

F4110 Kvantová fyzika atomárních soustav

Teorie grup a molekuly

Kateřina Zuzanáková, 29.6.2011

Teorie grup a molekuly

Motivace

skleníkový efekt:

- Země vyzařuje tepelné záření →
- pohlcováno skleníkovými plyny
- část vyzářena zpět k Zemi

Teorie grup a molekuly

Motivace

skleníkový efekt:

- Země vyzařuje tepelné záření →
- pohlcováno skleníkovými plyny — vibrace molekul — kmity souvisí se symetrií molekuly — symetrie popisujeme pomocí grup
- část vyzářena zpět k Zemi

Teorie grup a molekuly

Motivace

skleníkový efekt:

- Země vyzařuje tepelné záření →
- pohlcováno skleníkovými plyny — vibrace molekul — kmity souvisí se symetrií molekuly — symetrie popisujeme pomocí grup
- část vyzářena zpět k Zemi

Co dnes uvidíme

- grupa symetrií molekuly
- jaké prvky může obsahovat taková grupa
- jejich reprezentace

asi všichni víme, ale pro jistotu...

Grupa

nosná množina G s binární operací \circ

$$a, b \in G \quad a \circ b = c \quad c \in G$$

$$a, b, c \in G \quad a \circ (b \circ c) = (a \circ b) \circ c$$

$$a \in G \quad \exists e \in G \quad a \circ e = e \circ a = a$$

$$a \in G \quad \exists b \in G \quad a \circ b = b \circ a = e$$

asi všichni víme, ale pro jistotu...

Grupa

nosná množina G s binární operací \circ

$$a, b \in G \quad a \circ b = c \quad c \in G$$

$$a, b, c \in G \quad a \circ (b \circ c) = (a \circ b) \circ c$$

$$a \in G \quad \exists e \in G \quad a \circ e = e \circ a = a$$

$$a \in G \quad \exists b \in G \quad a \circ b = b \circ a = e$$

Grupa symetrií molekuly

je tvořena operacemi, které transformují molekulu do stavu nerozlišitelného od původního

Jaké prvky mohou tvořit grupu symetrií

- identita e

Jaké prvky mohou tvořit grupu symetrií

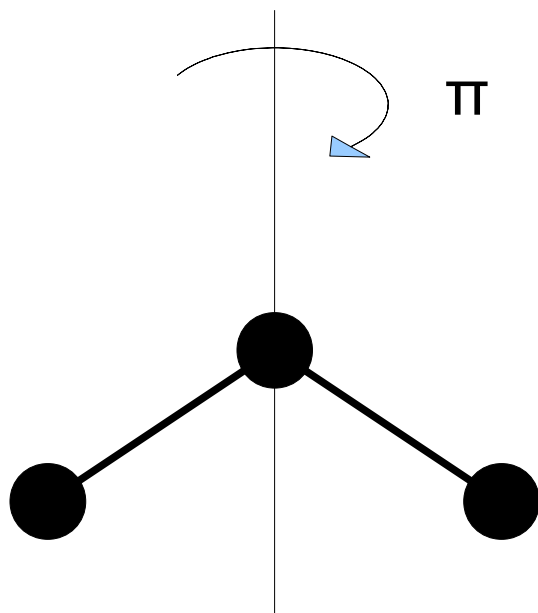
- identita e
- rotace kolem osy o úhel $2\pi/n$ C_n

