

F4110 Kvantová fyzika atomárních soustav

## Teorie grup a molekuly

Kateřina Zuzaňáková, 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  $2\pi/n$   $C_n$

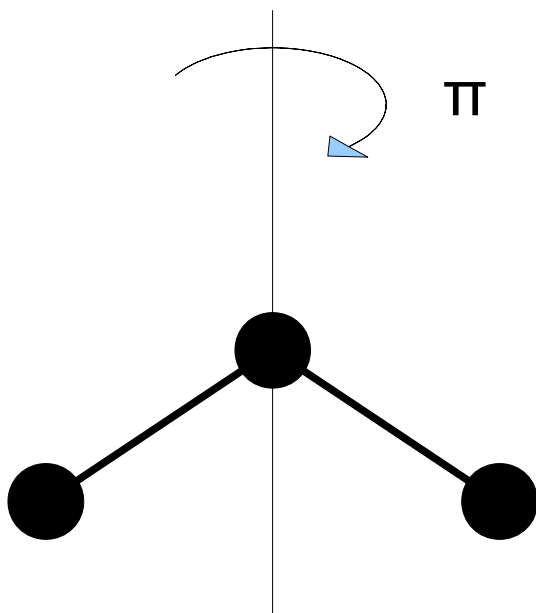


# Jaké prvky mohou tvořit grupu symetrií

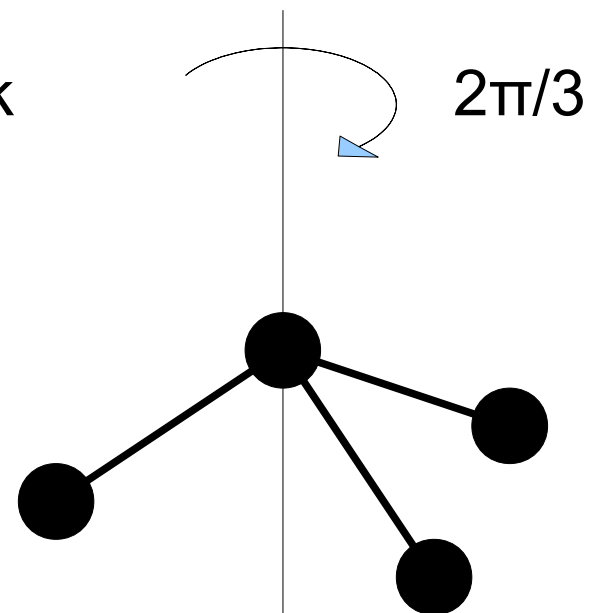
- identita  $e$
- rotace kolem osy o úhel  $2\pi/n$   $C_n$

př.

voda  
 $C_2$



amoniak  
 $C_3$



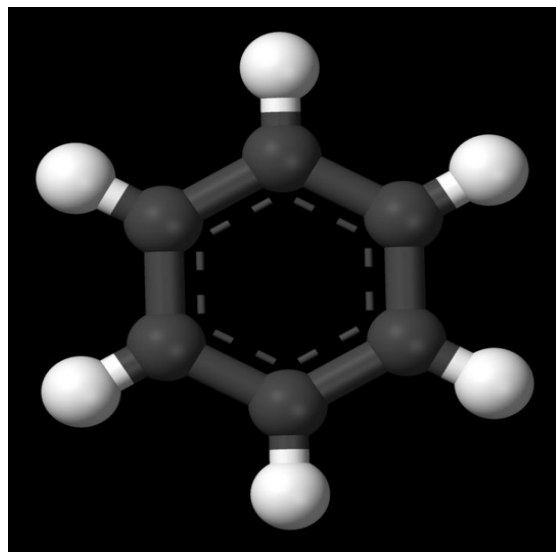
# Jaké prvky mohou tvořit grupu symetrií

