Eksamen FY8104 Symmetri i fysikken
Fredag 7. desember 2007
Løsninger

1a) En konjugasjonsklasse i SO(3) består av alle rotasjoner med en gitt rotasjonsvinkel α og vilkårlig rotasjonsakse.

En konjugasjonsklasse i O(3) er enten identisk med en konjugasjonsklasse i SO(3), eller den er helt utenfor SO(3) og består av alle matriser $\mathbf{S} = -\mathbf{R}$ der $\mathbf{R}$ tilhører en gitt konjugasjonsklasse i SO(3).

Når vi utvider gruppen fra SO(3) til O(3), er det i prinsippet mulig at noen konjugasjonsklasser blir større, men det skjer altså ikke, fordi hele O(3) genereres av SO(3) med tillegg av ett nytt element $-\mathbf{I}$, som kommuterer med hele SO(3). De nye gruppeelementene utenfor SO(3) må finne sin plass i nye konjugasjonsklasser som ligger helt og holdent utenfor SO(3).

En konjugasjonsklasse i SU(2) består av alle SU(2)-matriser med en gitt rotasjonsvinkel α og vilkårlig rotasjonsakse.

1b) En SU(2)-matrise $\mathbf{U}$ som tilhører sentret i SU(2), må være et multiplum av identitetsmatrisen, i følge Schurs lemma. Altså $\mathbf{U} = a\mathbf{I}$ der a er et komplekst tall. At $\mathbf{U} \in \mathrm{SU}(2)$ impliserer at $\det \mathbf{U} = a^2 = 1$, altså $a = \pm 1$. Da er $a^* = a^{-1}$, og $\mathbf{U} = a\mathbf{I}$ er unitær, $\mathbf{U}^\dagger = a^*\mathbf{I} = \mathbf{U}^{-1}$.

Tilsvarende gjelder for en SU(3)-matrise $\mathbf{U}$ som tilhører sentret i SU(3), at $\mathbf{U} = a\mathbf{I}$ og $\det \mathbf{U} = a^3 = 1$, altså $a = 1$, $a = \omega$ eller $a = \omega^*$ der

$$\omega = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\frac{2\pi}{3}} = \frac{1 + \mathrm{i}\sqrt{3}}{2} \; .$$

Også i dette tilfellet er $a^* = a^{-1}$, og følgelig er $\mathbf{U}$ unitær, $\mathbf{U}^\dagger = a^*\mathbf{I} = \mathbf{U}^{-1}$.

1c) Med

$$\mathbf{U} = \cos\!\left(\frac{\alpha}{2}\right)\mathbf{I} - \mathrm{i}\sin\!\left(\frac{\alpha}{2}\right)\vec{n}\cdot\vec{\boldsymbol{\sigma}} = \cos\!\left(\frac{\alpha}{2}\right)\mathbf{I} - \mathrm{i}\sin\!\left(\frac{\alpha}{2}\right)(n_1\boldsymbol{\sigma}_1 + n_2\boldsymbol{\sigma}_2 + n_3\boldsymbol{\sigma}_3)$$

er

$$\begin{aligned}
\mathbf{U}^* &= \cos\!\left(\frac{\alpha}{2}\right)\mathbf{I} + \mathrm{i}\sin\!\left(\frac{\alpha}{2}\right)\vec{n}\cdot\vec{\boldsymbol{\sigma}}^{\,*} = \cos\!\left(\frac{\alpha}{2}\right)\mathbf{I} + \mathrm{i}\sin\!\left(\frac{\alpha}{2}\right)(n_1\boldsymbol{\sigma}_1 - n_2\boldsymbol{\sigma}_2 + n_3\boldsymbol{\sigma}_3) \\
&= \cos\!\left(\frac{\alpha}{2}\right)\mathbf{I} - \mathrm{i}\sin\!\left(\frac{\alpha}{2}\right)\vec{m}\cdot\vec{\boldsymbol{\sigma}} \; ,
\end{aligned}$$

der $m_1 = -n_1$, $m_2 = n_2$, $m_3 = -n_3$. Altså $\vec{m} = \mathbf{R}\vec{n}$, der $\mathbf{R}$ er en rotasjon med vinkelen π om y-aksen. Det gir at $\mathbf{U}^* = \mathbf{V}\mathbf{U}\mathbf{V}^{-1}$ med

$$\mathbf{V} = \exp\!\left(-\mathrm{i}\,\frac{\pi}{2}\,\boldsymbol{\sigma}_2\right) = -\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