Jaké prvky mohou tvořit grupu symetrií

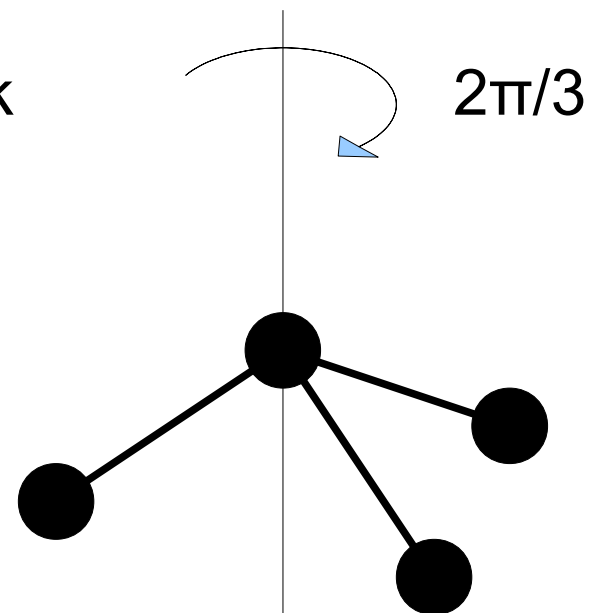
- identita e
- rotace kolem osy o úhel $2\pi/n$ C_n

př.

voda
 C_2



amoniak
 C_3



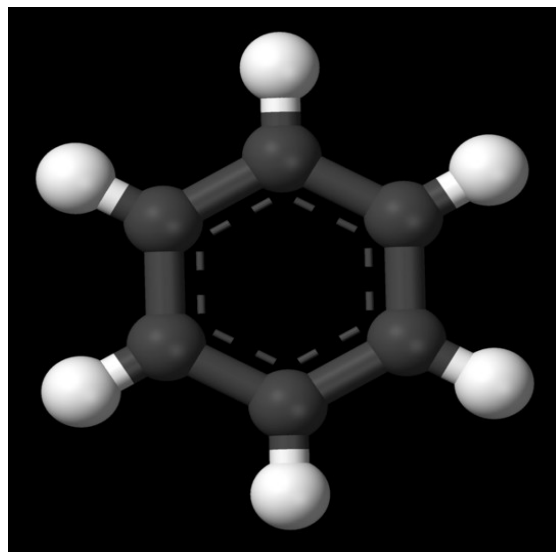
Jaké prvky mohou tvořit grupu symetrií

- identita e
- rotace kolem osy o úhel $2\pi/n$ C_n
- zrcadlení σ

Jaké prvky mohou tvořit grupu symetrií

- identita e
- rotace kolem osy o úhel $2\pi/n$ C_n
- zrcadlení σ
- středová inverze i

př. benzen



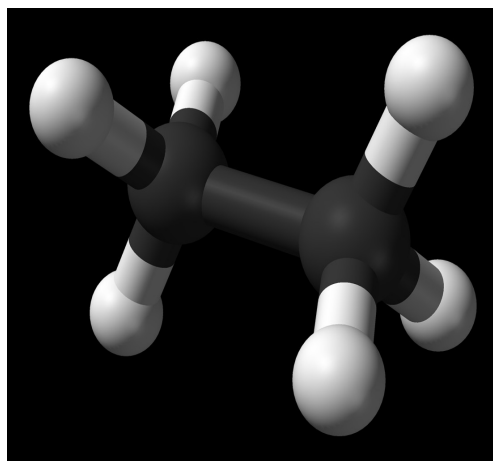
Jaké prvky mohou tvořit grupu symetrií

- identita e
- rotace kolem osy o úhel $2\pi/n$ C_n
- zrcadlení σ
- středová inverze i
- nevlastní rotace S_n

