Beispiel

Oben haben wir die Drehung C_n dargestellt durch eine 3×3 Matrix M_{C_n}. Hätte sich die gleiche Drehung in einem verdrehten Koordinatensystem dargestellt, so wäre die gesamte Matrix gefüllt.

Durch geeignete Transformation kann die Darstellung vereinfacht werden.

Kann sie nicht weiter vereinfacht werden, spricht man von einer irreduziblen Darstellung.

Woher weiß ich, ob ich fertig bin?

Theorem (ohne Bew.)

Die Summe der Quadrate der Charaktere ist für jede irreduzible Darstellung gleich der Ordnung der Gruppe

$$\sum_{M \in G} (\text{spur } M)^2 = \text{ord}((G, \cdot))$$

$$M \in G$$

$$\text{Spur}(M) = \sum_i M_{ii}$$

$$\text{ord}((G, \cdot)) = \# G$$, Zahl der Symmetrieoperationen

Die Dimensionalität einer irreduziblen Darstellung entspricht dem Entartungsgrad des Systems.

(= Charakter der Einheitsoperation = dim(G))

Beispiel 1D Darstellung

d.h. Zahl $\Rightarrow$ $\psi = \pm \psi'$

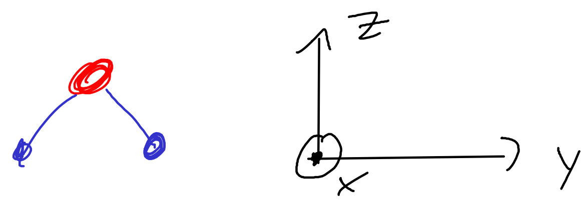
für alle Symmetrieoperationen der Gruppe

$\hat{=}$ keine Entartung

2D Darstellung, d.h. 2×2 -Matrizen

$\Rightarrow$ 2fache Entartung

Beispiel H_2O Molekül (Gruppe C_{2v})



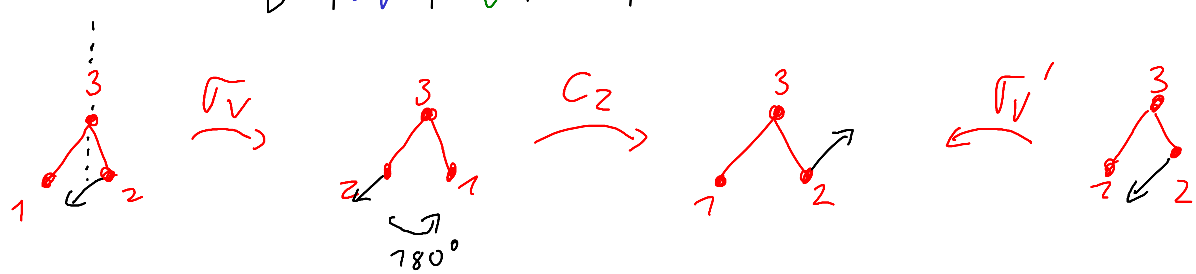
Symmetrieoperationen: I, C_2, σ_v (xz), σ_v' (zy)

Produkttafel:

erst

C_{2v}	I	C_2	σ_v	σ_v'
I	I	C_2	σ_v	σ_v'
C_2	C_2	I	σ_v'	σ_v
σ_v	σ_v	σ_v'	I	C_2
σ_v'	σ_v'	σ_v	C_2	I

dann



Jede Darstellung der Gruppe muss nur die Produkttafel erfüllen.

