LØSNINGSFORSLAG

Eksamen i Ledet Selvstudium om Anvendelse av symmetrigrupper i fysikken

Onsdag 12. mai 1993

Oppgave 1

a) Abelsk gruppe: En gruppe G der alle elementene kommuterer med hverandre

$$g_i g_j = g_j g_i \quad \text{for alle } g_i, g_j \in G$$

b) Syklisk gruppe: En (endelig) gruppe G som genereres av et enkelt element g

$$G = \{ g^n \mid n = 1, \ldots, N \}$$

der $g^N = e$ enhetselementet. (For å få generert enhetselementet er de nødvendig at gruppen er endelig.)

c) Ordenen til et gruppe-element g er det minste positive heltall N slik at

$$g^N = e \quad \text{enhetselementet.}$$

d) To grupper G og H er isomorfe dersom det finnes en 1-1 avbildning

$$\mu : G \to H \quad \text{slik at}$$

$$\mu(g_1 g_2) = \mu(g_1)\mu(g_2) \quad \text{for alle } g_1, g_2 \in G.$$

e) En invariant undergruppe $H \subset G$ er en undergruppe som består av komplette konjugasjonsklasser, dvs at for alle $h \in H$ og alle $g \in G$ vil $ghg^{-1} \in H$.

f) Konjugasjonsklassen C_h til et element $h \in G$ er mengden
$$C_h = \{ ghg^{-1} \mid g \in G \}$$

g) En representasjon $\mathcal{D}$ av en gruppe er en homomorfi av gruppen på et sett av matriser, dvs en avbildning
$$\mathcal{D} : g \mapsto \mathcal{D}(g)$$
slik at
$$\mathcal{D}(g_1 g_2) = \mathcal{D}(g_1)\mathcal{D}(g_2).$$

h) En irredusibel representasjon av en gruppe er en representasjon som ikke kan blokk-diagonaliseres ved en similaritetstransformasjon, — dvs at det ikke er mulig å finne en inverterbar matrise S (uavhengig av g) slik at
$$S \mathcal{D}(g) S^{-1} = \left(\begin{array}{c|c} \mathcal{D}_1(g) & \mathcal{D}_3(g) \\ \hline 0 & \mathcal{D}_2(g) \end{array} \right)$$

for alle $g \in G$.

i) Shur's 1ste lemma:
Gitt to irredusible representasjoner $\mathcal{D}^{(1)}$ og $\mathcal{D}^{(2)}$ av respektivt dimensjon m og n, og en $m \times n$-matrise M (uavhengig av g) slik at

$$\mathcal{D}^{(1)}(g) M = M \mathcal{D}^{(2)}(g) \quad \text{for alle } g \in G$$

Da er enten α) $M = 0$ eller β) $m = n$ og $\det M \neq 0$.

Shur's 2ndre lemma:
Hvis

$$\mathcal{D}(g) M = M \mathcal{D}(g) \quad \text{for alle } g \in G,$$

der $\mathcal{D}$ er en irredusibel representasjon, så må M være proporsjonal med enhetsmatrisen.

j) La $\mathcal{D}^{(\alpha)}, \mathcal{D}^{(\beta)}$ være irredusible, unitære, og ikke-similære når $\alpha \neq \beta$, representasjoner av G. Da sier det store ortogonalitetsteoremet at

$$\sum_{g \in G} \mathcal{D}^{(\alpha)}_{ij}(g)^* \mathcal{D}^{(\beta)}_{kl}(g) = \frac{|G|}{d_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{ik} \delta_{jk},$$

der $|G|$ er antallet elementer i G, og d_α er dimensjonen til representasjonen $\mathcal{D}^{(\alpha)}$.

k)

$$\chi(g) = \mathrm{Tr}\, \mathcal{D}(g) \equiv \sum_i \mathcal{D}_{ii}(g)$$

kalles karakteren til representasjonen $\mathcal{D}$.

l) Hvert gruppe-element $g_i \in G$ kan sees på som en basisvektor for et $|G|$-dimensjonalt vektorrom. Dvs. at en generell vektor i dette rommet kan skrives $v = \sum_{i \in G} c_i g_i$.
Den regulære representasjonen består av de lineære transformasjonene slik at

$$\mathcal{D}(g)\, v \equiv \sum_{i \in G} c_i\, g g_i$$

Hver irredusibel representasjonen $\mathcal{D}^{(\alpha)}$ (av dimensjon d_α) opptrer d_α ganger i den regulære representasjonen.