$\mathbf{V} = \boldsymbol{\sigma}_2$ fungerer nøyaktig like bra. Riktignok er ikke $\boldsymbol{\sigma}_2 \in \mathrm{SU}(2)$, men det er heller ikke noe krav at vi skal ha $V \in \mathrm{SU}(2)$.

Det er et vesentlig poeng her at $\mathbf{V}$ må kunne velges uavhengig av $\mathbf{U}$.

Vi kan kontrollere svaret. Hvis vi forlanger at en kompleks 2×2-matrise

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}$$

skal være unitær og ha determinant 1, finner vi at den mest generelle løsningen er

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} a & -b^* \\ b & a^* \end{pmatrix},$$

der a og b er komplekse tall med $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Da er

$$\mathbf{U}^* = \begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix} = \mathbf{V}\mathbf{U}\mathbf{V}^{-1}$$

med

$$\mathbf{V} = -\mathbf{V}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Av relasjonen $\mathbf{U}^* = \mathbf{V}\mathbf{U}\mathbf{V}^{-1}$ følger at

$$(\mathrm{Tr}\,\mathbf{U})^* = \mathrm{Tr}(\mathbf{U}^*) = \mathrm{Tr}(\mathbf{V}\mathbf{U}\mathbf{V}^{-1}) = \mathrm{Tr}\,\mathbf{U}\ .$$

Det vil si at $\mathrm{Tr}\,\mathbf{U}$ er reell. Det ser vi forøvrig av den oppgitte formelen

$$\mathbf{U} = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)\mathbf{I} - \mathrm{i}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)\vec{n}\cdot\vec{\boldsymbol{\sigma}}\ ,$$

som gir at

$$\mathrm{Tr}\,\mathbf{U} = 2\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right).$$

1d) Vi kan bruke karakterene

$$\begin{aligned} \chi_1(\mathbf{U}) &= \mathrm{Tr}\,\rho_1(\mathbf{U}) = \mathrm{Tr}\,\mathbf{U}\ , \\ \chi_2(\mathbf{U}) &= \mathrm{Tr}\,\rho_2(\mathbf{U}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{U}^*) = (\mathrm{Tr}\,\mathbf{U})^* = (\chi_1(\mathbf{U}))^* \end{aligned}$$

til å vise at de to representasjonene er inekvivalente. Det er nok å finne en SU(3)-matrise $\mathbf{U}$ slik at $\mathrm{Tr}\,\mathbf{U}$ ikke er reell, for da er $\chi_1(\mathbf{U}) \neq \chi_2(\mathbf{U})$. Et eksempel er senterelementet $\mathbf{U} = \omega\mathbf{I}$ fra punkt b) ovenfor, som har

$$\mathrm{Tr}\,\mathbf{U} = 3\omega = \frac{3(1+\mathrm{i}\sqrt{3})}{2}\ .$$

1e) 1 og -1 utgjør sentret av kvaterniongruppen, de er sine egne konjugasjonsklasser. Ellers er f.eks. $\mathrm{j}\mathrm{i}\mathrm{j}^-1 = -\mathrm{i}\mathrm{j}\mathrm{j}^-1 = -\mathrm{i}$, slik at konjugasjonsklassene er $\{\mathrm{i}, -\mathrm{i}\}$, $\{\mathrm{j}, -\mathrm{j}\}$ og $\{\mathrm{k}, -\mathrm{k}\}$. Karaktertabell:

1	−1	i, −i	j, −j	k, −k
1	1	1	1	1
1	1	−1	−1	1
1	1	−1	1	−1
1	1	1	−1	−1
2	−2	0	0	0

Her er noen holdepunkter for å konstruere karaktertabellen.

