NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
INSTITUTT FOR FYSIKK

Faglig kontakt under eksamen:
Navn: Jan Myrheim
Telefon: 73 59 36 53 (mobil 90 07 51 72)

Eksamen i fag FY8104 Symmetri i fysikken
Fredag 7. desember 2007
Tid: 09.00–13.00

Sensurfrist: Lørdag 22. desember 2007

Tillatte hjelpemidler: Kalkulator, matematiske tabeller.

Alle deloppgaver teller likt ved sensuren.

Oppgave 1:

En generell tredimensjonal rotasjonsmatrise $\mathbf{R}$, med $\det \mathbf{R} = 1$, kan skrives som

$$\mathbf{R} = \exp(\alpha \vec{n} \cdot \vec{\boldsymbol{\lambda}}) = \exp(\alpha(n_1 \boldsymbol{\lambda}_1 + n_2 \boldsymbol{\lambda}_2 + n_3 \boldsymbol{\lambda}_3)) \ ,$$

der α er rotasjonsvinkelen, enhetsvektoren $\vec{n}$ er rotasjonsaksen, og

$$\boldsymbol{\lambda}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \boldsymbol{\lambda}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} , \quad \boldsymbol{\lambda}_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} .$$

En generell tredimensjonal refleksjonsmatrise $\mathbf{S}$, med $\det \mathbf{S} = -1$, kan skrives som $\mathbf{S} = -\mathbf{R}$, der $\mathbf{R}$ er en rotasjonsmatrise. Da er

$$\begin{aligned} \mathbf{R} \exp(\beta \vec{m} \cdot \vec{\boldsymbol{\lambda}}) \mathbf{R}^{-1} &= \exp(\beta \mathbf{R} (\vec{m} \cdot \vec{\boldsymbol{\lambda}}) \mathbf{R}^{-1}) = \exp(\beta (\mathbf{R} \vec{m}) \cdot \vec{\boldsymbol{\lambda}}) \ , \\ \mathbf{S} \exp(\beta \vec{m} \cdot \vec{\boldsymbol{\lambda}}) \mathbf{S}^{-1} &= \exp(\beta \, \mathbf{S} \, (\vec{m} \cdot \vec{\boldsymbol{\lambda}}) \, \mathbf{S}^{-1}) = \exp(\beta (\mathbf{R} \vec{m}) \cdot \vec{\boldsymbol{\lambda}}) \ . \end{aligned}$$

Til SO(3)-matrisen $\mathbf{R}$ svarer SU(2)-matrisen

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

der $\mathbf{I}$ er identitetsmatrisen og komponentene av $\vec{\boldsymbol{\sigma}}$ er de Hermiteske Pauli-matrisene

$$\boldsymbol{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} , \quad \boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Da er

$$\mathbf{U} \exp\left(-\mathrm{i} \, \frac{\beta}{2} \, \vec{m} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}\right) \mathbf{U}^{-1} = \exp\left(-\mathrm{i} \, \frac{\beta}{2} \, \mathbf{U} (\vec{m} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}) \mathbf{U}^{-1}\right) = \exp\left(-\mathrm{i} \, \frac{\beta}{2} \, (\mathbf{R} \vec{m}) \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}\right) .$$

a) Beskriv konjugasjonsklassene i gruppene SO(3), O(3) og SU(2).

b) Hva er sentret til SU(2) (undermengden av gruppeelementer som kommuterer med alle gruppeelementene)?

Hva er sentret til SU(3)?

Hint: Du kan bruke Schurs lemma, siden både SU(2) og SU(3) er irredusible representasjoner av seg selv.

c) Definer, for hver $\mathbf{U} \in \mathrm{SU}(2)$,

$$\begin{aligned} \rho_1(\mathbf{U}) &= \mathbf{U} \,, \\ \rho_2(\mathbf{U}) &= \mathbf{U}^* = \text{den komplekskonjugerte av } \mathbf{U} \,. \end{aligned}$$

Både ρ_1 og ρ_2 er representasjoner av SU(2) (siden $\rho_1(\mathbf{UV}) = \rho_1(\mathbf{U})\rho_1(\mathbf{V})$ og $\rho_2(\mathbf{UV}) = \rho_2(\mathbf{U})\rho_2(\mathbf{V})$).