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

# Jaké prvky mohou tvořit grupu symetrií

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

př. benzen



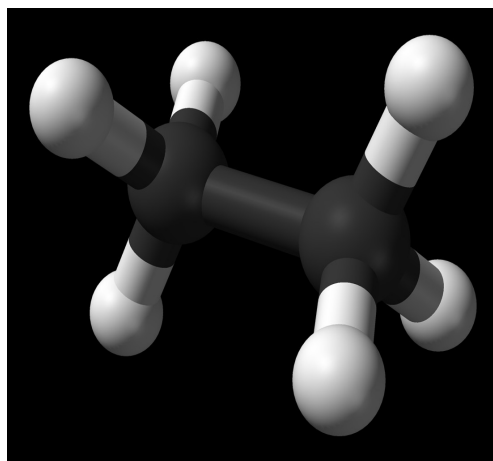
# Jaké prvky mohou tvořit grupu symetrií

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

rotace o  $2\pi/n$  následovaná zrcadlením

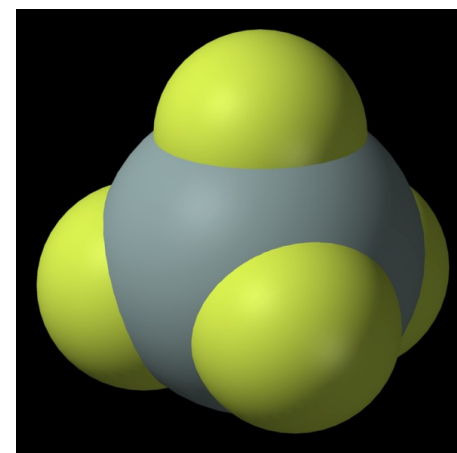
př. ethan