Det er fem konjugasjonsklasser og like mange irredusible representasjoner.

Alle karakterene er reelle, fordi, som vi ser, g og g^{-1} alltid tilhører samme konjugasjonsklasse.

Karakteren til enhetselementet, $\chi(1)$, er dimensjonen til representasjonen. Ortogonalitetsrelasjon nr. 2 gir at kvadratsummen av dimensjonene er $N = 8$, og det gir entydig dimensjonene 1, 1, 1, 1 og 2.

En todimensjonal representasjon var gitt i oppgaveteksten, nemlig

$$1 \leftrightarrow \mathbf{I}\ , \quad \mathrm{i} \leftrightarrow -\mathrm{i}\sigma_1\ , \quad \mathrm{j} \leftrightarrow -\mathrm{i}\sigma_2\ , \quad \mathrm{k} \leftrightarrow -\mathrm{i}\sigma_3\ .$$

Den er irredusibel og gir siste linje i karaktertabellen. Irredusibilitet beviser vi ved hjelp av ortogonalitetsrelasjon nr. 1. En generell representasjon er en direkte sum av irredusible representasjoner, med multiplisitet m_μ av den irredusible representasjonen μ, da har den karakter

$$\chi = \sum_\mu m_\mu \chi^{(\mu)}\ ,$$

og ortogonalitetsrelasjonen gir at

$$\sum_i N_i |\chi_i|^2 = \sum_{\mu,\nu} m_\mu m_\nu \sum_i N_i (\chi_i^{(\mu)})^* \chi_i^{(\nu)} = N \sum_\mu m_\mu^{\,2}\ .$$

Derfor vet vi at representasjonen er irredusibel (en $m_\mu = 1$, alle andre $m_\mu = 0$) når $\sum_i N_i |\chi_i|^2 = N$.

For en endimensjonal representasjon er det karakteren som er representasjonen, slik at $\chi(gh) = \chi(g)\chi(h)$. Og dimensjonen til represntasjonen er $\chi(1) = 1$. Siden $(-1)^2 = 1$, må $(\chi(-1))^2 = \chi((-1)^2) = \chi(1) = 1$, altså $\chi(-1) = \pm 1$. Siden $\mathrm{i}^2 = -1$ og $\mathrm{i}^4 = 1$, må $(\chi(\mathrm{i}))^2 = \chi(\mathrm{i}^2) = \chi(-1) = \pm 1$ og $(\chi(\mathrm{i}))^4 = \chi(\mathrm{i}^4) = \chi(1) = 1$, altså $\chi(\mathrm{i}) = \pm 1$ eller $\chi(\mathrm{i}) = \pm \mathrm{i}$. Videre er $\chi(\mathrm{i}) = \chi(-\mathrm{i})$, fordi i og −i er konjugerte. Når samtidig $\chi(-\mathrm{i}) = \chi(-1)\chi(\mathrm{i})$, og $\chi(\mathrm{i}) \neq 0$, må vi ha $\chi(-1) = 1$ og $\chi(\mathrm{i}) = \pm 1$. Og så videre.

Karakteren til den todimensjonale irredusible representasjonen kon vi forøvrig finne entydig ved hjelp av ortogonalitetsrelasjonene, etter at vi har funnet alle de endimensjonale.