Vis at de er ekvivalente representasjoner.

Hva kan dette resultatet fortelle oss om karakterene $\chi_1(\mathbf{U}) = \mathrm{Tr}\,\rho_1(\mathbf{U}) = \mathrm{Tr}\,\mathbf{U}$?

Hint: Et direkte bevis for ekvivalensen er å finne en kompleks 2×2-matrise $\mathbf{V}$, for eksempel $\mathbf{V} \in \mathrm{SU}(2)$, slik at $\mathbf{U}^* = \mathbf{V}\mathbf{U}\mathbf{V}^{-1}$ for alle $\mathbf{U} \in \mathrm{SU}(2)$.

d) Definer, for hver $\mathbf{U} \in \mathrm{SU}(3)$,

$$\begin{aligned} \rho_1(\mathbf{U}) &= \mathbf{U} \,, \\ \rho_2(\mathbf{U}) &= \mathbf{U}^* \,. \end{aligned}$$

Vis at ρ_1 og ρ_2 er inekvivalente representasjoner av SU(3).

e) Kvaterniongruppen har åtte elementer ± 1, $\pm \mathrm{i}$, $\pm \mathrm{j}$ og $\pm \mathrm{k}$, med multiplikasjonsreglene

$$\mathrm{i}^2 = \mathrm{j}^2 = \mathrm{k}^2 = -1 \,, \quad \mathrm{ij} = -\mathrm{ji} = \mathrm{k} \,, \quad \mathrm{jk} = -\mathrm{kj} = \mathrm{i} \,, \quad \mathrm{ki} = -\mathrm{ik} = \mathrm{j} \,.$$

Den er en undergruppe av SU(2), for eksempel når vi identifiserer

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

Finn karaktertabellen til kvaterniongruppen.

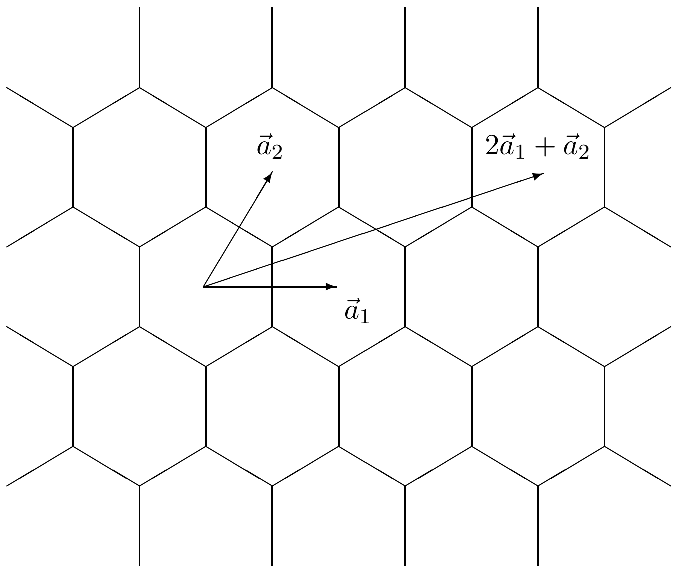
Følgende ortogonalitetsrelasjoner gjelder for en endelig gruppe av orden N.

La $\chi_i^{(\mu)}$ være karakteren til konjugasjonsklassen i, med N_i elementer, i den irredusible representasjonen μ. Da er

$$\begin{aligned} \sum_i N_i (\chi_i^{(\mu)})^* \chi_i^{(\nu)} &= N\,\delta_{\mu\nu} \,, \\ \sum_\mu (\chi_i^{(\mu)})^* \chi_j^{(\mu)} &= \frac{N}{N_i}\,\delta_{ij} \,. \end{aligned}$$

Oppgave 2:

Figur 1 viser et plant heksagonalt gitter, som beskriver for eksempel hvordan karbonatomene er arrangert i et monatomisk lag av grafén. De fundamentale translasjonsvektorene $\vec{a}_1$ og $\vec{a}_2$ er vist. Translasjonssymmetrigruppen til gitteret består av alle translasjonene $\vec{a} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2$ med m og n heltallige.



Figur 1: Et plant heksagonalt gitter (grafén).

a) Beskriv den fulle tredimensjonale punktgruppen til det heksagonale gitteret.

