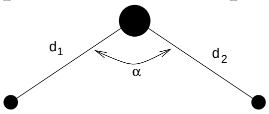
2.6. Gruppentheorie II

2.6.1 Reduzible Darstellungen von Gruppen, Basen

Reduzible Darstellungen der Punktgruppe $\mathbf{C_{2v}}$ am Beispiel $\mathbf{H_2O}$



I. Basis: interne Verschiebungsvektoren

❶ Matrix für E: $\mathbf{E}\tilde{x} = \tilde{x}$; tr(E)=3

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \alpha \end{pmatrix}$$

❷ Matrix für C_2; tr(C_2)) = 1

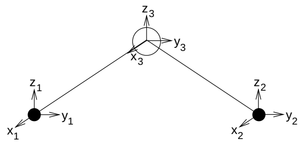
$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_2 \\ d_1 \\ \alpha \end{pmatrix}$$

❸ Matrix für σ_{xz}; tr(σ_{xz}) = 1

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_2 \\ d_1 \\ \alpha \end{pmatrix}$$

❹ Matrix für σ_{yz}; tr(σ_{yz}) = 3

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \alpha \end{pmatrix}$$



II. Basis: kartesische Verschiebungsvektoren

❶ Matrix für E: $\mathbf{E}\tilde{x} = \tilde{x}$; tr(E)=9

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

❷ Matrix für C_2; tr(C_2)) = -1

$$\begin{pmatrix} -1&0&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&-1&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&1&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&-1&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&-1&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&0&1 \\ 0&0&0&-1&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&-1&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&1&0&0&0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^{O} \\ y^{O} \\ z^{O} \\ x^{H1} \\ y^{H1} \\ z^{H1} \\ x^{H2} \\ y^{H2} \\ z^{H2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x^{O} \\ -y^{O} \\ z^{O} \\ -x^{H2} \\ -y^{H2} \\ z^{H2} \\ -x^{H1} \\ -y^{H1} \\ z^{H1} \end{pmatrix}$$

❸ Matrix für σ_{xz}; tr(σ_{xz}) = 1

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

❹ Matrix für σ_{yz}; tr(σ_{yz}) = 3

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

III. Basis: Atomorbitale

❶ Matrix für E (tr(E)=6)

$$\begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0 \\ 0&1&0&0&0&0 \\ 0&0&1&0&0&0 \\ 0&0&0&1&0&0 \\ 0&0&0&0&1&0 \\ 0&0&0&0&0&1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1s(H1) \\ 1s(H2) \\ 2s(O) \\ 2p_z(O) \\ 2p_x(O) \\ 2p_y(O) \end{pmatrix}$$

❷ Matrix für C_2 (tr(C_2)=0)

$$\begin{pmatrix} 0&1&0&0&0&0 \\ 1&0&0&0&0&0 \\ 0&0&1&0&0&0 \\ 0&0&0&1&0&0 \\ 0&0&0&0&-1&0 \\ 0&0&0&0&0&-1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1s(H1) \\ 1s(H2) \\ 2s(O) \\ 2p_z(O) \\ 2p_x(O) \\ 2p_y(O) \end{pmatrix}$$

❸ Matrix für $\sigma_v(xz)$ (tr($\sigma_v(xz)$)=2)

$$\begin{pmatrix} 0&1&0&0&0&0 \\ 1&0&0&0&0&0 \\ 0&0&1&0&0&0 \\ 0&0&0&1&0&0 \\ 0&0&0&0&1&0 \\ 0&0&0&0&0&-1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1s(H1) \\ 1s(H2) \\ 2s(O) \\ 2p_z(O) \\ 2p_x(O) \\ 2p_y(O) \end{pmatrix}$$

❹ Matrix für $\sigma_v(yz)$ (tr($\sigma_v(yz)$)=4)

$$\begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0 \\ 0&1&0&0&0&0 \\ 0&0&1&0&0&0 \\ 0&0&0&1&0&0 \\ 0&0&0&0&-1&0 \\ 0&0&0&0&0&1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1s(H1) \\ 1s(H2) \\ 2s(O) \\ 2p_z(O) \\ 2p_x(O) \\ 2p_y(O) \end{pmatrix}$$