rotace o $2\pi/n$ následovaná zrcadlením

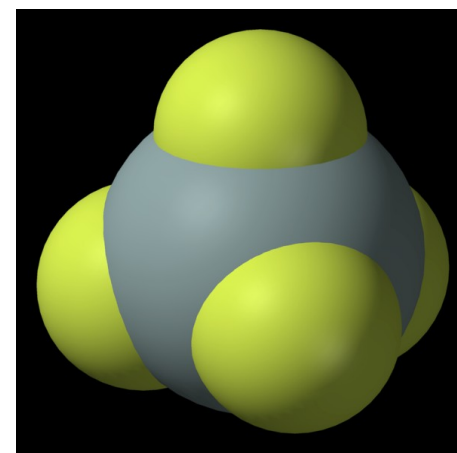
př. ethan

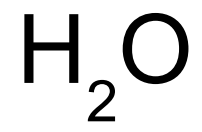
S_6



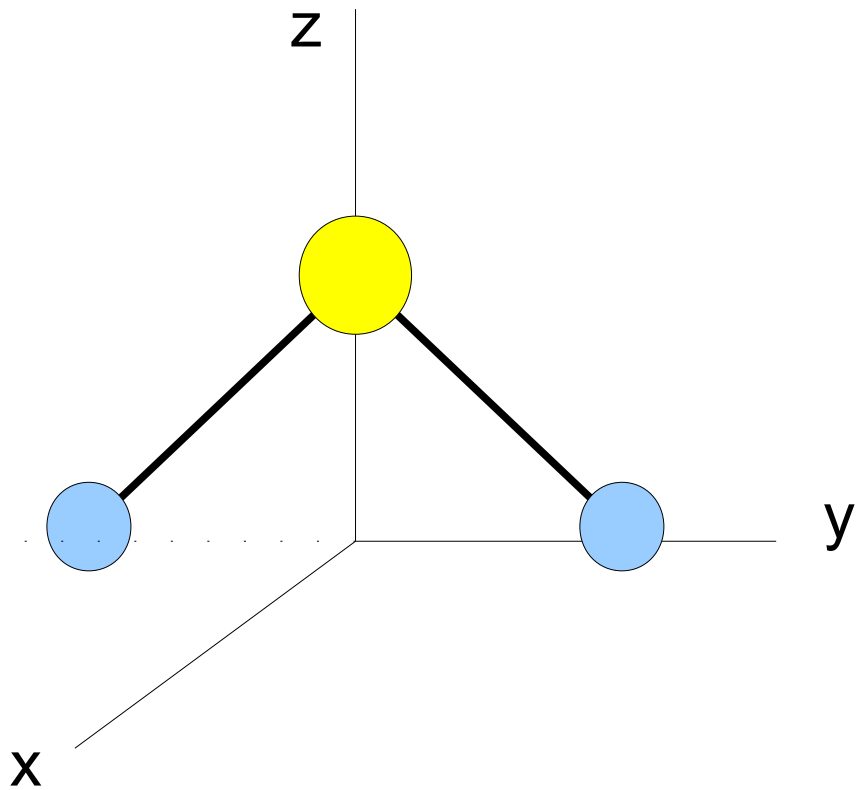
SiF_4

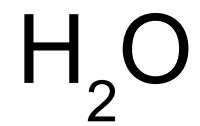
S_4



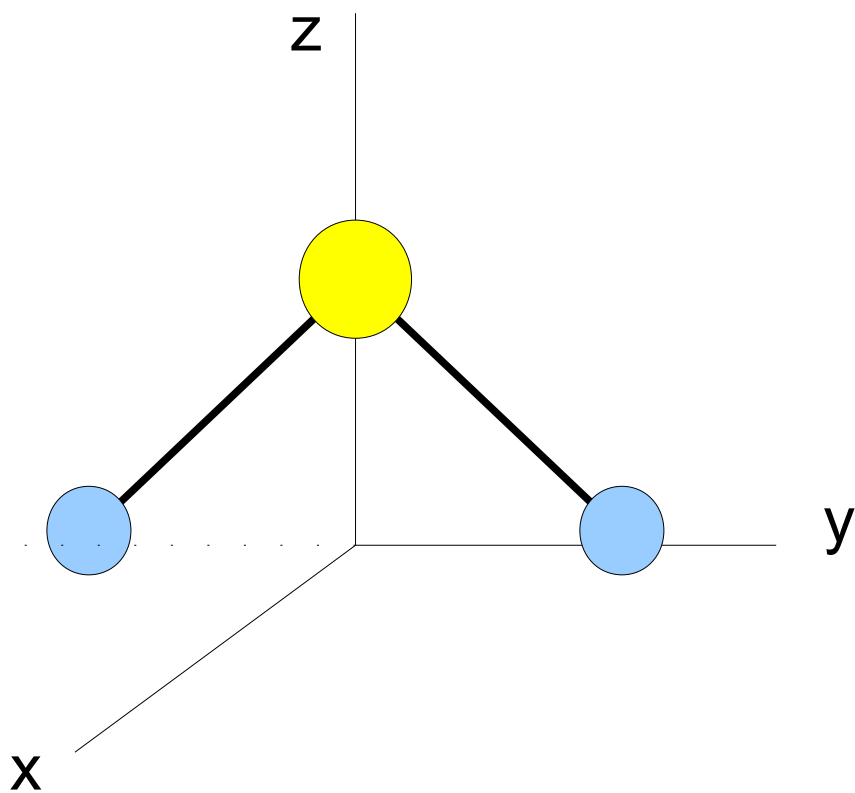


$e \quad C_2 \quad \sigma_{xz} \quad \sigma_{yz} \quad \dots \quad C_{2v}$