Hva er ordenen til denne gruppen (antallet elementer)?

For enkelhets skyld vil vi heretter se på det heksagonale gitteret som en todimensjonal struktur. Punktgruppen er da C_{6v}, som har en seksfoldig rotasjonsakse og seks vertikale refleksjonsplan.

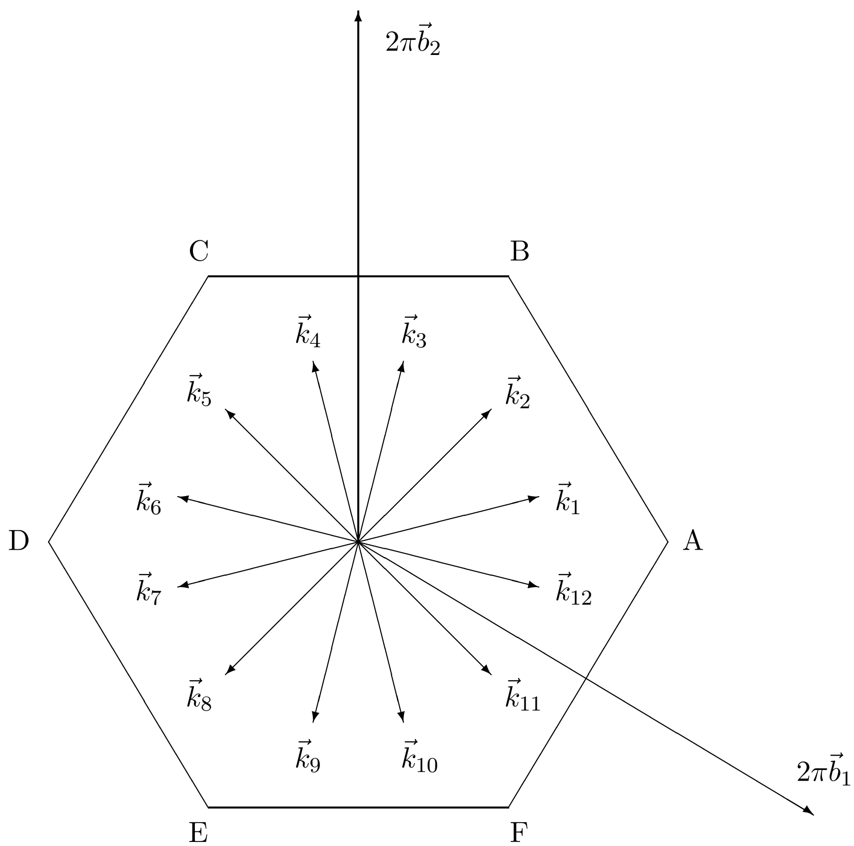
Det todimensjonale resiproke gitteret spennes ut av de resiproke basisvektorene $\vec{b}_1$ og $\vec{b}_2$, definert ved dualitetsbetingelsene

$$\vec{b}_1 \cdot \vec{a}_1 = \vec{b}_2 \cdot \vec{a}_2 = 1 \ , \qquad \vec{b}_1 \cdot \vec{a}_2 = \vec{b}_2 \cdot \vec{a}_1 = 0 \ .$$

En bølgevektor $\vec{k} = k_1\vec{b}_1 + k_2\vec{b}_2$ definer en irredusibel unitær representasjon av translasjonsgruppen, slik at

$$\vec{a} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2 \rightarrow \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{a}} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k_1 m + k_2 n)} \ . \tag{1}$$

Figur 2 viser den såkalte første Brillouin-sonen av bølgevektorer som definerer irredusible representasjoner av translasjonsgruppen til det heksagonale gitteret.



Figur 2: Første Brillouin-sone.