Her er enda et knep som viser at noen av karakterverdiene må være null. Når χ_1 og χ_2 er karakterene til to representasjoner ρ_1 og ρ_2, av dimensjoner n_1 og n_2, så er $\chi_3 = \chi_1\chi_2$ karakteren til produktrepresentasjonen $\rho_3 = \rho_1 \otimes \rho_2$, av dimensjon $n_3 = n_1 n_2$. Hvis f.eks. ρ_1 er endimensjonal og ρ_2 er irredusibel, så er ρ_3 irredusibel (det kan vi bevise f.eks. ved hjelp av ortogonalitetsrelasjonen: vi har at $|\chi_1(g)| = 1$ for alle g, og derfor $\sum_g |\chi_3(g)|^2 = \sum_g |\chi_1(g)\chi_2(g)|^2 = \sum_g |\chi_2(g)|^2 = N$). Videre, hvis det finnes et gruppeelement g slik at $\chi_1(g) \neq 1$, så er det to muligheter: enten er $\chi_2(g) = 0$, eller så har representasjonene ρ_2 og ρ_3 samme dimensjon, men er inekvivalente.

Kvaterniongruppen har bare en todimensjonal irredusibel representasjon. Denne representasjonen må ha karakterverdi 0 for enhver konjugasjonsklasse som har karakterverdi forskjellig fra 1 i en av de endimensjonale representasjonene.

2a) Den fulle tredimensjonale punktgruppen inneholder følgende transformasjoner.

- 6 rotasjoner om en akse vinkelrett på planet, inkludert identitetstransformasjonen E (av noen kalt I). Rotasjonsvinklene er $k2\pi/6$ med $k = 0, 1, 2, 3, 4, 5$.
- 6 såkalte vertikale refleksjoner σ_{vj}, $j = 1, 2, 3, 4, 5, 6$, om 6 plan som inneholder rotasjonsaksen. De 6 rotasjonene og 6 refleksjonene utgjør tilsammen gruppen C_{6v}, som altså har orden 12.
- De 12 transformasjonene i C_{6v} er todimensjonale, de virker i det vi kaller horisontalplanet og forandrer ikke den tredje koordinaten, langs rotasjonsaken. Derfor kommuterer de med refleksjonen om horisontalplanet, σ_h, som ikke gjør annnet enn å invertere den tredje koordinaten.

Alt i alt gir det 24 gruppeelementer, dette er den dihedrale gruppen D_{6h}, som er et direkte produkt, $D_{6h} = C_{6v} \otimes \{E, \sigma_h\} = C_{6v} \otimes \{I, \sigma_h\}$. Den er forøvrig et direkte produkt også på en annen måte: $D_{6h} = D_6 \otimes \{I, -I\}$, der I er identitstransformasjonen $\vec{r} \to \vec{r}$ og $-I$ er inversjonen $\vec{r} \to -\vec{r}$.

2b) Schurs lemma sier at enhver operator som kommuterer med alle transformasjonene i en irredusibel representasjon, må være et multiplum av identitetsoperatoren. Translasjonsgruppen er kommutativ, og hvis vi har en irredusibel unitær representasjon av den, må enhver translasjonen være representert som et multiplum av identitetsoperatoren, altså som en fasefaktor. Men da må representasjonen være endimensjonal, for ellers ville den være redusibel.

2c) Rotasjonen R (som mer generelt også kan være en refleksjon) transformerer $\vec{r} \mapsto R\vec{r}$, mens translasjonen $\vec{a}$ transformerer $\vec{r} \mapsto \vec{a} + \vec{r}$. Hvis vi først roterer med R og etterpå translaterer med $\vec{a}$, gir det at

$$\vec{r} \mapsto R\vec{r} \mapsto \vec{a} + R\vec{r} = R(R^{-1}\vec{a} + \vec{r}) \ .$$

Samme resultat som om vi først translaterer med $R^{-1}\vec{a}$ og etterpå roterer med R. Vi har altså at

$$\begin{aligned} U(\vec{a})\psi' &= U(\vec{a})U(R)\psi = U(R)U(R^{-1}\vec{a})\psi = U(R)(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot(R^{-1}\vec{a})}\psi) \\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(R\vec{k})\cdot\vec{a}}U(R)\psi = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}'\cdot\vec{a}}\psi' \ . \end{aligned}$$

Fordi rotasjonen R bevarer skalarprodukt, har vi at

$$\vec{k} \cdot (R^{-1}\vec{a}) = (R\vec{k}) \cdot (RR^{-1}\vec{a}) = (R\vec{k}) \cdot \vec{a} = \vec{k}' \cdot \vec{a} \ .$$

Altså er ψ og ψ' egentilstander for $U(\vec{a})$ med egenverdiene $\lambda = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{a}}$ og $\lambda' = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}'\cdot\vec{a}}$.

