Reprezentacje grup punktowych

związki pomiędzy *h* i n_a jednoznacznie wyznaczają wymiary wszystkich reprezentacji grup punktowych,
a związki ortogonalności jednoznacznie wyznaczają ich charaktery

oznaczenia:

- **reprezentacje jednowymiarowe A, B**
- **A, np. takie dla których $\chi = 1$**
- **E – dwuwymiarowe, F – trójwymiarowe**
- **parzyste wzgl. inwersji lub σ_h znak +**
  nieparzyste - znak -

kilka przykładów

1. **grupy cykliczne C_n i S_n**

   grupy abelowe - *h* = liczbie klas => wszystkie rep. 1D
   liczba nieprzywiedlnych reprezentacji = *h*

$$\chi^n(c_n) = \chi(c_n^n) = \chi(e) = 1$$

   to muszą być to pierwiastki z liczby 1 ....

$$\chi(c_n^k) = e^{\frac{2\pi i M}{n}k}$$

   ***M = 0, 1, 2, ... , n-1*; numeruje kolejne reprezentacje...**

   k – numeruje elementy grupy (tu – klasy)

   tworzenie tabeli charakterów

np. dla grupy C_2 (dwie klasy, h=2, => dwie nreps. o wym. =1)

klasy -> ozn. reprezentacji	e	C_2
A	1	1
B	1	-1

jeśli wybierzemy oś obrotu jako oś Z, to funkcja bazowa reprezentacji A nie może zależeć od x, y; budując ją ze składowych wektora X, możemy wybrać np.: $\phi_A(x,y,z) = z$
lub dowolna funkcja sferycznie symetryczna –

grupa takich obrotów może dotyczyć zarówno układu (hamiltonianu) o symetrii sferycznej jak i o symetrii osiowej...

dla reprezentacji B : $\phi_B(x,y,z) = x$ **lub** $\phi_B(x,y,z) = y$
lub dowolna funkcja dla której C_2 przeprowadza x -> -x

jeśli to mają być funkcje H, to muszą dodatkowo być pomnożone przez niezmienniczy czynnik zapewniający kwadratową całkowalność
{np. ϕ_B mogłoby być funkcją wodorową $p_x(\underline{\mathbf{r}})$ }

grupa C_3 (3 klasy, h=3, => 3 nreps o wymiarze =1)

C_3	E	C_3	C_3^2
A	1	1	1
B_1	1	p	p^2
B_2	1	p^2	p

$$p = e^{2\pi i/3}$$

możliwe funkcje bazowe (jako składowe wektora biegunowego X)

A : z **tzn.** $f_A(x,y,z) = z$,
B_1 : x – iy **tzn.** $f_A(x,y,z) = x - iy$, itd.;
B_2 : x + iy

rzeczywiście: po obrocie wokół Z o $2\pi/3$

$$x \to x\cos(2\pi/3) + y\sin(2\pi/3)$$
$$-iy \to i\,x\sin(2\pi/3) - iy\cos(2\pi/3)$$

co w rezultacie daje

$$x\exp(i(2\pi/3) - iy\exp(i(2\pi/3) = \exp(i(2\pi/3) * (x - iy)$$

2. grupa D_3 (lub izomorficzna do niej C_{3v})

nie jest abelowa, *h* = 6, 3 klasy
zatem wymiary reps. nieredukowalnych:

1, 1, 2 $(1^2 + 1^2 + 2^2 = 6)$

jedna z nreps 1D ma wszystkie charaktery = 1 (A_1)
z warunku ortogonalności charakterów musimy mieć
dla A_2 : $\chi(e)=1$, $\chi(C_3)=1$, $\chi(u_2)= -1$,

D_3	E	$2C_3$	$3u_2$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0

charakter $\chi_e^E = 2$, natomiast pozostałe wynikają z warunków ortogonalności (ćwiczenia)

funkcje bazowe reprezentacji A_1 nie mogą zależeć liniowo od z
(u_2 przenosiłoby wówczas z -> -z),

możliwe są np: $\phi_{A1}(x,y,z) = z^2$ lub $\phi_{A1}(x,y,z) = x^2 + y^2$
dla A_2 możemy mieć $\phi_{A2}(x,y,z) = z$
bazę E mogą stanowić $\phi_B^1(x,y,z) = x$ i $\phi_B^2(x,y,z) = y$

zauważmy podobieństwo w postaci tych funkcji to funkcji wodorowych czy orbitali atomowych