Brillouin-sonen inkluderer alle de irredusible representasjonene til den diskrete translasjonsgruppen, siden to bølgevektorer $\vec{k}$ og $\vec{k}+2\pi(m'\vec{b}_1+n'\vec{b}_2)$ med m' og n' heltallige definerer den samme irredusible representasjonen. For en bølgevektor på randa av Brillouin-sonen finnes det minst en annen bølgevektor på randa som definerer den samme irredusible representasjonen. Det vil si at randstykket AB, i retning fra A til B, identifiseres med randstykket ED, i retning fra E til D. Randstykkene BC og FE identifiseres, likeså randstykkene CD og AF. Hjørnene A, B, C, D, E og F er spesialtilfeller, siden de tre hjørnene A, C, E definerer samme representasjon, og B, D, F definerer samme representasjon.

b) En irredusibel unitær representasjon av translasjonsgruppen må være endimensjonal, som i ligning (1). Hvorfor?

c) Vi tar for oss et elektron som beveger seg i et potensial med symmetrien til det plane heksagonale gitteret. For enkelhets skyld ser vi bort fra egenspinnet til elektronet, og antar at den fysiske tilstanden til elektronet beskrives av en skalar bølgefunksjon $\psi = \psi(\vec{r})$.

En symmetritransformasjon $\vec{r} \to \vec{r}\,' = f(\vec{r})$ transformerer bølgefunksjonen ψ til ψ', slik at $\psi'(\vec{r}\,') = \psi(\vec{r})$. Det betyr at

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(f^{-1}(\vec{r})) \ .$$

Vi skriver $\psi' = U(f)\psi$, der $U(f)$ er den unitære operatoren som representerer transformasjonen f. Spesielt er $U(\vec{a})$ og $U(R)$ de unitære operatorene som representerer translasjonen $\vec{a} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2$ og rotasjonen eller refleksjonen R.

Vis at hvis $U(\vec{a})\psi = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{a}}\psi$, og $\psi' = U(R)\psi$, så er $U(\vec{a})\psi' = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}'\cdot\vec{a}}\psi'$ med $\vec{k}' = R\vec{k}$.

Med den samme notasjonen, vis at ψ og ψ' er ortogonale hvis $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}'\cdot\vec{a}} \neq \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{a}}$.

Hint: Du kan vise mer generelt at to egentilstander til en unitær operator med ulike egenverdier er ortogonale.

d) Gitt en typisk bølgevektor $\vec{k}_1$ innenfor Brillouin-sonen, og en bølgefunksjon ψ_1 med $U(\vec{a})\psi_1 = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}_1\cdot\vec{a}}\psi_1$.

Bølgevektoren $\vec{k}_1$ transformeres av punktgruppen C_{6v} over i en stjerne av 12 bølgevektorer $\vec{k}_1$ til $\vec{k}_{12}$, som vist i Figur 2. Tilsvarende transformeres bølgefunksjonen ψ_1 over i et sett av 12 ortogonale bølgefunksjoner ψ_1 til ψ_{12}. Disse 12 bølgefunksjonene er ortogonale basisvektorer som definerer en 12-dimensjonal unitær matriserepresentasjon av hele romgruppen, inkludert translasjoner, rotasjoner og refleksjoner.

Vis at dette er en redusibel representasjon av punktgruppen C_{6v}, og finn multiplisitetene til de irredusible representasjonene den inneholder.

Karaktertabellen til gruppen C_{6v} er gitt nedenfor, side 6.

e) I den 12-dimensjonale matriserepresentasjonen av romgruppen beskrevet ovenfor, representeres alle translasjonene av diagonale matriser.

Vis at hvis en 12×12-matrise kommuterer med alle translasjonene, så må den være diagonal.

Vis videre at hvis en diagonalmatrise kommuterer med alle rotasjonene og refleksjonene, så må alle diagonalelementene være like.

Som konklusjon: enhver 12×12-matrise som kommuterer med alle translasjonene, rotasjonene og refleksjonene, må være et multiplum av identitetsmatrisen.

Beviser dette at vi har en irredusibel representasjon av romgruppen?
Forklar hvorfor eller hvorfor ikke.

f) Et karbon nanorør er et ark av grafén som rulles opp til en sylinder. Opprullingen beskrives av to heltall M og N, slik at et punkt $\vec{r}$ i planet identifiseres med punktet $\vec{r} + M\vec{a}_1 + N\vec{a}_2$.

Se Figur 1 for et eksempel med $M = 2$, $N = 1$.

Punktgruppen til nanorøret er en undergruppe av C_{6v}. Hvilken undergruppe?

Svaret kan avhenge av heltallene M og N.

