Tehtävät palautetaan viimeistään keskiviikkona 13.10. Physicumin 2. kerroksen A-siiven aulassa olevaan laatikkoon.

1. Osoita että $D(a) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}$ generoi syklisen ryhmän Z_3 kaksiulotteisen esityksen (a ryhmän generaattori). Osoita että esitys on redusoitumaton *reaalikuntaisessa* vektoriavaruudessa mutta redusoituva kompleksikuntaisessa vektoriavaruudessa.

2. **Vesimolekyylin ominaisvärähtelyt**. (Tässä tehtävässä joudut tukeutumaan Jonesin kirjaan. Kirjaston referenssihyllystä löytyy ainakin yksi kappale, muistathan ottaa muutkin huomioon äläkä omi kirjaa itsellesi.)

Vesimolekyyli H_2O koostuu kahdesta vetyatomista ja yhdesta happiatomista, molekyyliä voidaan ajatella tasakylkisenä kolmiona jonka kärjessä on happiatomi. Tässä tehtävässä tarkastellaan molekyylin värähtelytiloja tasapainoaseman suhteen. Kuten mekaniikasta lienee tuttua, systeemin kaikki värähtelytilat voidaan palauttaa lineaariyhdistelmäksi systeemin ominaisvärähtelyistä (normaalimoodeista), jotka ovat systeemin "luonnolliset" värähtelymoodit. Normaalimoodit voidaan usein johtaa pelkästään käyttäen systeemin symmetrioita, yksinkertaisissa tapauksissa intuitio usein riittää. Tässä tehtävässä normaalimoodit etsitään käyttäen hyväksi ryhmien esitysteoriaa. Tehtävän tarkastelu on esitetty esimerkkinä Jonesin kirjan luvussa 5.2., tehtävänäsi on käydä läpi yksityiskohdat. Normaalimoodeista, karakteeritauluista, ja käytetyistä notaatioista löytyy selvennystä kirjan aiemmista luvuista.

Vesimolekyyli on symmetrinen 1) 180 asteen kiertojen a happiatomin ja vetyatomien välisen kolmion sivun keskipisteen kautta kulkevan akselin suhteen, 2) heijastusten b suhteen, kun heijastustasona on kolmiota vasten kohtisuorassa oleva taso joka lävistää kolmion em. akselin kohdalta. (Kuva: katso Jones.) Operaatiot a, b ja identtinen kuvaus generoivat ryhmän $C_{2\nu} \equiv \{e, a, b, ab\}$ joka on isomorfinen dihedrisen ryhmän D_2 kanssa, joka on edelleen isomorfinen tuloryhmän $Z_2 \times Z_2$ kanssa (joka tunnettiin myös nimellä "Vierergruppe"). Vaikkakin äkkipäätä operaatiot a ja b vaikuttavat samankaltaisilta, sillä kummatkin vaihtavat vetyatomien paikat keskenään, ovat ne kuitenkin eri operaatiot, sillä toinen on kierto ja toinen heijastus. Erityisesti tämä näkyy siinä miten operaatiot vaikuttavat atomien poikkeamavektoreihin. Merkitään atomien poikkeamia tasapainoasemistaan vektoreilla $\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$, $i = 1, 2, 3$. Täten ryhmän $C_{2\nu}$ toimintaa poikkeamavektorien avaruudessa vastaa 9-ulotteinen esitys $D^{(9)}(g)$, $g \in C_{2\nu}$ vektoriavaruudessa R^9. (Huom, kyseessä on nyt reaalikertoimien vektoriavaruus ja esitys, mutta sekaannusta ei pitäisi tulla.) Tehtävänäsi on

i) etsiä esityksen $D^{(9)}$ 9×9 esitysmatriisit

ii) etsiä $C_{2\nu}$:n karakteeritaulu ja etsiä sen avulla esityksen $D^{(9)}$ täydellinen reduktio.

iii) etsiä esityksen $D^{(9)}$ rajoittuma $D^{(9)}_{vib}$ molekyylin todellisten värähtelymoodien aliavaruuteen (poistaen triviaalit molekyylin massakeskipisteen liikkeeseen ja koko molekyylin pyörimiseen liittyvät vapausasteet) ja etsiä $D^{(9)}_{vib}$:in täydellinen reduktio

iv) etsiä molekyylin värähtelyjen normaalimoodit (niitä vastaavat poikkeamavektorit), esitä tulokset myös kuvina.

