Quantum Chemie, Werkcollege week 5

Vraag 1: Groepen

1a. Ga na dat de spiegelingen en rotaties in C_{2v} en C_{3v} onder vermenigvuldiging in de groep blijven, dus:

$$C_2\sigma_v = \sigma_v' \in C_{2v},$$
$$C_3\sigma_1 = \sigma_2 \in C_{3v}.$$

1b. Ga na dat C_{2v} een abelse groep is, maar C_{3v} niet.

1c. Bepaal de 3 (conjungatie) klassen in C_{3v}.

Vraag 2: Representaties

$$\hat{g}\vec{e_i} = \sum_j \vec{e_j}\mathbf{D}_{j,i}(g)$$

2a. Laat zien dat

$$\mathbf{D}(ab) = \mathbf{D}(a)\mathbf{D}(b),$$

met $\mathbf{D}(g)$ een representatie van g op een (eindige) lineaire ruimte V.

2b. Druk, voor een representatie $\mathbf{D}(g)$ van g op een inproductruimte W met een basis $\{\vec{e_1}, \vec{e_2}, ..., \vec{e_n}\}$, $\mathbf{D}$ uit in $\mathbf{S}$ met $\mathbf{S}_{ij} = \langle \vec{e_i}, \vec{e_j} \rangle$ en $\mathbf{G}$ met $\mathbf{G}_{ij} = \langle \vec{e_i}, \hat{g}\vec{e_j} \rangle$.

2c. Ga na dat de representatie $\mathbf{D}(g)$ onder de basistransformatie

$$\phi_i = \sum_j \chi_j C_{j,i}$$

transformeert met:

$$\mathbf{D} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}'\mathbf{C}$$

Zonder een inproduct te gebruiken.

Vraag 3: Spiegelingen en rotaties

$\mathbf{U} = [\mathbf{u_1}\mathbf{u_2}\mathbf{u_3}]$ is unitair.

3a. Ga na dat de spiegeling in het vlak loodrecht op de normaal $\mathbf{n}$ gegeven wordt door:

$$\sigma(\mathbf{n}) = \mathbb{1} - 2\mathbf{n}\mathbf{n}^\dagger.$$

3b. Laat zien dat

$$\mathbf{U}\sigma(\mathbf{n})\mathbf{U}^\dagger = \sigma(\mathbf{U}\mathbf{n})$$

3c. Ga na dat in $\mathbb{R}^3$ geldt dat

$$\mathbf{u_i} \times \mathbf{u_j} = \sum_k \epsilon_{ijk} \mathbf{u_k} \det \mathbf{U}.$$

3d. Gegeven $\mathbf{a} = \mathbf{n}\mathbf{n}^\dagger \mathbf{x}$ de projectie van $\mathbf{x}$ op $\mathbf{n}$, de projectie op het vlak loodrecht op $\vec{n}$, $\mathbf{b} = \mathbf{x} - \mathbf{a}$ en $\mathbf{c} = \mathbf{n} \times \mathbf{b}$. Dan wordt de rotatie van de vector $\mathbf{x}$ om $\mathbf{n}$ gegeven door:

$$\mathbf{R}(\mathbf{n}, \phi) = \mathbf{a} + \cos(\phi)\mathbf{b} + \sin(\phi)\mathbf{c}.$$

Ga dit na, door een tekening van de situatie te maken. Laat vervolgens zien dat:

$$\mathbf{R}(\mathbf{n}, \phi) = \left(\mathbf{n}\mathbf{n}^\dagger + \cos(\phi)\left(\mathbb{1} - \mathbf{n}\mathbf{n}^\dagger\right)\right)\mathbf{x} + \sin(\phi)\mathbf{n} \times \mathbf{x}.$$

3e. Laat zien dat

$$\mathbf{U}\mathbf{R}(\mathbf{n}, \phi)\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{R}(\mathbf{U}\mathbf{n}, \det(\mathbf{U})\phi).$$