For hvilke verdier av M og N inneholder punktgruppen til nanorøret refleksjonssymmetrier?

Et nanorør sies å være *kiralt* hvis det ikke har noen refleksjonssymmetri.

g) Translasjonen $M\vec{a}_1 + N\vec{a}_2$ er identitetstransformasjonen på nanorøret, og denne kjensgjerningen legger en restriksjon på mengden av bølgevektorer som definerer representasjoner av translasjonsgruppen.

Det er mulig å se på Brillouin-sonen til nanorøret som en delmengde av Brillouin-sonen til det heksagonale gitteret. Beskriv denne delmengden.

De irredusible karakterene til C_{6v}

Notasjon:
E: enhetselementet;
C_n: rotasjon av orden n, $(C_n)^n = E$;
σ: refleksjon;
A, B: endimensjonale representasjoner;
E: todimensjonale representasjoner.

	E	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1	-1	1
B_2	1	-1	1	-1	1	-1
E_1	2	-2	-1	1	0	0
E_2	2	2	-1	-1	0	0

THE NORWEGIAN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
DEPARTMENT OF PHYSICS

Contact person:
Name: Jan Myrheim
Telephone: 73 59 36 53 (mobil 90 07 51 72)

Examination, course FY8104 Symmetry in physics
Friday December 7, 2007
Time: 09.00–13.00

Grades made public: Saturday December 22, 2007

Allowed to use: Calculator, mathematical tables.

All subproblems are given the same weight in the grading.

Problem 1:

A general three dimensional rotation matrix $\mathbf{R}$, with $\det \mathbf{R} = 1$, may be written as

$$\mathbf{R} = \exp(\alpha \vec{n} \cdot \vec{\boldsymbol{\lambda}}) = \exp(\alpha(n_1 \boldsymbol{\lambda}_1 + n_2 \boldsymbol{\lambda}_2 + n_3 \boldsymbol{\lambda}_3)) \ ,$$

where α is the rotation angle, the unit vector $\vec{n}$ is the rotation axis, and

$$\boldsymbol{\lambda}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \boldsymbol{\lambda}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} , \quad \boldsymbol{\lambda}_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} .$$

A general three dimensional reflection matrix $\mathbf{S}$, with $\det \mathbf{S} = -1$, may be written as $\mathbf{S} = -\mathbf{R}$, where $\mathbf{R}$ is a rotation matrix. Then

$$\begin{aligned} \mathbf{R} \exp(\beta \vec{m} \cdot \vec{\boldsymbol{\lambda}}) \mathbf{R}^{-1} &= \exp(\beta \mathbf{R} (\vec{m} \cdot \vec{\boldsymbol{\lambda}}) \mathbf{R}^{-1}) = \exp(\beta (\mathbf{R} \vec{m}) \cdot \vec{\boldsymbol{\lambda}}) \ , \\ \mathbf{S} \exp(\beta \vec{m} \cdot \vec{\boldsymbol{\lambda}}) \mathbf{S}^{-1} &= \exp(\beta \mathbf{S} (\vec{m} \cdot \vec{\boldsymbol{\lambda}}) \mathbf{S}^{-1}) = \exp(\beta (\mathbf{R} \vec{m}) \cdot \vec{\boldsymbol{\lambda}}) \ . \end{aligned}$$

To the SO(3) matrix $\mathbf{R}$ corresponds the SU(2) matrix

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

where $\mathbf{I}$ is the identity matrix and the components of $\vec{\boldsymbol{\sigma}}$ are the Hermitean Pauli matrices

$$\boldsymbol{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} , \quad \boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Then

$$\mathbf{U} \exp\left(-\mathrm{i} \frac{\beta}{2} \vec{m} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}\right) \mathbf{U}^{-1} = \exp\left(-\mathrm{i} \frac{\beta}{2} \mathbf{U} (\vec{m} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}) \mathbf{U}^{-1}\right) = \exp\left(-\mathrm{i} \frac{\beta}{2} (\mathbf{R} \vec{m}) \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}\right) .$$

a) Describe the conjugation classes of the groups SO(3), O(3), and SU(2).

b) What is the centre of SU(2) (the subset of group elements commuting with all group elements)?

What is the centre of SU(3)?