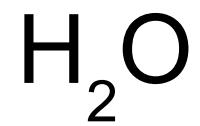




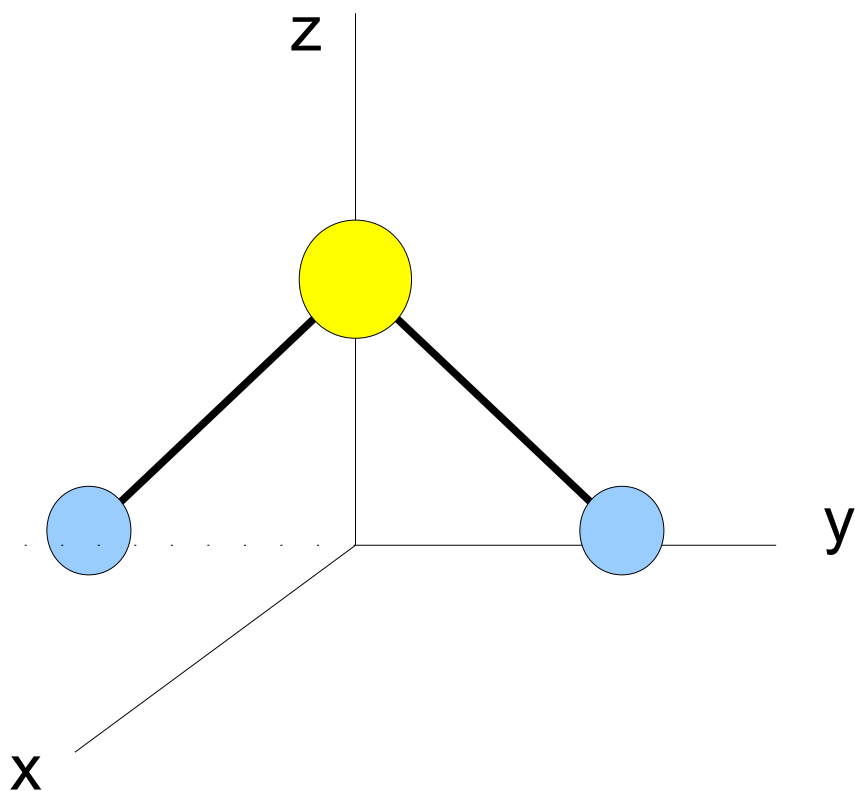
$e \quad C_2 \quad \sigma_{xz} \quad \sigma_{yz} \quad \dots \quad C_{2v}$



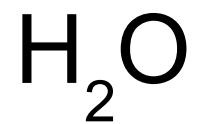
	e	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
e				
C_2				
σ_{xz}				
σ_{yz}				



