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

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

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

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

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 $\mathbf{U}^* = \mathbf{VUV}^{-1}$ 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.

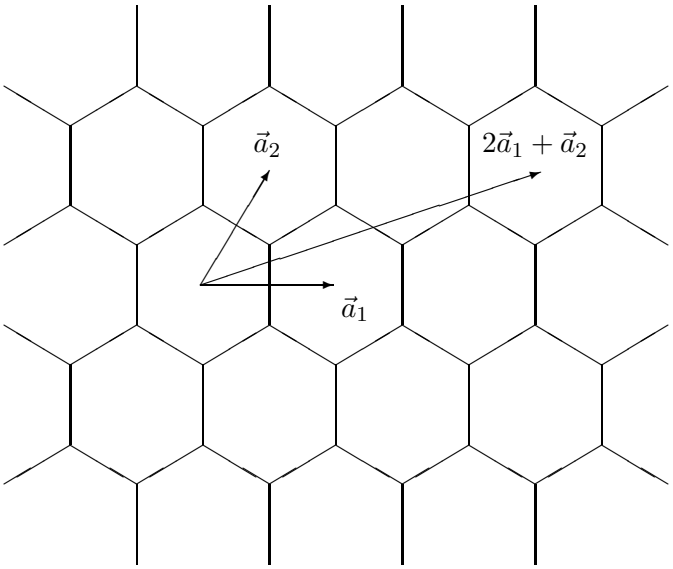
Følgende ortogonalitetsrelasjoner gjelder for en endelig gruppe av orden N.

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.

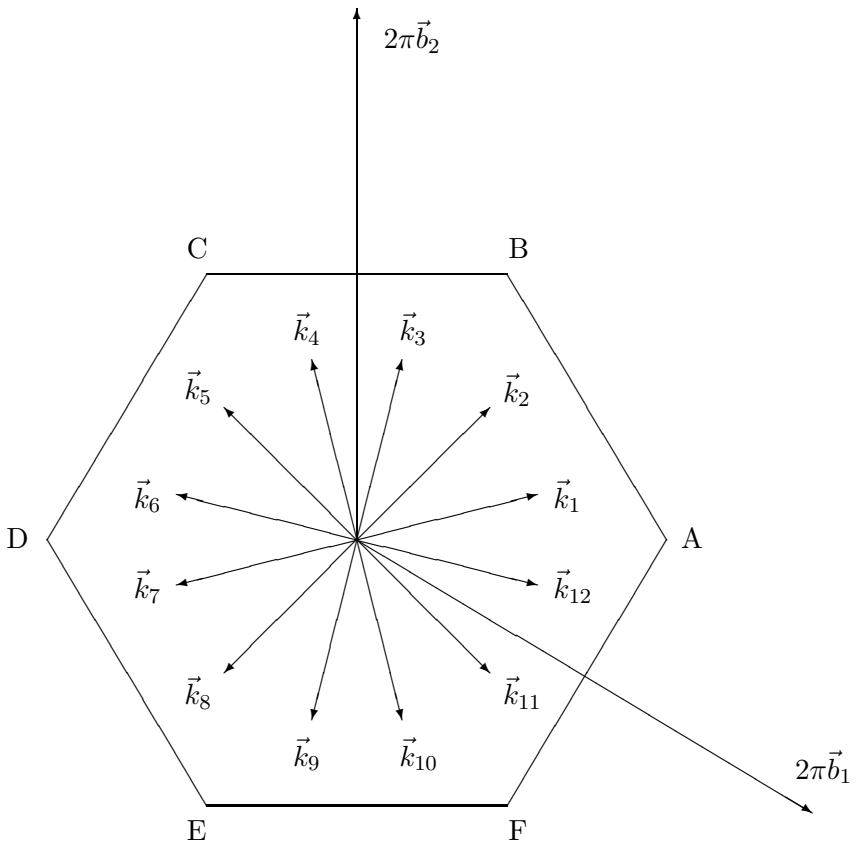
Det todimensjonale resiproke gitteret spennes ut av de resiproke basisvektorene $\vec{b}_1$ og $\vec{b}_2$, definert ved dualitetsbetingelsene

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

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