Hint: You may use Schur's lemma, since both SU(2) and SU(3) are irreducible representations of themselves.

c) Define, for every $\mathbf{U} \in \mathrm{SU}(2)$,

$$\begin{aligned} \rho_1(\mathbf{U}) &= \mathbf{U} \, , \\ \rho_2(\mathbf{U}) &= \mathbf{U}^* = \text{the complex conjugate of } \mathbf{U} \, . \end{aligned}$$

Both ρ_1 and ρ_2 are representations of SU(2) (since $\rho_1(\mathbf{UV}) = \rho_1(\mathbf{U})\rho_1(\mathbf{V})$ and $\rho_2(\mathbf{UV}) = \rho_2(\mathbf{U})\rho_2(\mathbf{V})$).

Show that they are equivalent representations.

What can this result tell us about the characters $\chi_1(\mathbf{U}) = \mathrm{Tr}\,\rho_1(\mathbf{U}) = \mathrm{Tr}\,\mathbf{U}$?

Hint: The direct proof of equivalence is to find a complex 2×2 matrix $\mathbf{V}$, for example $\mathbf{V} \in \mathrm{SU}(2)$, such that $\mathbf{U}^* = \mathbf{V}\mathbf{U}\mathbf{V}^{-1}$ for every $\mathbf{U} \in \mathrm{SU}(2)$.

d) Define, for every $\mathbf{U} \in \mathrm{SU}(3)$,

$$\begin{aligned} \rho_1(\mathbf{U}) &= \mathbf{U} \, , \\ \rho_2(\mathbf{U}) &= \mathbf{U}^* \, . \end{aligned}$$

Show that ρ_1 and ρ_2 are inequivalent representations of SU(3).

e) The quaternion group has eight elements ± 1, $\pm \mathrm{i}$, $\pm \mathrm{j}$, and $\pm \mathrm{k}$, with the multiplication rules

$$\mathrm{i}^2 = \mathrm{j}^2 = \mathrm{k}^2 = -1 \, , \quad \mathrm{ij} = -\mathrm{ji} = \mathrm{k} \, , \quad \mathrm{jk} = -\mathrm{kj} = \mathrm{i} \, , \quad \mathrm{ki} = -\mathrm{ik} = \mathrm{j} \, .$$

It is a subgroup of SU(2), for example with the identifications

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

Find the character table of the quaternion group.

The following orthogonality relations hold for a finite group of order N.

Let $\chi_i^{(\mu)}$ be the character of the conjugation class i, with N_i elements, in the irreducible representation μ. Then

$$\begin{aligned} \sum_i N_i (\chi_i^{(\mu)})^* \chi_i^{(\nu)} &= N \, \delta_{\mu\nu} \, , \\ \sum_\mu (\chi_i^{(\mu)})^* \chi_j^{(\mu)} &= \frac{N}{N_i} \, \delta_{ij} \, . \end{aligned}$$

Problem 2:

Figure 1 shows a planar hexagonal lattice, describing for example the arrangement of carbon atoms in a monatomic layer of graphene. The basic translation vectors $\vec{a}_1$ and $\vec{a}_2$ are shown. The translational symmetry group of the lattice consists of all translations $\vec{a} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2$ with m and n integer.

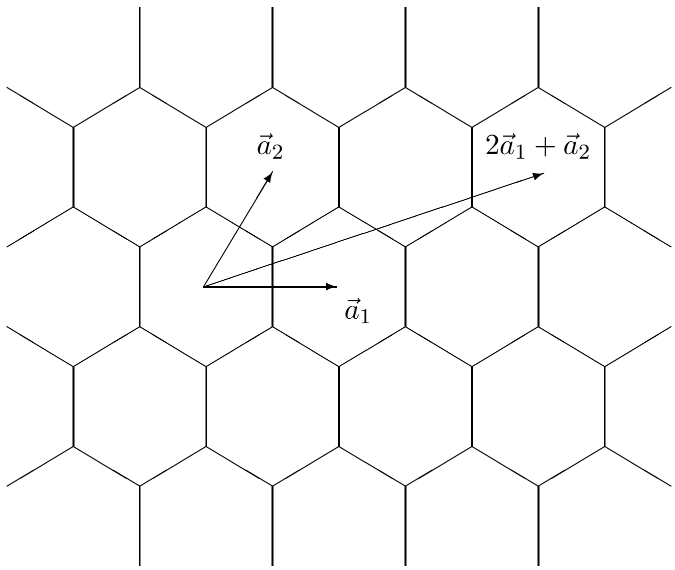


Figure 1: A planar hexagonal lattice (graphene).

a) Describe the full three dimensional point group of the hexagonal lattice.