Darstellung (Reduzibel) durch 3 x 3 Matrizen

Drehung um z-Achse (C_2)

Spur

$$M_{C_2} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \overset{180^\circ}{=} \begin{pmatrix} \boxed{-1} & 0 & 0 \\ 0 & \boxed{-1} & 0 \\ 0 & 0 & \boxed{1} \end{pmatrix} \qquad -1$$

Spiegelung

$$M_{\sigma_v} = \begin{pmatrix} \boxed{1} & 0 & 0 \\ 0 & \boxed{-1} & 0 \\ 0 & 0 & \boxed{1} \end{pmatrix} \qquad 1$$

Spiegelung

$$M_{\sigma_v'} = \begin{pmatrix} \boxed{-1} & 0 & 0 \\ 0 & \boxed{1} & 0 \\ 0 & 0 & \boxed{1} \end{pmatrix} \qquad 1$$

auch 3 Blöcke

Identität

$$M_I = \begin{pmatrix} \boxed{1} & 0 & 0 \\ 0 & \boxed{1} & 0 \\ 0 & 0 & \boxed{1} \end{pmatrix} \qquad 3$$

3 Blöcke 1x1 Matrix

$1 + 1 + 1 + 9$

Ordnung ist 4 (4 Operationen) ist reduzibel! → $= 12$

irreduzible Darstellung:

(alle Darstellungen der Gruppe 1 dim.,

bei 1x1 Matrix ist Spur $M = M$)

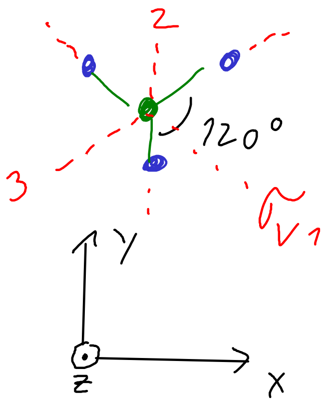
daher identisch mit Charaktertafel

C_{2v}	I	C_2	σ_v	σ_v'	
Γ_1	1	1	1	1	z / $x^2+y^2+z^2$ /
Γ_2	1	1	-1	-1	xy
Γ_3	1	-1	1	-1	x
Γ_4	1	-1	-1	1	y

Die Summe der quadrate der Charaktere ist 4, für alle Darstellung

⇒ keine Entartung

Beispiel NH_3 (Ammoniak) C_{3v}



N nicht in der Ebene

erst

dann

C_{3v}	I	C_3	C_3^2	σ_{v1}	σ_{v2}	σ_{v3}
I	I	C_3	C_3^2	σ_{v1}	σ_{v2}	σ_{v3}
C_3	C_3	C_3^2	I	σ_{v3}	σ_{v1}	σ_{v2}
C_3^2	C_3^2	I	C_3	σ_{v2}	σ_{v3}	σ_{v1}
σ_{v1}	σ_{v1}	σ_{v2}	σ_{v3}	I	C_3	C_3^2
σ_{v2}	σ_{v2}	σ_{v2}	σ_{v1}	σ_{v3}	I	C_3
σ_{v3}	σ_{v3}	σ_{v1}	σ_{v2}	C_3	C_3^2	I

← in der Spalte & Zeile kommt jedes genau 1 mal vor, da sonst die inverse Operation nicht mehr eindeutig ist.

(Reduzible) Darstellung durch 3×3 Matrizen

$$M_{C_3} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \boxed{1} \end{pmatrix}$$

2×2 Block

1×1 Block

$$M_{C_3^2} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{5} & 0 \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

gedrehte Spiegelung:

$$M_{\sigma_{v1}} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \boxed{1} \end{pmatrix} \qquad M_{\sigma_{v2}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$(y\,z)$

$$M_{\sigma_3} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \boxed{1} \end{pmatrix} \qquad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Ordnung $= 6$, $\sum (\text{Spur } M)^2 = 12$

irreduzible Darstellung: Menge der 2×2 Darstellungen
und die 1 - Darstellung

Charaktertafel

C_{3v}	I	C_3	C_3^2	σ_{v1}	σ_{v2}	σ_{v3}	
Γ_1	1	1	1	1	1	1	$x^2+y^2+z^2$, z
Γ_2	1	1	1	−1	−1	−1	R_z Drehung um z-Achse
Γ_3	2	−1	−1	0	0	0	Charaktere der 2×2 Blöcke (x, y)

Es gibt nicht entartete und zweifach entartete Energieniveaus.