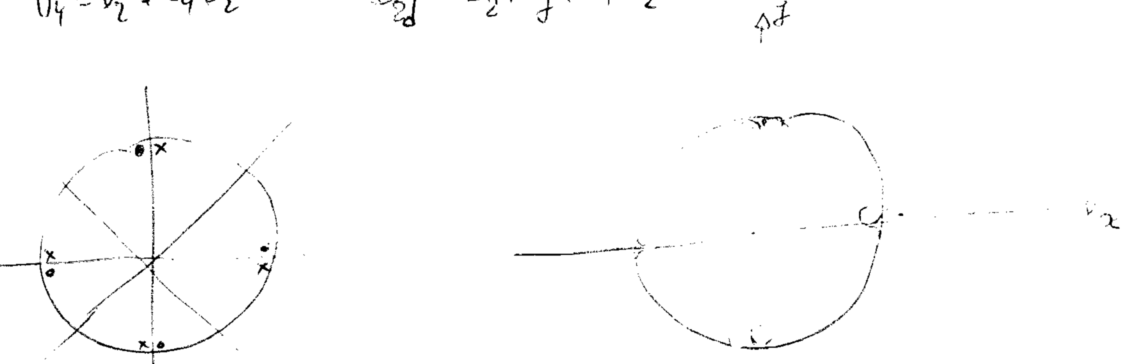
$C_6 = C_3 + C_6 C_3 \Rightarrow C_{3h} = C_3 + J \cdot C_6 \cdot C_3$



C_{3h}

Πχ

$D_4 = D_2 + C_4 D_2 \Rightarrow D_{2d} = D_2 + J + C_4 D_2$



(1) 07/07/06

Θεωρία Ομάδων

$H_0 \cdot \phi = E \cdot \phi$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(r) \right\} \phi = E \cdot \phi$$

$$(H_0 + \underbrace{H}_{\to 0}) \cdot \phi' = E \cdot \phi'$$

$C_{3v} = \{e, C_3, C_3^2, \sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$ —— , —— $C_3 = \{e, C_3, C_3^2\}$

$D_3 = \{e, C_3, C_3^2, C_2, C_2', C_2''\}$ $C_s = \{e, \sigma_v\}$

κλάσεις / χαρακτ.	e	$\{C_3, C_3^2\}$	$\{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0

C_s	$\{e\}$	$\{\sigma_v\}$
A_1	1	1
A_2	1	-1

C_3	$\{e\}$	$\{C_3\}$	$\{C_3^2\}$
A_1	1	1	1
E'	1	ε	ε^2
E''	1	ε^2	ε

$\chi(C_3)$ $\chi\{C_3^2\} = \chi(C_3) \cdot \chi(C_3) = \chi(C_3)^2$

$C_3^3 = e \to [\chi(C_3)]^3 = 1$

$\varepsilon = e^{i\frac{2\pi}{3}}$, $\varepsilon^2 = \varepsilon^* \left[\begin{array}{l} \text{διότι } \varepsilon \cdot \varepsilon^2 = \varepsilon^* \cdot \varepsilon \\ \to \varepsilon^3 = |\varepsilon|^2 = 1 \end{array} \right]$

$A_1(C_{3v}) \leftrightarrow A_1(C_s)$ $A_1, A_2(C_{3v}) \longleftrightarrow A(C_3)$

$A_2(C_{3v}) \leftrightarrow A_2(C_s)$ $E(C_{3v}) \longrightarrow E' + E''(C_3)$

$E(C_{3v}) \leftrightarrow A_1 + A_2(C_s)$

Για να ελέγξουμε αν είναι πραγματική ή ψευδοπραγματική μια αναπαράσταση:

$$\frac{1}{g}\sum_{A\in G}\chi^{(\alpha)}(A^2) \longrightarrow \begin{cases} +1 & : \text{πραγματική} \\ -1 & : \text{ψευδοπραγματική} \\ 0 & : \text{μιγαδική} \end{cases} \qquad D^{(\alpha)*} \cong D^{(\alpha)}$$

αριθμός στοιχείων

Πρόσθεση Στροφορμών

$D^{(J_1)}(1): 2J_1+1$

$D^{(J_2)}(2): 2J_2+1$

$$|J_1-J_2| = J \le J_1+J_2$$

$$\tilde{P}_R u^{(1)}_{m_1} = \sum D^{(J_1)}_{k_1 m_1}(R)\, u_{k_1} \quad (1)$$

$$\tilde{P}_R v^{(2)}_{m_2} = \sum D^{(J_2)}_{k_2 m_2}(R)\, v_{k_2} \quad (2)$$

$$\tilde{P}_R u_{m_1}(1) v_{m_2}(2) = \sum D^{(J_1)}_{k_1 m_1}(R)\, u_{k_1}(1) \cdot \sum D^{(J_2)}_{k_2 m_2}(R)\, v_{k_2}(2) =$$

$$= \sum\sum D^{(J_1)}_{k_1 m_1}(R)\, D^{(J_2)}_{k_2 m_2}(R)\, u_{k_1}(1)\cdot v_{k_2}(2)$$

$$\chi = \sum_{m_1=-J_1}^{J_1} e^{-im_1\phi} \sum_{m_2=-J_2}^{J_2} e^{-im_2\phi} = \sum \alpha_{m_1 m_2}\, e^{-i(m_1+m_2)\phi}$$

$$= \sum_{j=0}^{\omega} \alpha_J \cdot \sum_{M=-J}^{J} e^{-iM\phi}$$

Τελικά προκύπτει: $D^{(J_1)} \times D^{(J_2)} = D^{(J_1+J_2)} + D^{(J_1+J_2-1)} + \ldots + D^{(|J_1-J_2|)}$

$\underline{\text{πχ}}$: $D^{(1)} \times D^{(1)} = D^{(2)} + D^{(1)} + D^{(0)}$

$3 \times 3 = 9 = 5 + 3 + 1$