Når U er unitær og har ψ og ψ' som egenfunksjoner, $U\psi = \lambda\psi$ og $U\psi' = \lambda'\psi'$, så er egenverdiene λ og λ' komplekse tall med absoluttverdi 1, $|\lambda| = |\lambda'| = 1$. Og hvis $\lambda \neq \lambda'$, så må ψ og ψ' være ortogonale,

$$(\psi, \psi') = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\, (\psi(\vec{r}))^*\, \psi'(\vec{r}) = 0 \,,$$

fordi

$$\begin{aligned}\lambda'\,(\psi, \psi') &= (\psi, \lambda'\psi') = (\psi, U\psi') = (U^\dagger\psi, \psi') = (U^{-1}\psi, \psi') = (\lambda^{-1}\psi, \psi') \\ &= (\lambda^{-1})^*\,(\psi, \psi') = \lambda\,(\psi, \psi') \,.\end{aligned}$$

2d) Transformasjonene i punktgruppen permuterer de 12 bølgefunksjonene ψ_1 til ψ_{12}, og kan representeres som 12×12-matriser der alle matriseelementene er enten 0 eller 1. Trasen til en slik matrise er antallet enere på diagonalen, altså antallet bølgefunksjoner som transformeres over i seg selv. Karakteren til identitetstransformasjonen er 12, nemlig dimensjonen av matriserepresentasjonen. Alle andre transformasjoner har karakter 0, de transformerer ingen bølgefunksjon over i seg selv.

Vi har altså en representasjon med følgende karakter:

	E	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$
χ	12	0	0	0	0	0

Den er en lineærkombinasjon av de irredusible karakterene,

$$\chi = m_1 A_1 + m_2 A_2 + m_3 B_1 + m_4 B_2 + m_5 E_1 + m_6 E_2 \,,$$

med foreløpig ukjente multiplisiteter $m_1, \ldots, m_6$. Vi har at

$$\sum_g |\chi(g)|^2 = 144 = 12 \sum_{i=1}^{6} {m_i}^2 \,.$$

Det er nok til å vise at representasjonen er redusibel, nemlig $\sum_i {m_i}^2 = 12$.

Hvis $\chi^{(\mu)}$ er en irredusibel representasjon, så er

$$\sum_g (\chi(g))^* \chi^{(\mu)}(g) = 12\chi^{(\mu)}(E) \,.$$

Vår representasjon inneholder derfor den irredusible representasjonen μ med multiplisitet $\chi^{(\mu)}(E)$, som er dimensjonen til den irredusible representasjonen μ. Altså er de endimensjonale representasjonene A_1, A_2, B_1, B_2 inneholdt med multiplisitet 1, og de todimensjonale representasjonene E_1, E_2 er inneholdt med multiplisitet 2.

2e) Den 12-dimensjonale matrisen $\mathbf{T}(\vec{a})$ som representerer translasjonen $\vec{r} \mapsto \vec{a} + \vec{r}$ har matriseelementene

$$T_{lm}(\vec{a}) = \delta_{lm}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}_l\cdot\vec{a}} \,.$$

Hvis $\mathbf{A}$ er en 12-dimensjonal matrise som kommuterer med $\mathbf{T}$, så er

$$\sum_l A_{jl}\, T_{lm}(\vec{a}) = A_{jm}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}_m\cdot\vec{a}} = \sum_l T_{jl}(\vec{a})\, A_{lm} = A_{jm}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}_j\cdot\vec{a}} \,.$$

Hvis $j \neq m$ her, så er $\vec{k}_m \neq \vec{k}_j$ (se Figur 2), og da finnes det en translasjonsvektor $\vec{a}$ slik at $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}_m\cdot\vec{a}} \neq \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}_j\cdot\vec{a}}$. Ligningen ovenfor kan da bare være oppfylt hvis $A_{jm} = 0$. Det viser at $\mathbf{A}$ må være diagonal.

