UNIVERSITETET I TRONDHEIM
NORGES TEKNISKE HØGSKOLE
INSTITUTT FOR FYSIKK

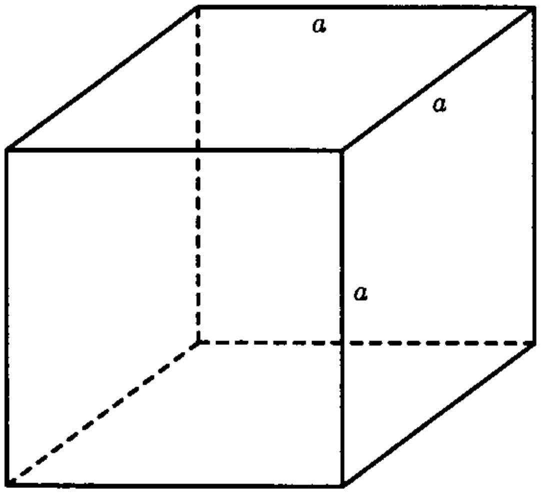
Faglig kontakt under eksamen:
Navn: Kåre Olaussen
Telefon: 3652

Eksamen i fag 74984 Anvendelse av symmetrigrupper i fysikken
Fredag 10. desember 1993
Tid: 0900–1500

Tillatte hjelpemidler: (Alternativ B): Godkjent lommekalkulator tillatt.
Rottmann, *Mathematische Formelsammlung.*
Barnett and Cronin: *Mathematical Formulae.*
Øgrim, *Størrelser og enheter i fysikken.*

Oppgave 1:

I denne oppgaven skal du se litt på den kubiske punktgruppen $O_h = O \times C_i$ (dvs. symmetrigruppen for en kube—forsøkt illustrert på figuren under), og karaktertabellen for denne.



a) Skriv først ned karaktertabellen for C_i.

b) Forklar hvordan du kan konstruere karaktertabellen for O_h ut fra kunnskap om karaktertabellene for O og C_i.

c) Punktgruppen O består av alle symmetri-transformasjonene på en kube som er rene rotasjoner. Den har følgende klasseinndeling

$$O = \{E\} + \{6C_4\} + \left\{3C_4^2\right\} + \{6C_2'\} + \{8C_3\} \tag{1}$$

Illustrér de forskjellige symmetrielementene på en figur.

d) Bestem antallet og dimensjonaliteten av de irredusible representasjonene til O.

e) Hvilke ortogonalitets- og normalisering-relasjoner gjelder generelt for karaktertabellen?

f) Bestem karakterene for de én-dimensjonale irredusible representasjonene av O.

g) Bestem karakterene til én av de flerdimensjonale irredusible representasjonene av O. Du kan anta at alle karakterene er reelle og heltallige.

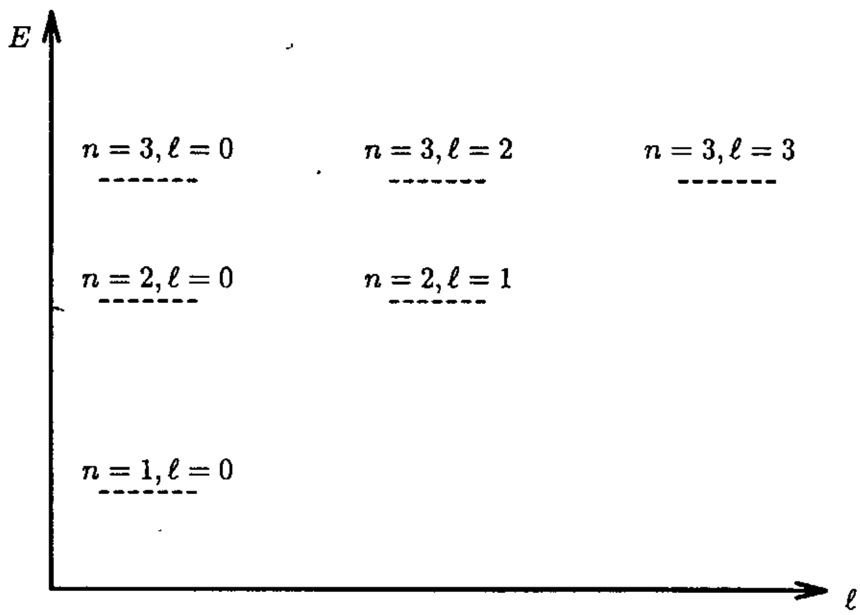
h) Fyll ut resten av karaktertabellen for O.

