

ΘΕΩΡΙΑ ΟΜΑΔΩΝ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

Επαναληπτική Άσκηση

Στο μόριο H_2O το άτομο του οξυγόνου σχηματίζει γωνία (104.5°) με τα δύο άτομα υδρογόνου. Θεωρούμε τα δύο άτομα υδρογόνου στον άξονα x και το άτομο του οξυγόνου στον άξονα z .

1. Να βρεθούν οι μετασχηματισμοί συμμετρίας που αφήνουν το μόριο αναλλοίωτο καθώς και οι πίνακες αυτών των μετασχηματισμών στο χώρο xyz .
2. Να καταστρωθεί ο πίνακας πολλαπλασιασμού και ναδειχθεί ότι οι μετασχηματισμοί αυτοί αποτελούν ομάδα. Είναι η ομάδα αβελιανή; Πώς ονομάζεται;
3. Να βρεθούν οι κλάσεις συζυγίας και ο πίνακας χαρακτήρων της ομάδας.
4. Χρησιμοποιώντας τον προβολικό τελεστή, να βρεθεί σύμφωνα με ποιες μη αναγώγιμες αναπαραστάσεις της ομάδας μετασχηματίζονται οι συνιστώσες της θέσης (x, y, z) και της στροφορμής (L_x, L_y, L_z) .
5. Να βρεθεί η συμμετρία των κανονικών τρόπων ταλάντωσης του H_2O .
6. Να βρεθούν οι πίνακες της αναπαράστασης με βάση τα τροχιακά $1s$ των ατόμων υδρογόνου και των τροχιακών $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ του ατόμου του οξυγόνου, για τους μετασχηματισμούς συμμετρίας του μορίου H_2O . Πώς ανάγεται η αναπαράσταση αυτή σε μη αναγώγιμες αναπαραστάσεις την ομάδα;
7. Από τα παραπάνω ατομικά τροχιακά, να κατασκευασθούν κυματοσυναρτήσεις του μορίου, στη βάση των οποίων ο χαμιλτονιανός πίνακας να είναι διαγώνιος κατά τμήματα.
8. Να βρεθούν οι κανόνες επιλογές σε οπτικές μεταβάσεις στο H_2O για πόλωση ακτινοβολίας κατά x .