Anta nå at $\mathbf{A}$ er diagonal, $A_{jm} = \delta_{jm}\,\alpha_j$, og kommuterer med alle rotasjonene og refleksjonene. Se på to vilkårlige indekser $j \neq m$. Hvis $\mathbf{A}$ kommuterer med en matrise $\mathbf{B}$, så er

$$\sum_l A_{jl}\,B_{lm} = B_{jm}\,\alpha_j = \sum_l B_{jl}\,A_{lm} = B_{jm}\,\alpha_m \ .$$

Det finnes (minst) en rotasjon eller refleksjon B i symmetrigruppen C_{6v} slik at $B\psi_m = \psi_j$. Da er $B_{jm} = 1$, og fordi $\mathbf{A}$ og $\mathbf{B}$ kommuterer, må $\alpha_j = \alpha_m$. Konklusjon: $\alpha_1 = \alpha_2 = \ldots = \alpha_{12} = \alpha$, og $\mathbf{A}$ er et multiplum av enhetsmatrisen, $\mathbf{A} = \alpha\mathbf{I}$.

Her har vi en gruppe som er uendelig og ikke-kompakt, fordi det ikke finnes noen begrensning på lengden av en translasjonsvektor $\vec{a}$. Men vi har en unitær representasjon av denne gruppen, og en unitær representasjon er alltid enten irredusibel eller en direkte sum av irredusible representasjoner. Da gjelder det omvendte Schurs lemma, at representasjonen er irredusibel dersom bare matriser av formen $\alpha\mathbf{I}$ kommuterer med alle transformasjonsmatrisene.

Vi trekker den konklusjon at vår representasjon av romgruppen, med både translasjoner og rotasjoner (og refleksjoner), er irredusibel.

2f) Translasjonen $\vec{a}_0 = M\vec{a}_1 + N\vec{a}_2$ i planet er identitetstransformasjonen på nanorøret. Translasjonene $k\vec{a}_0$ i planet, med $k = 0, \pm1, \pm2, \ldots$ er da også identitetstransformasjonen på nanorøret. For at en rotasjon eller refleksjon $R \in C_{6v}$ skal tilhøre punktgruppen til nanorøret, er det nødvendig og tilstrekkelig at enten $R\vec{a}_0 = \vec{a}_0$ eller $R\vec{a}_0 = -\vec{a}_0$. Den trivielle løsningen er identitetstransformasjonen $R = E$. En nesten like triviell løsning er rotasjonen på 180°, $R = C_2$. Disse to rotasjonene er alltid symmetrier. Andre rotasjoner kan ikke være symmetrier.

Om det finnes refleksjonssymmetrier, avhenger av heltallene M og N. Enten finnes det to refleksjonssymmetrier, refleksjon langs $\vec{a}_0$ og refleksjon vinkelrett på $\vec{a}_0$, eller det finnes ingen. Vi ser av Figur 1 at det finnes refleksjonssymmetri i følgende tilfeller: (i) $N = 0$, (ii) $M = N$, (iii) $M = 0$, (iv) $M = -N/2$, (v) $M = -N$, (vi) $M = -2N$.

2g) Bølgevektoren $\vec{k}$ til en translasjon som er en symmetri på nanorøret, må oppfylle betingelsen

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot(M\vec{a}_1 + N\vec{a}_2)} = 1 \ .$$

Med $\vec{k} = k_1\vec{b}_1 + k_2\vec{b}_2$ gir det betingelsen

$$Mk_1 + Nk_2 = 2n\pi \ , \qquad n = 0, \pm1, \pm2, \ldots \ .$$

Den definerer Brillouin-sonen til nanorøret som en mengde av parallelle rette linjer i Brillouin-sonen til det heksagonale gitteret.