

FI-144 TEORIA DE GRUPOS

Lista #3

Guillermo Cabrera

Entrega: 07de maio de 2018
Só entregar os itens destacados com *

1. * **Redução da Simetria.**

Uma partícula está submetida a um potencial $V_1(\mathbf{r})$ de simetria pontual $\mathbf{O}$ (grupo do octaedro). Posteriormente adicionamos um novo potencial $V_2(\mathbf{r})$ de simetria $\mathbf{D}_6$. Como $\mathbf{D}_6$ não é subgrupo de $\mathbf{O}$, este problema merece especial cuidado. Oriente o campo $V_2(\mathbf{r})$ de maneira que o potencial resultante $V_1(\mathbf{r}) + V_2(\mathbf{r})$ tenha o máximo número de elementos de simetria (veja a figura 1).

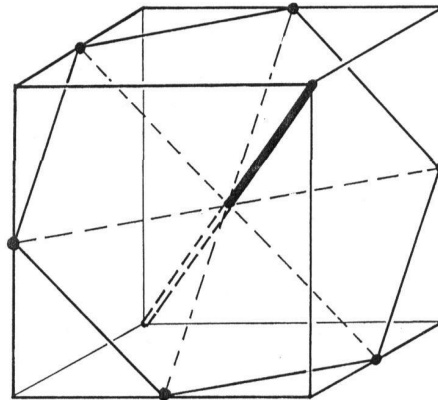


Figure 1:

Chamamos de $\mathbf{G}'$ o subgrupo obtido. Identifique $\mathbf{G}'$ como grupo de ponto cristalino.

- (a) Queremos que agora responda as seguintes questões. Descreva a situação física em relação aos níveis de energia, quando uma partícula em um campo de simetria inicial cúbica, de grupo $\mathbf{O}$, é perturbada por outro campo de simetria

$\mathbf{G}'$ orientado ao longo de um dos eixos $\mathbf{C}_3$ de $\mathbf{O}$ (este campo pode ser visualizado como uma deformação ao longo de uma das diagonais do cubo). Analise todos os tipos possíveis de níveis de energia e encontre a sua separação quando a simetria é reduzida.

- (b) Formule todas as regras de seleção para transições de dipolo elétrico e magnético e de quadrupolo elétrico, primeiro para o campo de simetria $\mathbf{O}$ e depois para o campo da perturbação $\mathbf{G}'$. Analise também o caso das regras de seleção para elementos de matriz diagonais. ■

2. Distribuição de cargas pontuais.

Considere uma distribuição de 6 cargas idênticas de valor q cada uma, com coordenadas $(\pm a, 0, 0)$, $(0, \pm b, 0)$ e $(0, 0, \pm c)$. Calcule o potencial eletrostático da distribuição, perto da origem de coordenadas, como uma expansão em (x, y, z) até potências de quarta ordem nos produtos homogêneos, ou seja para produtos $x^i y^j z^k$ com $i + j + k = 4$. Se desejar, use a fórmula de adição dos harmônicos esféricos

$$\frac{1}{|\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}'|} = \frac{4\pi}{r'} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{1}{2l+1} \left(\frac{r}{r'}\right)^l Y_l^m * (\theta', \phi') Y_l^m (\theta, \phi),$$

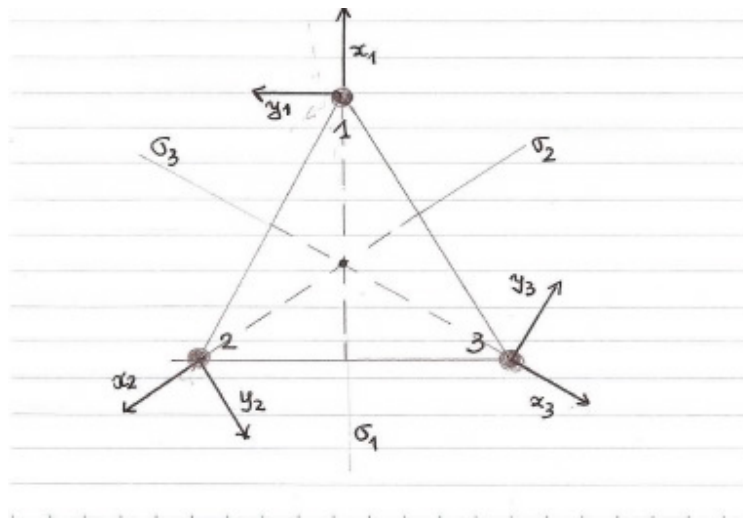
onde $r < r'$. Queremos o desenvolvimento até $l = 4$.

- (a) O caso $a \neq b \neq c$ corresponde a simetria ortorrômbica. Identifique o grupo de ponto e mostre que os invariantes podem ser construídos com as funções $r^l [Y_l^m (\theta, \phi) + Y_l^{-m} (\theta, \phi)]$, com l par e $|m|$ par. Aumente gradativamente a simetria,
- (b) primeiro, para $a = b \neq c$ (simetria tetragonal). Identifique o grupo pontual;
- (c) segundo, para $a = b = c$ (simetria cúbica). Identifique o grupo de ponto.

Em todos os casos, confira que o potencial resultante é um invariante do grupo de simetria. ■

3. Vibrações de uma molécula triangular (tema de estudo).

Considere a molécula triangular, mostrada na figura, com simetria C_{3v} :



- (a) Supondo que os átomos estão confinados no plano, escolhemos coordenadas generalizadas $(x_1, y_1, x_2, y_2, x_3, y_3)$ do sistema como mostrado na figura. Analise o movimento general da molécula, estudando como as coordenadas generalizadas transformam por operações do grupo. Obtenha os caracteres da representação induzida e sua decomposição em representações irredutíveis do grupo.
- (b) Elimine os graus de liberdade de translação e rotação e obtenha os modos normais de vibração da molécula. Forneça uma representação geométrica dos modos normais.
- (c) Para os modos de vibração, diga quais são infra-vermelhos ativos e quais Raman ativos, para transições fundamentais. ■