What is the order (number of elements) of this group?

For simplicity, in what follows we will regard the hexagonal lattice as a two dimensional structure. Then the point group is C_{6v}, having a six-fold rotation axis and six vertical reflection planes.

The two dimensional reciprocal lattice is spanned by the reciprocal basis vectors $\vec{b}_1$ and $\vec{b}_2$, defined by the duality conditions

$$\vec{b}_1 \cdot \vec{a}_1 = \vec{b}_2 \cdot \vec{a}_2 = 1 \ , \qquad \vec{b}_1 \cdot \vec{a}_2 = \vec{b}_2 \cdot \vec{a}_1 = 0 \ .$$

A wave vektor $\vec{k} = k_1\vec{b}_1 + k_2\vec{b}_2$ defines an irreducible unitary representation of the translation group such that

$$\vec{a} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2 \to \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{a}} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k_1 m + k_2 n)} \ . \tag{1}$$

Figure 2 shows the so called first Brillouin zone of wave vectors defining irreducible representations of the translation group of the hexagonal lattice.

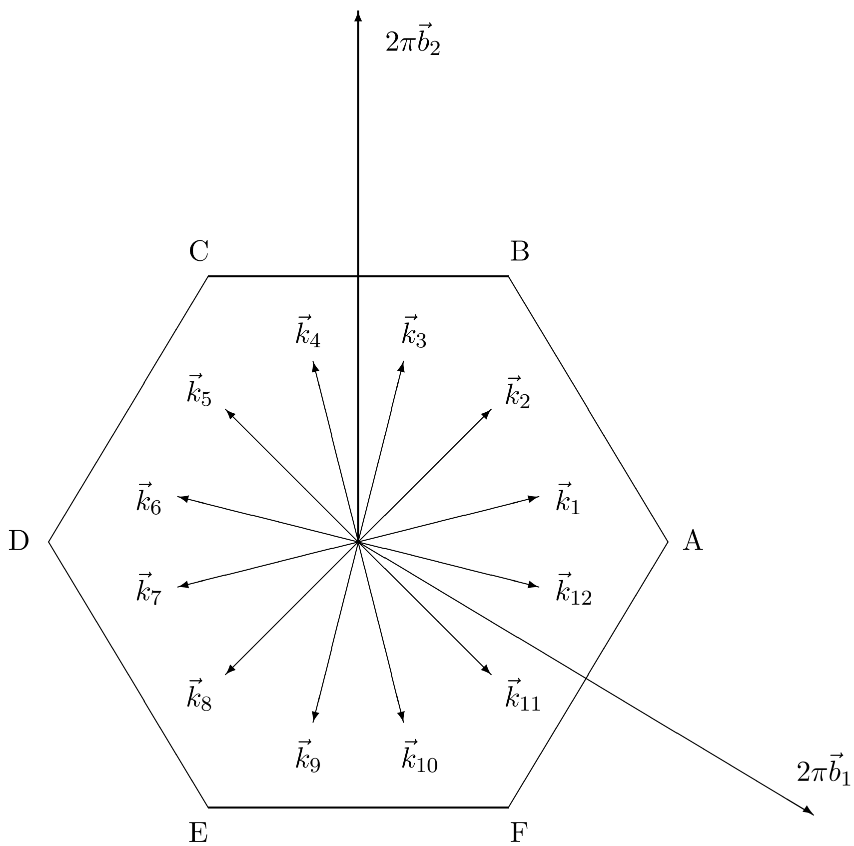


Figure 2: The first Brillouin zone.