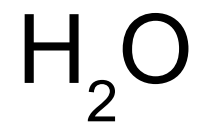
$S_6$



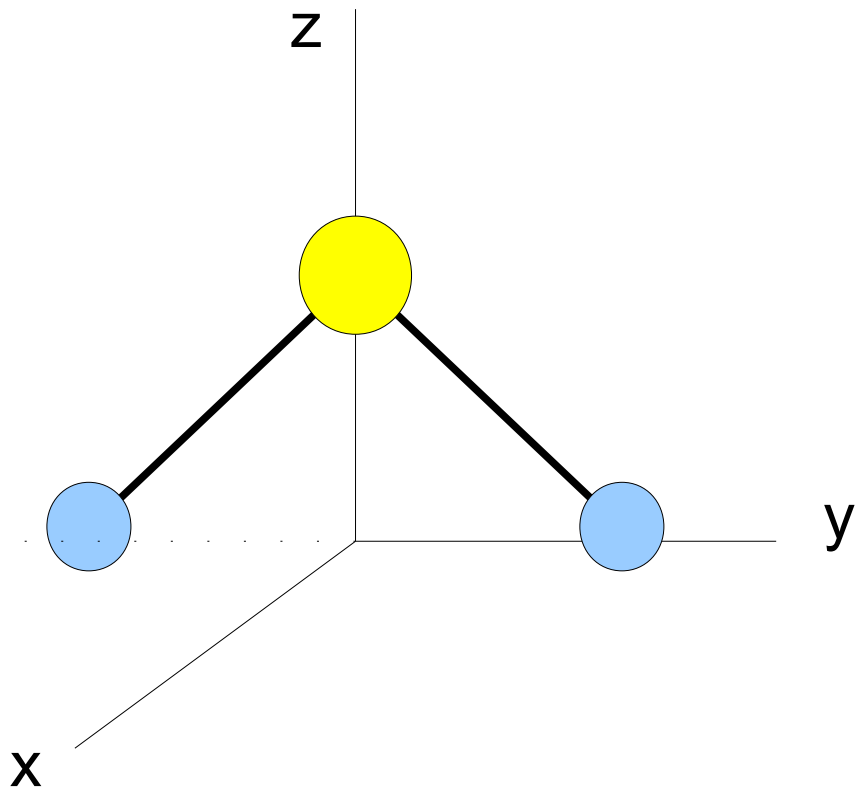
$\text{SiF}_4$

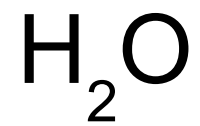
$S_4$



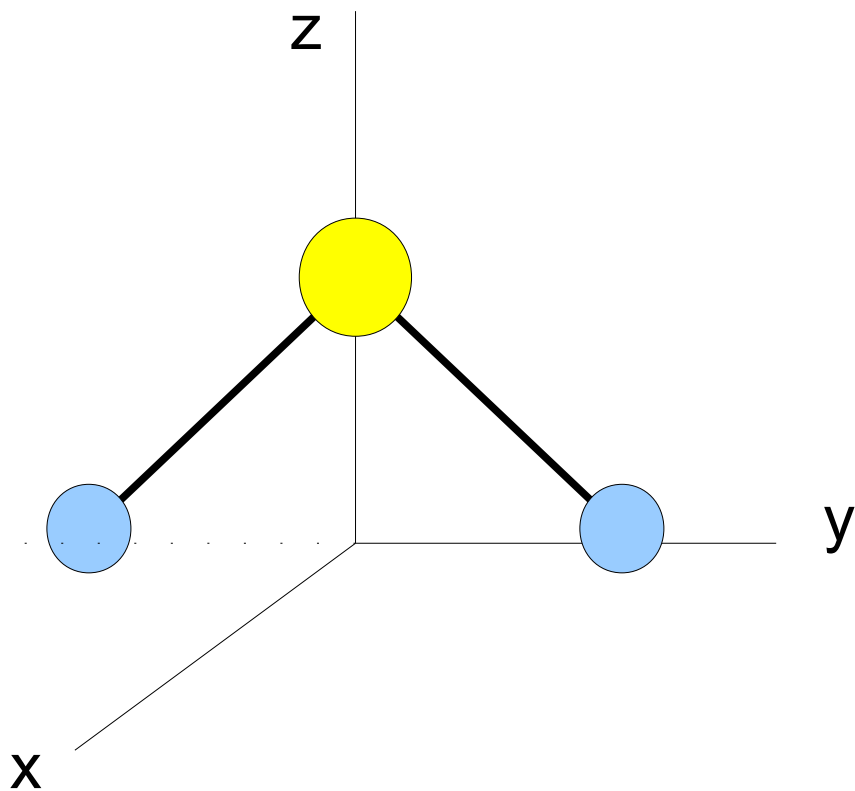


$e \quad C_2 \quad \sigma_{xz} \quad \sigma_{yz} \quad \dots \quad C_{2v}$

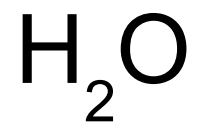




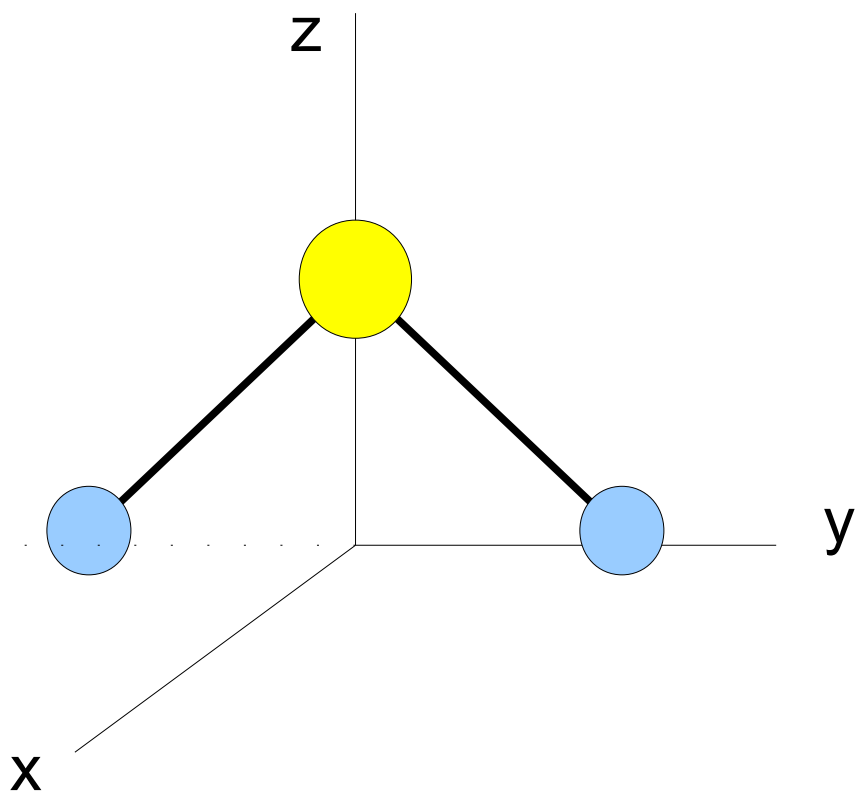
e C<sub>2</sub> σ<sub>xz</sub> σ<sub>yz</sub> ..... C<sub>2v</sub>