Oppgave 2:

I denne oppgaven skal du blant annet se på stråligsoverganger og energisplitting i et (hydrogen-lignende) én-elektron atom. Vi antar først at dette systemet kan beskrives av en rotasjons-symmetrisk Hamilton-operator,

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r). \tag{2}$$

Energi-spekteret, som funksjon av hovedkvantetallet n og banedreieimpulsen ℓ, er illustrert skjematisk på figuren under:



a) Hva blir degenerasjonen til hvert (n, ℓ)-nivå: (i) når man ser bort fra elektronets intrinsikke spinn, og (ii) når man tar hensyn til at elektronet har intrinsikt spinn $\frac{1}{2}$.

b) Forklar kort hva som menes med en irredusibel tensor-operator.

c) Hvilke av følgende kvantemekaniske operatorer transformerer som irredusible tensor-operatorer under den fullstendige rotasjonsgruppen $O(3) = SO(3) \times C_i$: (i) $\vec{r}$, (ii) $\vec{p} = -i\hbar\nabla$, (iii) $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, (iv) $\vec{X} \equiv \vec{r} + \vec{p}$, (v) $\vec{Y} \equiv \vec{r} + \vec{L}$, (vi) $Z^{ij} \equiv r^i r^j$.

d) I hvert av tilfellene over, angi hvilket spinn og hvilken paritet tensor-operatoren transformerer med dersom den er irredusibel, eller skriv den som en sum av irredusible tensor-operatorer dersom den ikke er det.

e) Forklar kort hva som menes med Wigner-Eckart teoremet.

f) Se nå på elektriske strålingsoverganger i atomet over, indusert av en perturberende Hamilton-funksjon (i dipol-approksimasjonen),

$$H_{i1} = e\vec{E}(\vec{r},t)\cdot\vec{r} \approx e\vec{E}(0,t)\cdot\vec{r}. \tag{3}$$

Her kan $\vec{E}(0,t)$ og alle dens romderiverte i $\vec{r}=0$ anses å være gitte parametre (som derfor ikke skal transformeres under symmetrioperasjoner). Du kan anta at koordinatsystemet er valgt slik at $\vec{E}$ peker i z-retningen. I første ordens perturbasjonsteori (og dipoltilnærmingen) vil derfor sannsynligheten for strålings-overganger $(n\ell m) \to (n'\ell'm')$ være proporsjonalt med absoluttkvadratet av matrise-elementet

$$\mathcal{M} = \langle n'\ell'm'|z|n\ell m\rangle. \tag{4}$$

Hvilke strålingsoverganger er mulige i denne tilnærmingen?

g) Hvilke strålingsoverganger $(n\ell m) \to (n'\ell'm')$ vil være mulige dersom man rekkeutvikler $\vec{E}$ til første orden i $\vec{r}$,

$$E^i(\vec{r},t)\,r^i \approx E^i(0,t)\,r^i + \left(\partial_j E^i\right)(0,t)\,r^i\,r^j, \tag{5}$$

men forsatt regner første ordens perturbasjonsteori?

NB! Husk å ta hensyn til at $\nabla\cdot\vec{E}(\vec{r},t) \equiv (\partial_i E^i)(\vec{r},t) = 0$ (dette gjelder generelt for strålingsfelter).

h) De degenererte (n,ℓ)-nivåene for Hamiltonoperatoren (2) danner ikke nødvendigvis irredusible multipletter under rotasjonsgruppen når vi tar hensyn til elektronets intrinsikke spinn. Man kan derfor forvente splitting av disse nivåene når man tar hensyn til at den fullstendige Hamiltonoperatoren f.eks. vil innholde bidrag fra spin-bane kobling:

$$H_1 \propto \vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2}\hbar\,\vec{L}\cdot\vec{\sigma} \tag{6}$$

Forklar hvordan de forskjellige (n,ℓ) nivåene kan forventes å splitte når Hamiltonoperatoren (2) perturberes med et ledd av formen (6).