The Brillouin zone includes all irreducible representations of the discrete translation group, since two wave vectors $\vec{k}$ and $\vec{k} + 2\pi(m'\vec{b}_1 + n'\vec{b}_2)$ with m' and n' integer define the same irreducible representation. For a wave vector on the edge of the Brillouin zone there is at least one other wave vector on the edge defining the same irreducible representation. Thus, the edge AB, in direction from A to B, is identified with the edge ED, in direction from E to D. The edges BC and FE are identified, as are the edges CD and AF. The corners A, B, C, D, E, F are special cases, since the three corners A, C, E define the same representation, and B, D, F define the same representation.

b) An irreducible unitary representation of the translation group must be one dimensional, as in Equation (1). Why?

c) We consider one electron moving in a potential with the symmetry of the planar hexagonal lattice. For simplicity, we disregard the intrinsic spin of the electron and take the physical state of the electron to be described by a scalar wave function $\psi = \psi(\vec{r})$.

A symmetry transformation $\vec{r} \to \vec{r}\,' = f(\vec{r})$ transforms the wave function ψ into ψ', such that $\psi'(\vec{r}\,') = \psi(\vec{r})$. That is,

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(f^{-1}(\vec{r}))\ .$$

We write $\psi' = U(f)\psi$, where $U(f)$ is the unitary operator representing the transformation f. In particular, $U(\vec{a})$ and $U(R)$ are the unitary operators representing the translation $\vec{a} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2$ and the rotation or reflection R.

Show that if $U(\vec{a})\psi = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{a}}\psi$, and $\psi' = U(R)\psi$, then $U(\vec{a})\psi' = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}'\cdot\vec{a}}\psi'$ with $\vec{k}' = R\vec{k}$.

With the same notation, show that ψ and ψ' are orthogonal if $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}'\cdot\vec{a}} \neq \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{a}}$.

Hint: You may show more generally that eigenstates of a unitary operator with different eigenvalues are orthogonal.

d) Given a typical wave vector $\vec{k}_1$ inside the Brillouin zone, and a wave function ψ_1 with $U(\vec{a})\psi_1 = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}_1\cdot\vec{a}}\psi_1$.

The wave vector $\vec{k}_1$ is transformed by the point group C_{6v} into a star of 12 wave vectors $\vec{k}_1$ to $\vec{k}_{12}$, as shown in Figure 2. Similarly, the wave function ψ_1 is transformed into a set of 12 orthogonal wave functions ψ_1 to ψ_{12}. These 12 wave functions are orthogonal basis vectors defining a 12 dimensional unitary matrix representation of the whole space group, including translations, rotations and reflections.

Show that this is a reducible representation of the point group C_{6v}, and find the multiplicities of the irreducible representations it contains.

The character table of the group C_{6v} is given below, on page 6.

e) In the above 12 dimensional matrix representation of the space group, the translations are represented by diagonal matrices.

Show that if a 12×12 matrix commutes with all the translations, then it must be diagonal.

Show further that if a diagonal matrix commutes with all the rotations and reflections, then all its diagonal elements must be equal.

In conclusion, any 12×12 matrix which commutes with all translations, rotations and reflections must be a multiple of the identity.

Does this prove that we have an irreducible representation of the space group?
Explain why or why not.

f) A carbon nanotube is a sheet of graphene rolled up into a cylinder. The rolling up is described by two integers M and N, in such a way that a point $\vec{r}$ in the plane becomes identified with the point $\vec{r} + M\vec{a}_1 + N\vec{a}_2$.

See Figure 1 for an example with $M = 2$, $N = 1$.

The point group of the nanotube is a subgroup of C_{6v}. Which subgroup?

The answer may depend on the integers M and N.

For which values of M and N does the point group of the nanotube include reflection symmetries?

A nanotube is said to be *chiral* if it has no reflection symmetry.

g) The translation $M\vec{a}_1 + N\vec{a}_2$ is the identity transformation on the nanotube, and this fact imposes a restriction on the set of wave vectors defining representations of the translation group.

It is possible to regard the Brillouin zone of the nanotube as a subset of the Brillouin zone of the hexagonal lattice. Describe this subset.

The irreducible characters of C_{6v}

Notation:
E: unit element;
C_n: order n rotation, $(C_n)^n = E$;
σ: reflection;
A, B: one dimensional representations;
E: two dimensional representations.

	E	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1	-1	1
B_2	1	-1	1	-1	1	-1
E_1	2	-2	-1	1	0	0
E_2	2	2	-1	-1	0	0