Reprezentacje grupy translacji

grupa jest abelowa – wszystkie reprezentacje nieprzywiedlne są 1D
zatem dla wektorów bazowych a_1 , a_2 , a_3 , (generatorów grupy) mamy

$$(e\,|\,\mathbf{a}_i)\varphi(\mathbf{x}) = \lambda_i \varphi(\mathbf{x})$$

funkcję bazową oznaczymy jako

$$\varphi_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}(\mathbf{x})$$

z unitarności reprezentacji wynika $|\lambda_i| = 1$

dla translacji o dowolny wektor a

$$\mathbf{a} = m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2 + m_3\mathbf{a}_3$$
$$(e\,|\,\mathbf{a})\varphi_{\lambda_1\lambda_2\lambda_{31}}(\mathbf{x}) = \lambda_1^{m_1}\lambda_2^{m_2}\lambda_3^{m_3}\varphi_{\lambda_1\lambda_2\lambda_{31}}(\mathbf{x})$$

trójka liczb λ_i jednoznacznie definiuje reprezentację grupy;

wprowadzając oznaczenie

(A6) $$\lambda_i = \exp(-ika_i)$$

możemy reprezentację „numerować" za pomocą wektora k ;

oznaczenie to nie jest jednoznaczne:

wprowadzając pojęcie wektorów sieci odwrotnej:
(uwaga, λ jest niemianowane, zatem k – ma wymiar odwrotności długości)

$$\mathbf{b}_i = \tfrac{2\pi}{\Omega_0}[\mathbf{a}_{i+1} \times \mathbf{a}_{i+2}]$$

(gdzie np. dla i=2 (y), i+1=3 (z), i+2=1 (x))
a $\Omega_0 = (a_1\,[a_2 \times a_3\,])$

mamy

$$\mathbf{b}_i\mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

i zatem
(A7)

$$e^{i\mathbf{b}_i\mathbf{a}_j} = 1$$

wektory

$$\mathbf{b} = n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2 + n_3\mathbf{b}_3$$

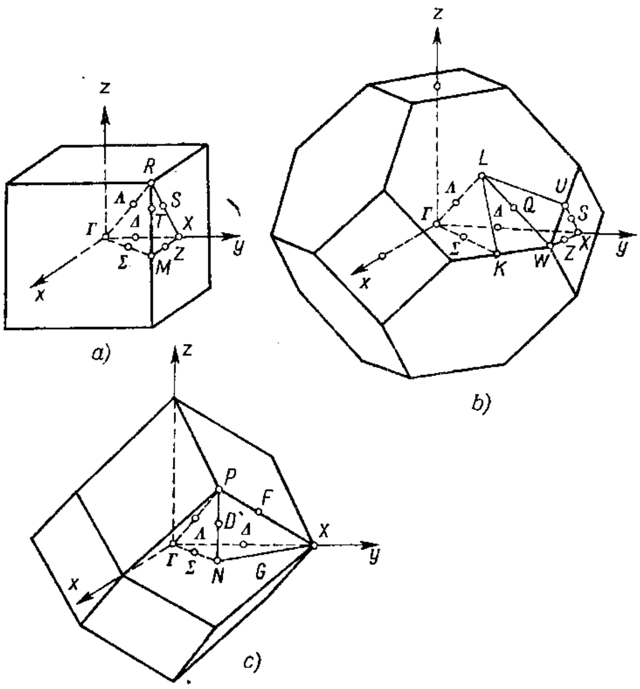
tworzą sieć odwrotną o takiej samej grupie punktowej jak sieć prosta (choć w ogólności w innym typie)

z (A7 i A6) wynika, że k są określone z dokładnością do dowolnego wektora sieci odwrotnej

tzn. jeśli k' = k + b to $\exp(-ik'a_i)=\exp(-ika_i)\exp(-in_i2\pi)= \exp(-ika_i)$ co daje to samo λ_i

Strefa Brillouina

komórka Wignera-Seitza w sieci odwrotnej obejmuje wszystkie nierównoważne sobie wektory b, jest niezmiennicza wzgl. wszystkich operacji grupy punktowej i ma obj. kom. elementarnej



Reprezentacje grupy przestrzennej

reprezentacje grupy przestrzennej G_P można zbudować w oparciu o jednowymiarowe reprezentacje grupy translacji G_T (będącej podgrupą grupy G_p)

weźmy dowolną reprezentację D grupy przestrzennej; niech dimD = s, a baza

$$\varphi_1 , \varphi_2 , \ldots , \varphi_s$$

D - jest redukowalna ze względu na podgrupy translacji w G_P

(tzn. jeśli operacje G_P ograniczymy do translacji, to wszystkie odpowiadające tym translacjom macierze z rep. D dadzą się zredukować do jednowymiarowych)

tzn.:

jeśli kolejne φ_i wybierzemy („obrócimy" tak aby stały się) jako bazy (jednowymiarowe) nieredukowalnych reprezentacji grupy G_T to macierz *D*(t_a) = *D*(e|a) będzie diagonalna;

każdy diagonalny element *D*(t_a) będzie postaci λ = exp(-ika) , a macierz *D*(t_a) ma wymiar s;

wśród s wektorów k , niektóre mogą być identyczne, lub równoważne, tzn. różniące się o wektor sieci odwrotnej K

