

Faglig kontakt under eksamen:

Navn: Johannes Bremer

Tlf.: 93582 (95961698)

## **EKSAMEN I FAG DIF4984 SYMMETRI I FYSIKKEN**

Mandag 17. desember 2001

Tid: 0900 – 1400

Sensurfrist 30.01.02

Tillatte hjelpemidler: Type C, Rottmann: Matematisk formelsamling.  
Enkel lommekalkulator

Karaktertabeller er gitt i vedlegg 1.

## Oppgave 1

Side 2 av 3

a)

En reduserbar representasjon kan alltid skrives som en sum av irreducible representasjoner. En irreducible representasjon  $\alpha$  opptrer generelt  $q_\alpha$  ganger i summen. Bruk ortogonalitetsrelasjonen for karakterer og utled formelen

$$q_\alpha = \frac{1}{g} \sum_G \chi^\alpha(G)^* \chi(G).$$

b)

Finn karakterene til en representasjon  $\Gamma_{vi}$  som baseres på kartesiske forskyvningsvektorer for atomene i et fritt H<sub>2</sub>O-molekyl. (Se Vedlegg 1.)

c)

Skriv  $\Gamma_{vi}$  som en sum av irreducible representasjoner og gi en diskusjon av diagonaliseringsproblemet for beregning av vibrasjonsfrekvensene. Hvor mange vibrasjonsmoder har H<sub>2</sub>O-molekylet? (Merk: Beregning av basisfunksjoner kreves ikke her.)

d)

En alternativ representasjon  $\Gamma_{ei}$  for H<sub>2</sub>O-molekylet kan baseres på de to s-orbitalene til hydrogenatomene og p<sub>x</sub>-, p<sub>y</sub>-, og p<sub>z</sub>-orbitalene til oksygenatomet. Finn bidragene fra irreducible representasjoner til  $\Gamma_{ei}$ . Finn også de tilhørende basisfunksjonene.

e)

Bruk resultatene under c) til å diagonalisere Hamilton-operatoren og finn uttrykk for elektroniske energinivåer i H<sub>2</sub>O.

## Oppgave 2

a)

Hvordan ser karaktertabellen for inversjonsgruppen  $C_i = \{E, I\}$  ut?

I Vedlegg 1 er karaktertabellen for oktaedergruppene O og O<sub>h</sub> gjengitt. Hvilke generelle krav må være oppfylt for at uttrykket  $O_h = O \otimes C_i$  skal være gyldig?

I en kube er C<sub>3</sub>-aksene orientert slik at de faller sammen med diagonale speilplan  $\sigma_d$ . Finn retningen til C<sub>2</sub>'-aksene og vis at  $IC_2'I \equiv \sigma_d$ .

b)

CaF<sub>2</sub>-strukturen er kjennetegnet av at kalsiumatomer definerer et fcc-gitter. I hver enhetscelle har fluoratomene posisjoner (1/4, 1/4, 1/4) og (3/4, 3/4, 3/4) i forhold til kalsiumatomet som befinner seg i gitterpunktet (0, 0, 0). (Koordinatene er oppgitt som

fraksjoner av enhetscellelengden.) Gi argumenter for at sentrum i enhetscellen må ha full oktaedrisk symmetri  $O_h$ .

c)

En  $\text{CaF}_2$ -krystall dopes av  $\text{Ce}^{3+}$ -ioner. Det ene, ytre elektronet i et  $\text{Ce}^{3+}$ -ion er et 4f-elektron ( $\ell = 3$ ). Alle de andre elektronene i ionet befinner seg i lukkede skall. I det følgende skal alle spinn-effekter neglisjeres. Hva menes med at bølgefunksjonen for 4f-elektronet i et fritt  $\text{Ce}^{3+}$ -ion har negativ (ungerade) paritet?

d)

Eksperimentelt er det påvist at  $\text{Ce}^{3+}$ -ioner posisjonerer seg i sentrum av enhetscellen for  $\text{CaF}_2$ . Derved utsettes ionene for et svakt krystallfelt fra kalsium- og fluoratomene. Forklar hvorfor degenerasjonsgraden til  $\text{Ce}^{3+}$ -ionet oppheves. Hvorfor kan en ved beregning av energioppsplittingen begrense seg til gruppen O?

Karakteren til en representasjon som baseres på sfærisk harmoniske funksjoner  $Y_m^\ell(\theta, \varphi)$  er gitt ved

$$\chi^\ell(\alpha) = \frac{\sin[(\ell + 1/2)\alpha]}{\sin(\alpha/2)}$$

Bruk denne formelen og finn de nye energinivåene til  $\text{Ce}^{3+}$ .

e)

En nærmere undersøkelse viser at i noen av elementarcellene blir ett av fluoratomene fullstendig ionisert av  $\text{Ce}^{3+}$ -ionet. Forklar hvorfor krystallfeltet i disse cellene får  $C_{3v}$ -symmetri. Hvorfor gir et av  $\sigma_d$ -speilplanene under a) i disse cellene opphav til  $\sigma_v$ -speilingsoperasjoner? Finn den tilhørende energioppsplittingen for  $\text{Ce}^{3+}$ -ionene.

Vedlegg 1 av 1

$C_{2v}$		Basis	$E$	$C_2$	$\sigma_y$	$\sigma_x$
$A_1$	$\Gamma_1$	$z, x^2, y^2, z^2$	1	1	1	1
$A_2$	$\Gamma_2$	$xy$	1	1	-1	-1
$B_1$	$\Gamma_3$	$x, xz$	1	-1	1	-1
$B_2$	$\Gamma_4$	$y, yz$	1	-1	-1	1

$O_h$	$E$	$8C_3$	$6C_4$	$3C_2$	$6C_2'$
$A_1$	1	1	1	1	1
$A_2$	1	1	-1	1	-1
$E$	2	-1	0	2	0
$T_1$	3	0	1	-1	-1
$T_2$	3	0	-1	-1	1

$O_h$		$E$	$6C_4$	$3C_2'$	$6C_2$	$8C_3$	$I$	$6IC_4$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$	$8IC_3$
$A_{1g}$	$\Gamma_1^+$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$A_{2g}$	$\Gamma_2^+$	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1
$E_g$	$\Gamma_3^+$	2	0	2	0	-1	2	0	2	0	-1
$T_{1g}$	$\Gamma_4^+$	3	1	-1	-1	0	3	1	-1	-1	0
$T_{2g}$	$\Gamma_5^+$	3	-1	-1	1	0	3	-1	-1	1	0
$A_{1u}$	$\Gamma_1^-$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
$A_{2u}$	$\Gamma_2^-$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
$E_u$	$\Gamma_3^-$	2	0	2	0	-1	-2	0	-2	0	1
$T_{1u}$	$\Gamma_4^-$	3	1	-1	-1	0	-3	-1	1	1	0
$T_{2u}$	$\Gamma_5^-$	3	-1	-1	1	0	-3	1	1	-1	0

$C_{3v}$		$E$	$2C_3$	$3\sigma_v$
$A_1$	$\Gamma_1$	1	1	1
$A_2$	$\Gamma_2$	1	1	-1
$E$	$\Gamma_3$	2	-1	0