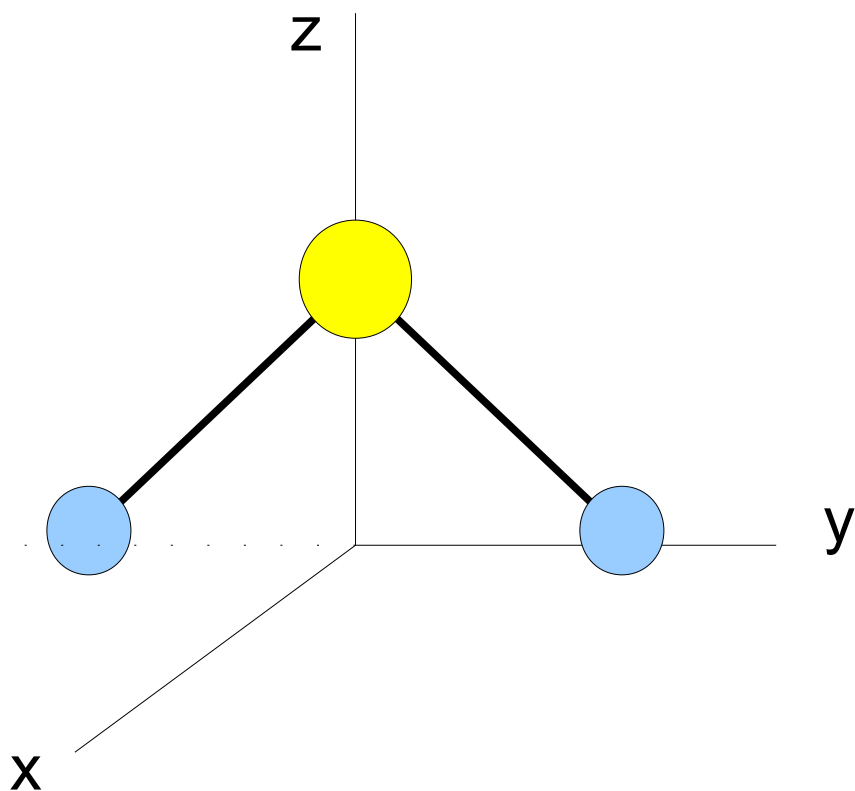
e C₂ σ_{xz} σ_{yz} C_{2v}



	e	C ₂	σ _{xz}	σ _{yz}
e	e	C ₂	σ _{xz}	σ _{yz}
C ₂	C ₂			
σ _{xz}	σ _{xz}			
σ _{yz}	σ _{yz}			



e C₂ σ_{xz} σ_{yz} C_{2v}



	e	C ₂	σ _{xz}	σ _{yz}
e	e	C ₂	σ _{xz}	σ _{yz}
C ₂	C ₂	e		
σ _{xz}	σ _{xz}		e	
σ _{yz}	σ _{yz}			e

Jak zaplníme zbývající políčka?

	e	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
e	e	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
C_2	C_2	e		
σ_{xz}	σ_{xz}		e	
σ_{yz}	σ_{yz}			e

Jak zaplníme zbývající políčka?

využijeme maticové reprezentace

$$C_2 \circ \sigma_{xz} =$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = i$$

	e	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
e	e	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
C_2	C_2	e		
σ_{xz}	σ_{xz}		e	
σ_{yz}	σ_{yz}			e

Jak zaplníme zbývající políčka?

využijeme maticové reprezentace

$$C_2 \circ \sigma_{xz} = \sigma_{yz}$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

	e	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
e	e	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
C_2	C_2	e	σ_{yz}	
σ_{xz}	σ_{xz}		e	
σ_{yz}	σ_{yz}			e

Jak zaplníme zbývající políčka?

využijeme maticové reprezentace

$$C_2 \circ \sigma_{xz} = \sigma_{yz}$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$C_2 \circ \sigma_{yz} = \sigma_{xz}$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

	e	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
e	e	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
C_2	C_2	e	σ_{yz}	σ_{xz}
σ_{xz}	σ_{xz}		e	C_2
σ_{yz}	σ_{yz}			e