m) En irredusibel tensoroperator er et sett $\{T_i^{(\alpha)}\}$ av operatorer som transformerer slik at,

$$U(g)\, T_j^{(\alpha)}\, U(g)^{-1} = \sum_i T_i^{(\alpha)} \mathcal{D}_{ij}^{(\alpha)}(g),$$

der $\mathcal{D}^{(\alpha)}$ er en irredusibel representasjon, og U en annen representasjon, av den aktuelle transformasjonsgruppen (som man i første omgang tenker å være rotasjonsgruppen, — men dette kan selvsagt kan generaliseres til andre grupper).

n) Wigner-Eckart teoremet angir sammenhengen mellom matrise-elementene til en irredusibel tensoroperator mellom to irredusible multipletter:

$$\langle \alpha i | T_j^{(\beta)} | \gamma k \rangle = \langle \alpha i | \beta j \gamma k \rangle \langle \alpha \| T^{(\beta)} \| \gamma \rangle$$

der $\langle \alpha i | \beta j \gamma k \rangle$ er (de komplekse konjugerte av) Clebsch-Gordan koeffisientene for kobling av produktet $\beta \otimes \gamma$ av to irreps til en irrep α. Disse er bestemt av gruppeteori alene. De reduserte matrise-elementene $\langle \alpha \| T^{(\beta)} \| \gamma \rangle$ avhenger også av dynamiske detaljer.

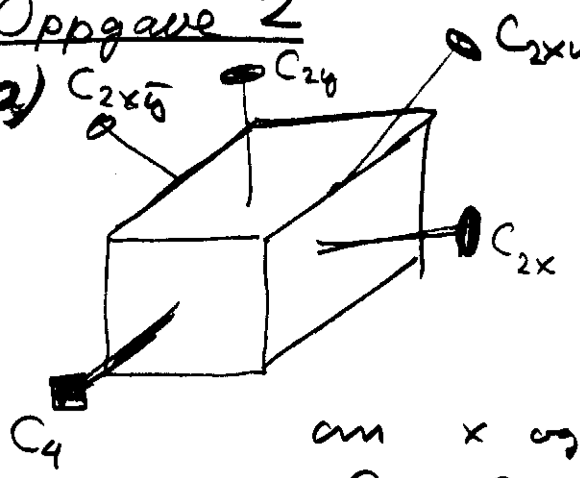
o) Symmorfe romgrupper kan, ved passende valg av origo, framstilles uten innføring av glideplan eller skru-akser. Ikke-symmorfe romgrupper krever innføring av glideplan og/eller skru-akser.

p) Bølgevektorgruppen (til en vektor $\vec{k}$) er transformasjoner i det resiproke rom som holder $\vec{k}$ fast modulo en resiprok gittervektor.

q) Kramers degenerasjon er en 2-fold degenerasjon som kan opptre som konsekvens av tidsreversjons invarians.

Oppgave 2

a)



- Vi har 4-tallige rotasjoner om z-aksen: $C_{4z}, C_{4z}^2, C_{4z}^3 = C_{4z}^{-1}$
- Vi har 2-tallige rotasjoner om x og y aksene (disse er konjugerte) C_{2x}, C_{2y}
- Vi har 2-tallige rotasjoner om diagonalene xy og $x\bar{y}$: $C_{2xy}, C_{2x\bar{y}}$. Disse er også konjugerte.
- Vi har enhetsoperasjonen E
- Vi har de åtte ovenstående operasjoner kombinert med inversjon I:

$I, IC_{4z}, IC_{2z}, IC_{4z}^{-1}, IC_{2x}, IC_{2y}, IC_{2xy}, IC_{2x\bar{y}}$.

b) Gruppen kalles D_{4h} i Schönflies notasjon (og 4/mmm i internasjonal notasjon).

c) Vi har konjugasjonsklassene

$\{E\}, \{C_{2x}, C_{2y}\}, \{C_{2xy}, C_{2x\bar{y}}\}, \{C_{2z}\}, \{C_{4z}, C_{4z}^{-1}\}$

$\{I\}, \{IC_{2x}, IC_{2y}\}, \{IC_{2xy}, IC_{2x\bar{y}}\}, \{IC_{2z}\}, \{IC_{4z}, IC_{4z}^{-1}\}$

d) Antallet irreducible representasjoner skal være lik antallet konjugasjonsklasser. Altså 10.

e) Vi skal ha $\sum_{\alpha=1}^{10} d_\alpha^2 = |G| = 16$.
Ingen d_α kan være ≥ 3, fordi $3^2+9=18>16$.
Ved prøving finner vi at $16 = 2^2+2^2+8$.
Altså: 2 to-dimensjonale irreps og 8 én-dimensjonale.

f) Siden $D_{4h} = C_i \times D_4$ er det enklest å finne karakterene til D_4 først (som må ha 4 én-dim. og 1 to-dim irrep.)