(zbudowany jako $\mathbf{K} = n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2 + n_3\mathbf{b}_3$)

<u>def.</u>

***<u>gwiazda {GR} reprezentacji</u>* D to zbiór *n* różnych k_i (n ≤ s)**

(pamiętamy, że cały czas mamy na myśli reprezentację grupy G_P)

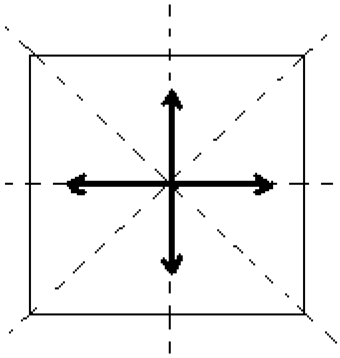
wszystkie <u>różne</u> k_i tworzące gwiazdę, tworzą tzw. promienie gwiazdy

(tu jeszcze nie wiemy czy gwiazda jest „*symetryczna*")

<u>Tw.</u>
gwiazda reprezentacji jest niezmiennicza względem operacji grupy G_P , tzn. $k' = gk = rk \in \{GR\}$

albo inaczej mówiąc: jeśli w {GR} jest k, to jest tam też każdy $k' = rk$

(przykład gwiazdy nieprzywiedlnej)

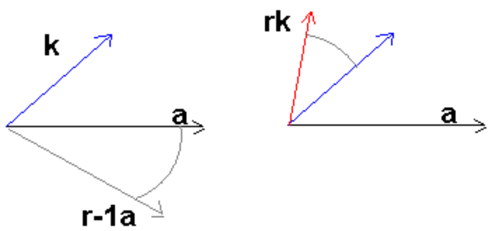


(symbol $gk=(r|\alpha+a)k$ rozumiemy jako $(r|\alpha)k$, bo translacja o a odpowiada przejściu do k'' równoważnego k)

<u>dowód:</u>
niech $(r|\alpha)$ jest elementem G o translacji ułamkowej α i elemencie obrotowym *r*

ponieważ:

- **pamiętamy, że $(r|a)= t_a r$, oraz, że $rt_a = t_{ra}\, r$**
- **translacje są przemienne, zatem:**
  $t_a e t_\alpha r = t_\alpha e t_a r = t_\alpha e\, r\, t_{r-1\, a} = t_\alpha r\, e\, t_{r-1\, a}$
- **w iloczynie skalarnym $k \cdot r^{-1} a$, obrót na „a” to to samo co obrót „przeciwny” na k,**



(formalnie nie powinniśmy rysować razem k i a gdyż należą do różnych przestrzeni, ale tu chodzi o ilustrację iloczynu skalarnego)

niech

$$(e\,|\,\mathbf{a})\varphi_k = e^{-i\mathbf{ka}}\varphi_k$$

tzn. jest to funkcja bazy reprezentacji G_P będąca funkcją własną operatora translacji t_a o wektor a,

zatem (sprawdźmy czy $(r\,|\,\boldsymbol{\alpha})\varphi_k$ jest też funkcją własną operatora translacji o wektor a i do jakiej wartości k ?, inaczej – czy φ_k jest funkcją własną g) **,**

$$(e\,|\,\mathbf{a})(r\,|\,\boldsymbol{\alpha})\varphi_k = (r\,|\,\boldsymbol{\alpha})(e\,|\,r^{-1}\mathbf{a})\varphi_k = (r\,|\,\boldsymbol{\alpha})e^{-i\mathbf{k}r^{-1}\mathbf{a}}\varphi_k = e^{-ir\mathbf{ka}}(r\,|\,\boldsymbol{\alpha})\varphi_k$$

a to dowodzi, że funkcja $\tilde{\varphi} = (r\,|\,\boldsymbol{\alpha})\varphi_k$ jest funkcją własną operatora translacji t_a odpowiadającą wektorowi falowemu

k' = rk

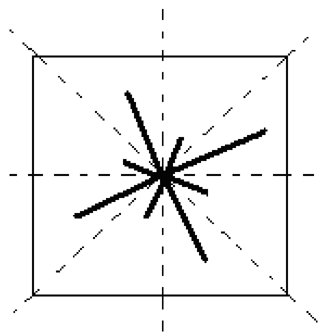
uwaga: wybraliśmy jedną z funkcji bazowych reprezentacji D, odpowiadającą wektorowi k z {GR}, dla translacji t_a, i okazało się, że k' = rk odpowiada tej samej translacji t_a, zatem k' też musi należeć do {GR} bo właśnie rozpatrywaliśmy macierz D(t_a)