i) Skriv ned den eksplisitte sammenhengen mellom basisvektorene

$$|\,n\,\ell\,m\,s\rangle = f_n(r)\,Y_{\ell m}(\hat{r})\,\chi_s \tag{7}$$

og settet av irredusible basisvektorer. Her er $\chi_{1/2} = \binom{1}{0}$ og $\chi_{-1/2} = \binom{0}{1}$. Noen Clebsch-Gordan koeffisienter som muligens kan være til nytte for denne oppgaven er oppgitt sist i oppgavesettet.

j) Se nå spesielt på $(n,\ell) = (2,1)$-tilstandene. Disse vil splitte til to nivåer som konvensjonelt betegnes $2p_{3/2}$ og $2p_{1/2}$. Strålingsoverganger fra disse nivåene til grunntilstanden $(1s_{1/2})$ er mulig i dipolapproksimasjonen. Finn forholdet mellom overgangsamplitudene $\mathcal{M}_{3/2} \equiv \langle 1s_{1/2}|z|2p_{3/2}\rangle$ og $\mathcal{M}_{1/2} \equiv \langle 1s_{1/2}|z|2p_{1/2}\rangle$. Noen Clebsch-Gordan koeffisienter som muligens kan være til nytte for denne oppgaven er oppgitt sist i oppgavesettet.

k) Det viser seg at elektriske strålingsoverganger $2s_{1/2} \to 1s_{1/2}$ ikke er mulig (i første ordens perturbasjonsteori). Det er imidlertid mulighet for magnetiske overganger formidlet av operatoren

$$H_{i2} = \frac{e\hbar}{2m} \vec{B}(\vec{r},t)\cdot\vec{\sigma}. \tag{8}$$

Hvor langt må en gå i rekkeutviklingen

$$B^i(\vec{r},t) = B^i(0,t) + \left(\partial_j B^i\right)(0,t)\, r^j + \frac{1}{2}\left(\partial_j \partial_k B^k\right) r^j r^k + \cdots$$

for å få et ikke-forsvinnende bidrag til denne overgangsamplituden?

l) Forklar kort hva som menes med Kramers degenerasjon.

m) Elektronet vil også vekselvirke med atomkjernen, og dette vil føre til en ytterligere oppsplitting av spekteret. F.eks. vil et bidrag til Hamiltonoperatoren av formen

$$H_2 \propto \vec{S}_N \cdot \vec{S}, \tag{9}$$

der $\vec{S}_N$ er kjernespinnet, gi opphav til hyperfinsplitting. Kan du si noe generelt om degenerasjonen til spekteret dersom (i) kjernen består av et enkelt proton (slik at vi har et vanlig hydrogenatom), og (ii) kjernen består av et proton og et nøytron (slik at vi har et deuteriumatom). Det minnes om at både protonet og nøytronet er spinn $\frac{1}{2}$ partikler.

Oppgitt:
Clebsch-Gordan koeffisientene $\langle \ell m \tfrac{1}{2} s | j j_z \rangle$ er

	$s = \frac{1}{2}$	$s = -\frac{1}{2}$
$\ell = j - \frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{j+j_z}{2j}}$	$\sqrt{\frac{j-j_z}{2j}}$
$\ell = j + \frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{j-j_z+1}{2j+2}}$	$\sqrt{\frac{j+j_z+1}{2j+2}}$

Videre har man

$$\langle \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2} \,|\, 1\,0\,\tfrac{3}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle = \langle \tfrac{1}{2}\, -\tfrac{1}{2} \,|\, 1\,0\,\tfrac{3}{2}\, -\tfrac{1}{2}\rangle = -\sqrt{\tfrac{1}{3}}, \tag{10}$$

$$\langle \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2} \,|\, 1\,1\,\tfrac{3}{2}\, -\tfrac{1}{2}\rangle = \langle \tfrac{1}{2}\, -\tfrac{1}{2} \,|\, 1\, -1\,\tfrac{3}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{6}}, \tag{11}$$

$$\langle \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2} \,|\, 1\,0\,\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle = -\langle \tfrac{1}{2}\, -\tfrac{1}{2} \,|\, 1\,0\,\tfrac{1}{2}\, -\tfrac{1}{2}\rangle = -\sqrt{\tfrac{1}{3}}, \tag{12}$$

$$\langle \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2} \,|\, 1\,1\,\tfrac{1}{2}\, -\tfrac{1}{2}\rangle = -\langle \tfrac{1}{2}\, -\tfrac{1}{2} | 1\, -1\,\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}. \tag{13}$$