	$\{E\}$	$\{C_{2z}\}$	$\{C_{2x}, C_{2y}\}$	$\{C_{2xy}, C_{2x\bar{y}}\}$	$\{C_{4z}, C_{4z}^{-1}\}$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	−1	−1
B_1	1	1	−1	1	−1
B_2	1	1	−1	−1	1
E	2	−2	0	0	0

- Fyller ut raden for enhetsrepresentasjonen først.
- Fyller ut kolonnen for konjugasjonsklassen $\{E\}$.
- Siden C_{4z} og C_{4z}^{-1} er i samme konjugasjonsklasse må de være representert ved ± 1 i én-dimensjonale reps $\Rightarrow$ C_{2z} er representert ved 1 i én-dim. reps.
- Ortogonalitet av karakterene bestemmer to alle karakterene til én-dim. reps.
- Ortogonalitet bestemmer så karakteren til den to-dimensjonale representasjonen.

Siden I kan være representert ved +1 eller −1 er det lett å skrive ned tabellen for C_{4h}:

	$\{E\}$	$\{C_{2z}\}$	$\{C_{2x}, C_{2y}\}$	$\{C_{2xy}, C_{2x\bar{y}}\}$	$\{C_{4z}, C_{4z}^{-1}\}$	I	IC_2	$2IC_2$	$2IC_2$	$2IC_4$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{1u}	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1
A_{2g}	1	1	1	−1	−1	1	1	1	−1	−1
A_{2u}	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	1	1
B_{1g}	1	1	−1	1	−1	1	1	−1	1	−1
B_{1u}	1	1	−1	1	−1	−1	−1	1	−1	1
B_{2g}	1	1	−1	−1	1	1	1	−1	−1	1
B_{2u}	1	1	−1	−1	1	−1	−1	1	1	−1
E_g	2	−2	0	0	0	2	−2	0	0	0
E_u	2	−2	0	0	0	−2	2	0	0	0

g) $$\chi(\theta, I^0) = \frac{\sin[(L+\frac{1}{2})\theta]}{\sin(\frac{1}{2}\theta)}$$

$$\chi(\theta, I) = -\frac{\sin[(L+\frac{1}{2})\theta]}{\sin(\frac{1}{2}\theta)}$$

h) $\{E\}$ svarer til $\theta = 0$, $\{C_{2z}\}$, $\{C_{2x}, C_{2y}\}$, $\{C_{2xy}, C_{2x\bar{y}}\}$ svarer til $\theta = \pi$, $\{C_{4z}, C_{4z}^{-1}\}$ svarer til $\theta = \pm\pi/2$ $\Longrightarrow$

	E	C_{2z}	$2C_2$	$2C_2$	$2C_4$	I	IC_2	$2IC_2$	$2IC_2$	$2IC_4$
χ	5	1	1	1	−1	5	1	1	1	−1

i) Ved dekomposisjon på de irreduksible karakterene finner vi

$$\chi = \chi_{A_{1g}} + \chi_{A_{2g}} + \chi_{B_{1g}} + \chi_{E_g}$$

j) Den 5-fold degenererte tilstanden splitter i 3 singletter og 1 dublett.

Oppgave 3

a) Hvis $h_1, h_2 \in H$ så vil

$$D(h_1)D(h_2) = D(h_1 h_2) = 1$$

så $h_1 h_2$ er også i H. Likeså:

$$D(h_i^{-1}) = D(h_i)^{-1} = 1,$$ så h_i^{-1} er også i H. Dette viser at H er en undergruppe.

b) H er invariant dersom $ghg^{-1} \in H$ for alle $h \in H$ og $g \in G$:

$$D(ghg^{-1}) = D(g)D(h)D(g^{-1}) =$$
$$D(g)\, 1\, D(g)^{-1} = 1 \implies ghg^{-1} \in H.$$

Altså er H invariant.