□

zauważmy, że teraz operacji grupy G dokonujemy na grupie wektorów k (z sieci odwrotnej)

biorąc jakikolwiek wektor k_1 z gwiazdy, możemy podziałać na niego wszystkimi operacjami r, $rk_1 = k_j$

- **jeśli zbiór k_j wyczerpuje całą gwiazdę reprezentacji D, to taka gwiazda nazywa się nieprzywiedlną**
- **jeśli zbiór k_j nie wyczerpuje całej gwiazdy, to jest ona przywiedlna; można rozłożyć ją na nieprzywiedlne, konstruując różne zbiory gk_i, o rozłącznych zespołach wektorów falowych k_j ,**



takie rozłączne zbiory wektorów falowych tworzą oddzielne nieprzywiedlne gwiazdy reprezentacji D, {NGR}

funkcje $\{ \varphi_k \}$, dla $k \in$ {NGR} tworzą bazy (dla różnych nieprzywiedlnych gwiazd) nieredukowalnych reprezentacji grupy G_P

= transformują się między sobą pod wpływem operacji $r \in G_p$

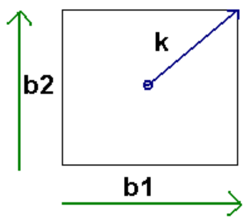
Grupa wektora falowego

def.
Podgrupa G_k, grupy G_P, składająca się z elementów nie zmieniających wektora falowego k, lub przeprowadzających go w równoważne ($k' = k + K$), nazywa się *grupą wektora falowego k*

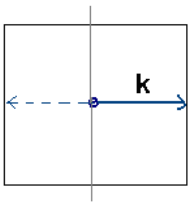
kilka własności:

- **w G_k istnieje niezmiennicza podgrupa translacji**
- **jeśli $G_k = G_P$ to gwiazda reprezentacji grupy G_P składa się z jednego wektora**

przykłady:
a) wektor k=0
b) dla płaskiej sieci kwadratowej



przykład gdy $G_k \neq G_P$



(tu do gwiazdy będzie należał też wektor prostopadły)

tylko (e, C_2, σ_y) stanowią G_k

Mała reprezentacja -

- to reprezentacja D^k grupy wektora falowego k

po co nam (RGWF)? -

funkcja Blocha: $\psi_k = e^{ikr} u_k$, funkcje u_k powinny zostać wybrane jako bazy reprezentacji niekoniecznie całej grupy G_P, ale GWF, - tego konkretnego k**;**
podobnie w metodzie kp - pytanie - jak wybrać funkcje $u_{nk}(r)$ dla konkretnego k ...

Tw.
mała reprezentacja D^k, (grupy wektora falowego k) jednoznacznie wyznacza reprezentację D (grupy przestrzennej) z nieprzywiedlną gwiazdą {k}
(bez dowodu)

oczywiście:
wymiar N nieprzywiedlnej reprezentacji grupy przestrzennej wynosi:

$$N = s_k\, n$$

s_k - dim D^k
n - liczba promieni w gwieździe

Symetria w mechanice kwantowej

- **typ widma operatora zależy od symetrii tego operatora**
- **klasyfikacja stanów elektronowych**

np. hamiltonian dla elektronu w zewnętrznym potencjale V(x)
(polu potencjalnym; np. periodycznym dla kryształu)

$$H(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(\mathbf{x})$$

E_{kin} - niezmienniczy względem dowolnej operacji grupy przestrzennej - obrotów i translacji,

to – symetria H wyznaczona jest przez symetrię V(x)
(gdyż symetria V(x) jest na ogół niższa)

niezmienniczość H względem operacji g ∈ G – grupy symetrii hamiltonianu (układu fizycznego) oznacza:
(X1)

$$H(g^{-1}\mathbf{x}) = H(\mathbf{x})$$

albo inaczej

$$D(g)\underbrace{H(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})}_{\phi(\mathbf{x})} = H(g^{-1}\mathbf{x})\psi(g^{-1}\mathbf{x}) = H(\mathbf{x})D(g)\psi(\mathbf{x})$$

a to oznacza:
(X2)