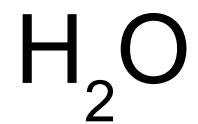
	e	C <sub>2</sub>	σ <sub>xz</sub>	σ <sub>yz</sub>
e				
C <sub>2</sub>				
σ <sub>xz</sub>				
σ <sub>yz</sub>				



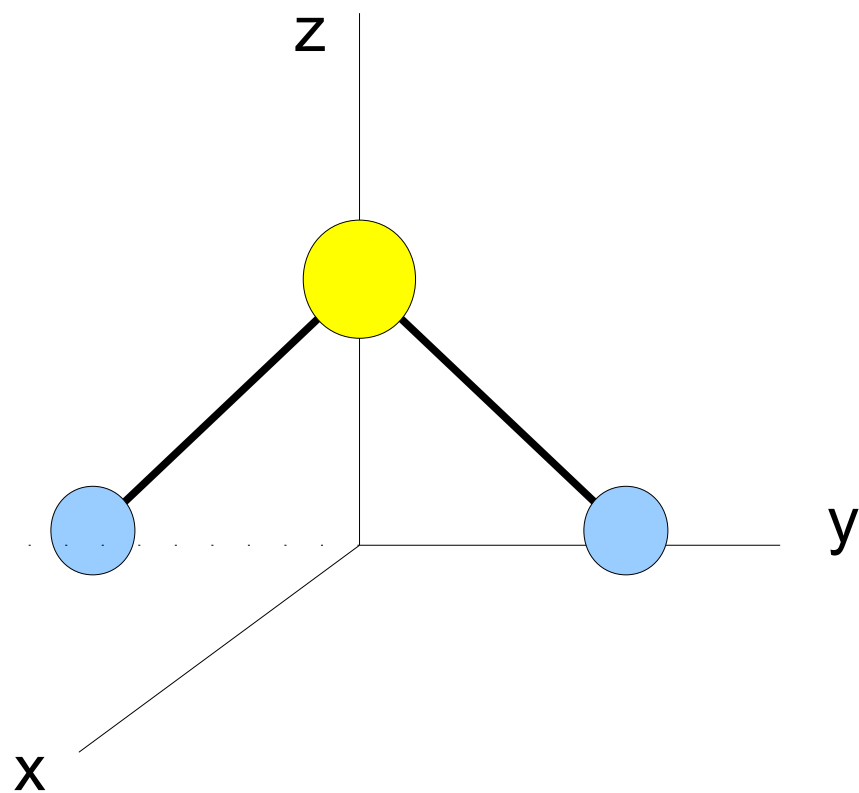
e C<sub>2</sub> σ<sub>xz</sub> σ<sub>yz</sub> ..... C<sub>2v</sub>



	e	C <sub>2</sub>	σ <sub>xz</sub>	σ <sub>yz</sub>
e	e	C <sub>2</sub>	σ <sub>xz</sub>	σ <sub>yz</sub>
C <sub>2</sub>	C <sub>2</sub>			
σ <sub>xz</sub>	σ <sub>xz</sub>			
σ <sub>yz</sub>	σ <sub>yz</sub>			



e C<sub>2</sub> σ<sub>xz</sub> σ<sub>yz</sub> ..... C<sub>2v</sub>



	e	C <sub>2</sub>	σ <sub>xz</sub>	σ <sub>yz</sub>
e	e	C <sub>2</sub>	σ <sub>xz</sub>	σ <sub>yz</sub>
C <sub>2</sub>	C <sub>2</sub>	e		
σ <sub>xz</sub>	σ <sub>xz</sub>		e	
σ <sub>yz</sub>	σ <sub>yz</sub>			e



Jak zaplníme zbývající políčka?