Jak zaplníme zbývající políčka?

využijeme maticové reprezentace

$$C_2 \circ \sigma_{xz} = \sigma_{yz}$$

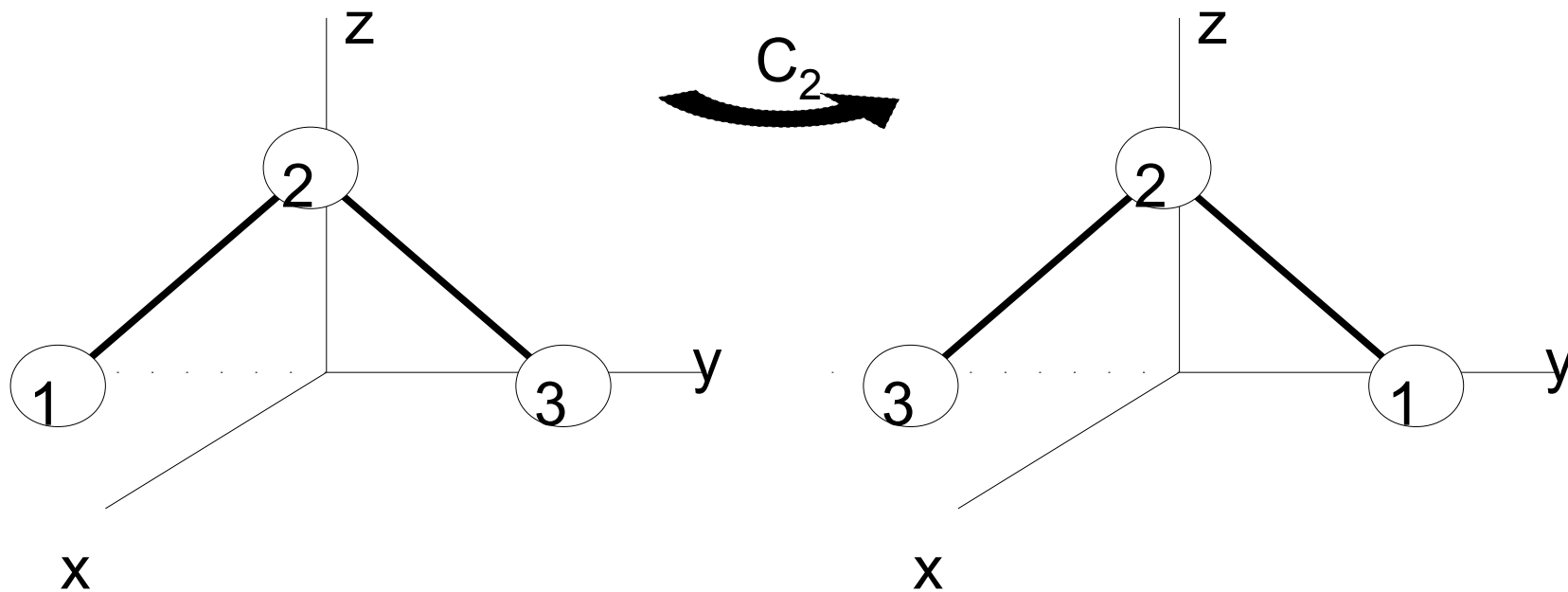
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$C_2 \circ \sigma_{yz} = \sigma_{xz}$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