Normaalimoodeihin liittyviä ominaistaajuksia ei voi johtaa suoraan symmetrioista, sillä ne riippuvat molekyylin sidosten voimakkuuksista, ts. systeemin potentiaalienergiasta. Vastauksessasi älä vain suoraan kopioi sitä mitä Jones sanoo, vaan perustele tulokset, aivojen käyttö on suositeltavaa.

English text:

Return your solutions to the box in the entrance hall on the second floor of the A-wing in Physicum by Wednesday, October 13.

1. Verify that $D(a) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}$ generates a two-dimensional representation of the cyclic group Z_3, where a is the generator of the group. Show that the representation is irreducible over the field of *real* numbers, but reducible over the field of complex numbers. (Jones, problem 3.3)

2. **Normal Modes of a Water Molecule**. (In this problem you need to consult the book by Jones, you can find it in the reference section of the library, please be considerate to others and do not hog the book to yourself.)

The water molecule H_2O consists of two hydrogen atoms and one oxygen atom. The molecule can be considered as an isosceles triangle with the oxygen atom at its apex. (Figure: see Jones.) In this exercise we consider vibrations of the molecule about the equilibrium configuration. It should be familiar from Mechanics that generic vibrations of a system about the equilibrium can be reduced to linear combinations of the so-called normal modes, the "natural" vibrational modes of the system. Often the normal modes can be simply derived from symmetry considerations. In this exercise we do it using group representation theory. This exercise is treated as an example in section 5.2 of Jones. Your task is to fill in the details (and make sure that you understand the arguments). Discussions on normal modes, character tables and notations can be found earlier on in the book.

A water molecule is symmetric under 1) 180 degree rotations a about the axis passing through the oxygen molecule and bisecting the edge between the hydrogen atoms, 2) reflections b, with the plane of reflection perpendicular to the plane of the triangle and intersecting the plane at the above mentioned axis. (Figure: see Jones.) The operations a, b and the identity map generate the group $C_{2\nu} \equiv \{e, a, b, ab\}$ which is isomorphic to the dihedral group D_2, which is again isomorphic to the direct product group $Z_2 \times Z_2$ (also called the "Vierergruppe"). At first sight the operations a ja b appear to be similar, since both of them interchange the hydrogen atoms. However, they are really different operations, as one is a rotation and the other a reflection. In particular, they act differently on the displacement vectors of the atoms. Denote the displacements of the atoms from their equilibrium positions by the vectors $\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$, $i = 1, 2, 3$. Thus the action of the group $C_{2\nu}$ in the space of displacement vectors corresponds to a 9-dimensional representation $D^{(9)}(g)$, $g \in C_{2\nu}$ in the vector space R^9. (Note that this is now a real representation and vector space as opposed to the complex ones discussed in the lectures. However, the difference will not matter here.)

Your job is to

i) find the 9×9 matrices of the representation $D^{(9)}$

ii) construct the character table of $C_{2\nu}$ and use it to determine the decomposition of the representation $D^{(9)}$

iii) find the representation $D^{(9)}_{vib}$, the induced representation on the true vibrational degrees of freedom of the molecule (removing the trivial degrees of freedom corresponding to the center-of-mass motion and overall rotations of the molecule) and determine the decomposition of $D^{(9)}_{vib}$

iv) find the vibrational normal modes (their displacement vectors), illustrate your results with figures as well.

The eigenfrequencies corresponding to the normal modes cannot be derived from symmetries alone, as they depend on the strengths of the molecular bonds between the atoms (the potential energy). Finally, don't just plain copy what's written in Jones, show the relevant details.