	$e$	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
$e$	$e$	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
$C_2$	$C_2$	$e$		
$\sigma_{xz}$	$\sigma_{xz}$		$e$	
$\sigma_{yz}$	$\sigma_{yz}$			$e$

# 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	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
e	e	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
$C_2$	$C_2$	e		
$\sigma_{xz}$	$\sigma_{xz}$		e	
$\sigma_{yz}$	$\sigma_{yz}$			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	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
e	e	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
$C_2$	$C_2$	e	$\sigma_{yz}$	
$\sigma_{xz}$	$\sigma_{xz}$		e	
$\sigma_{yz}$	$\sigma_{yz}$			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	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
e	e	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
$C_2$	$C_2$	e	$\sigma_{yz}$	$\sigma_{xz}$
$\sigma_{xz}$	$\sigma_{xz}$		e	$C_2$
$\sigma_{yz}$	$\sigma_{yz}$			e

# Jak zaplníme zbývající políčka?

využijeme maticové reprezentace

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

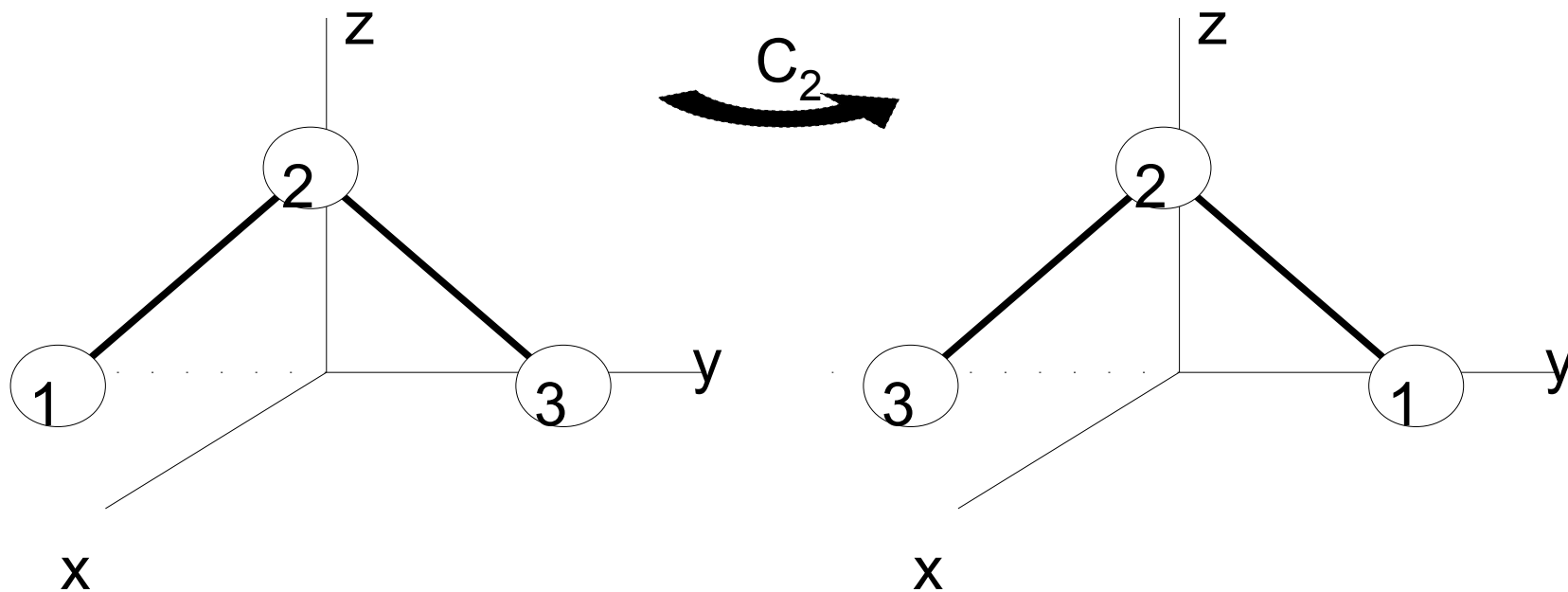
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