$$D(g)H = HD(g)$$

ale z (X1)

$$H(\mathbf{x})\psi(g^{-1}\mathbf{x}) = E\psi(g^{-1}\mathbf{x})$$

widać, że funkcjom $\psi(\mathbf{x}),\ \ \psi(g^{-1}\mathbf{x})$ odpowiada ta sama wartość własna E,

działając operacjami D(g) na dowolną funkcją ψ_j pozostajemy w zbiorze funkcji odpowiadających E, zatem:

funkcje własne H odpowiadające zdegenerowanej wartości własnej H tworzą bazę reprezentacji D grupy symetrii G hamiltonianu

każdej reprezentacji nieprzywiedlnej powinna odpowiadać inna wartość własna energii (za wyj. degeneracji tzw. przypadkowej)

- **grupa symetrii H może być wyższa niż grupa symetrii V (np. z powodu niezmienniczości wzgl. odwrócenia czasu)**
- **za pomocą teorii reprezentacji można klasyfikować też widma częstości drgań cząsteczek i kryształów**

- <u>znoszenie degeneracji pod wpływem zaburzenia</u>

niech $H = H_0 + H_1$

niech grupą symetrii H_0 jest G_0 ,
a grupą symetrii H_1 jest G_1 , będąca ***podgrupą*** G_0

(tzn. H ma niższą symetrię od H_0)

znając charaktery nieprzywiedlnych reprezentacji G_0 i G_1 można ustalić jak zdegenerowane poziomy energetyczne H_0 rozszczepią się na poziomy H

(gdyż nieredukowalna reprezentacja grupy G_0 może być redukowalna w podgrupie grupy G_0 -
podobnie jak z podgrupą translacji w grupie przestrzennej G_P)

jeśli zaburzenie jest małe i wielkość rozszczepienia mała w porównaniu z odległością poziomów energetycznych H_0 , to każdy poziom H powstaje w wyniku rozszczepienia tylko jednego poziomu H_0 i poziomy się nie przecinają

wtedy:
nieprzywiedlne reprezentacje grupy G_0 rozkłada się na nieprzywiedlne reprezentacje grupy G_1 ,
(<u>bo dana rep. G_0 może być przywiedlną rep. G_1</u>)

oczywiście może się zdarzyć, że rep. G_0 pozostanie nieprzywiedlna w G_1 - odpowiadający jej poziom H_0 - nie ulegnie rozszczepieniu

rozkładu danej D reprezentacji G_0 na nieprzywiedlne reprezentacje G_1 dokonuje się w oparciu o charaktery D(g) dla tych g, które należą do G_1

przykłady

<u>Rozszczepienie poziomów atomowych w polu krystalicznym</u>

np.
5 – krotnie zdegenerowany poziom atomowy o symetrii orbitalnej *d*

(funkcje te { $\varphi_{l,m}$ } stanowią reprezentację D_2 grupy obrotów – H – niezmienniczy ze wzgl. na operacje grupy obrotów - l=2 , dim reprezentacji jest =5)

po umieszczeniu atomu, jako domieszki, w sieci kubicznej o symetrii sześciennej T_d , poziom ten rozpada się na 2 poziomy (2-krotnie i 3 krotnie zdegenerowany) odpowiadające reprezentacjom E i F_1 grupy T_d ;

T_d – ma 24 elementy w 5-ciu klasach => 5 reprezentacji nieredukowalnych o wymiarach: 1,1,2,3,3 ; => to jest jedyny możliwy rozpad 5-tki (krotności deg.) na 2 i 3 ! (nreps. E i F)

(formalnie możliwy byłby też 1,1,3, ale z tabel charakterów i z analizy transformacji funkcji { $\varphi_{l,m}$ } wynika, że jest to niemożliwe)

a to oznacza, że inne będą własności fizyczne (np. optyczne) atomu swobodnego i atomu jako domieszki w krysztale

<u>uwaga:</u> o wielkości rozszczepienia decyduje potencjał pola krystalicznego – można je oszacować rachunkiem zaburzeń

dalej ->
przy rozciągnięciu kryształu np. wzdłuż osi z, symetria dalej obniża się z T_d do D_{2d} -

D_{2d} – izomorficzna z D_4 ma 8 elementów w 5-ciu klasach, to 5 rep.nrd. o wymiarach 1,1,1,1,2 i wówczas:

E - rozkłada się na dwie jednowymiarowe A_1 i B_1
a F_1 na jednowymiarową B_2 i dwuwymiarową E,

... dla przypomnienia
D_{2d} jest podgrupą T_d , które jest podgrupą O_3 ...