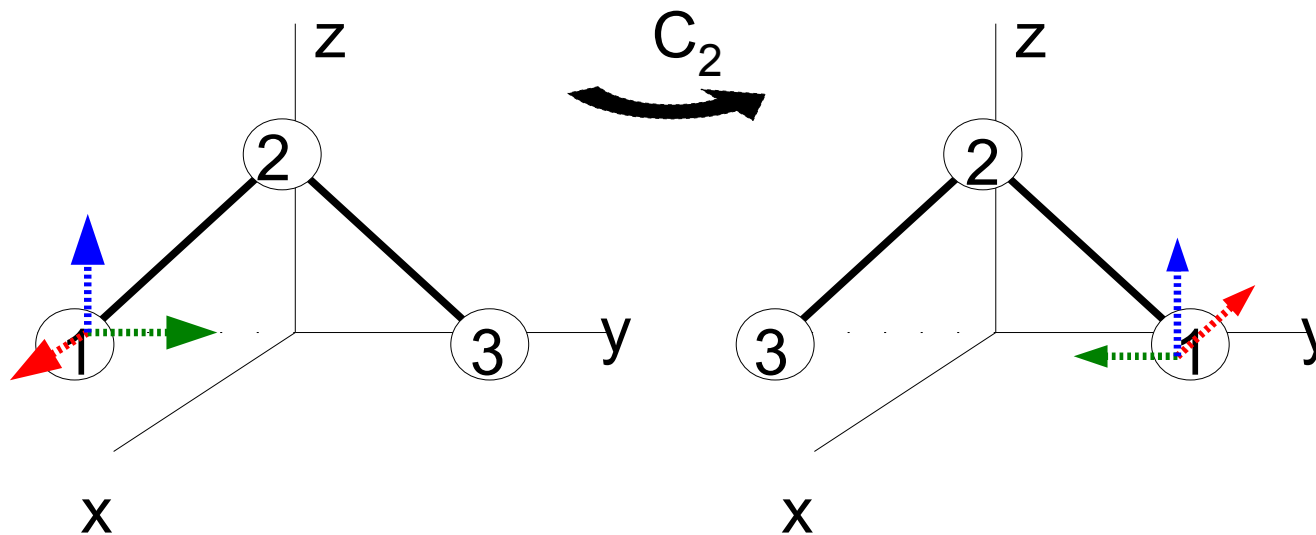
	e	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
e	e	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
C_2	C_2	e	σ_{yz}	σ_{xz}
σ_{xz}	σ_{xz}	σ_{yz}	e	C_2
σ_{yz}	σ_{yz}	σ_{xz}	C_2	e

někdy je výhodné zavést $3N$ rozměrný prostor, $N =$ počet atomů
př.



někdy je výhodné zavést $3N$ rozměrný prostor, $N = \text{počet atomů}$

př.

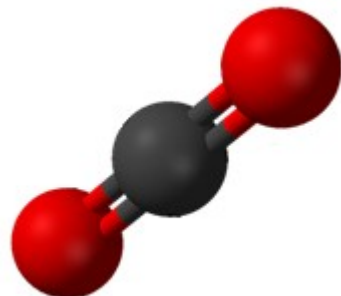


C_2

		-1
	-1	-1
		1
-1		
	-1	
		1

Některé další skleníkové molekuly

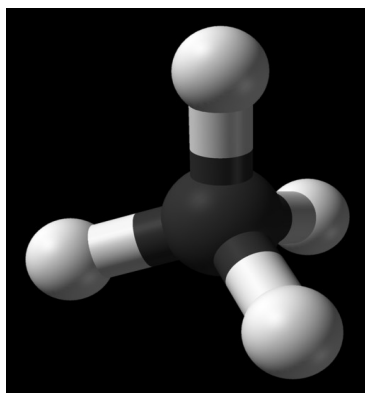
- CO₂



grupa D_{∞h}

e, 2C_∞, ∞σ, i, 2S_∞, ∞C₂

- CH₄



grupa T_d

e, 8C₃, 6S₄, 6σ_d

Tabulka charakterů (pro H₂O)

$$T(g)a = \chi(g)a$$

$$T(h)a = \chi(h)a$$

$$\rightarrow T(gh)a = \chi(g)\chi(h)a = \chi(gh)a \quad \chi(g) = \pm 1$$

C_{2v}	e	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}	
A_1	1	1	1	1	z
A_2	1	1	-1	-1	Rz
B_1	1	-1	1	-1	x Ry
B_2	1	-1	-1	1	y Rx