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

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

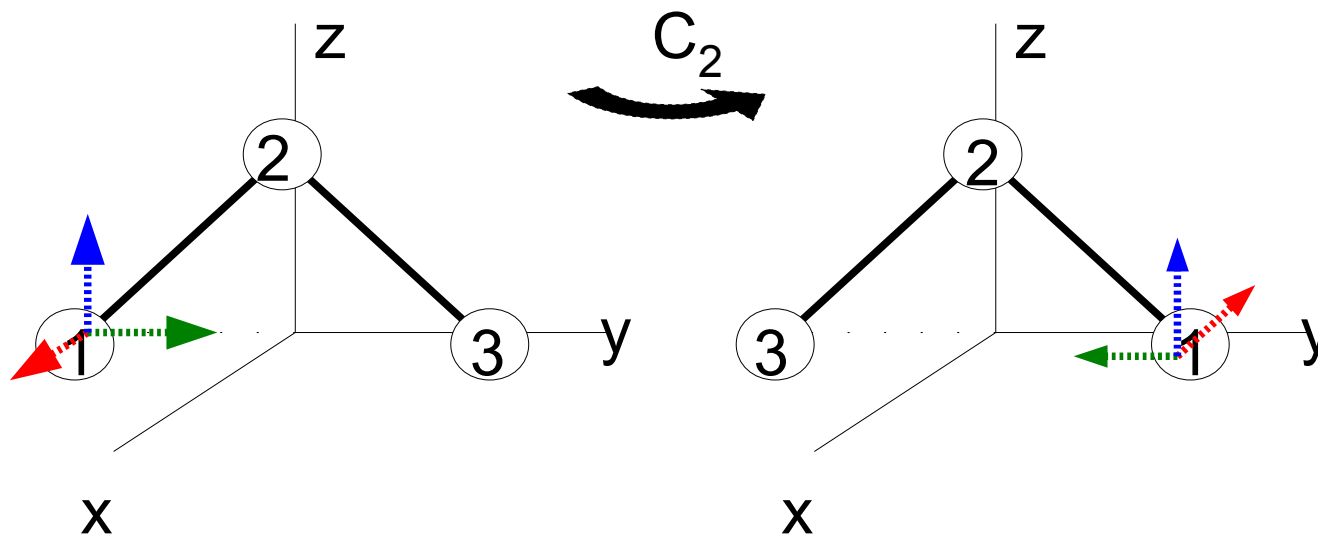
	e	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
e	e	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
$C_2$	$C_2$	e	$\sigma_{yz}$	$\sigma_{xz}$
$\sigma_{xz}$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$	e	$C_2$
$\sigma_{yz}$	$\sigma_{yz}$	$\sigma_{xz}$	$C_2$	e

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



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

př.

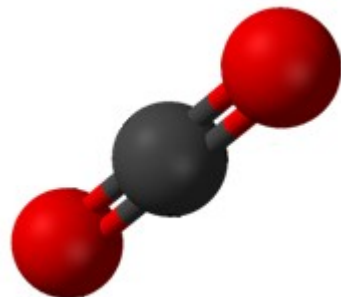


$C_2$

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

# Některé další skleníkové molekuly

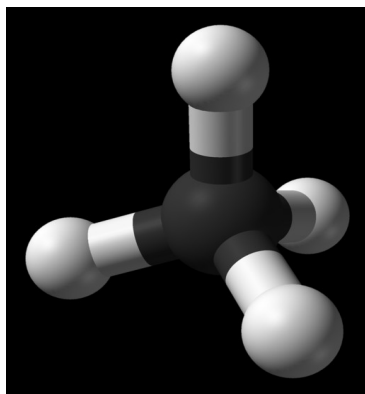
- $\text{CO}_2$



grupa  $D_{\infty h}$

$e, 2C_{\infty}, \infty\sigma, i, 2S_{\infty}, \infty C_2$

- $\text{CH}_4$



grupa  $T_d$

$e, 8C_3, 6S_4, 6\sigma_d$





# Tabulka charakterů (pro H<sub>2</sub>O)

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

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

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

$C_{2v}$	e	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$	
$A_1$	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