Bachelor opgaven

Vincent Appel

1. oktober 2010

Vejleder: Jens Paaske

Indhold

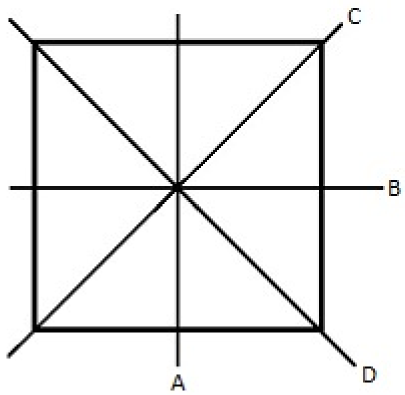
1 Abstract

2 Grundlæggende Gruppeteori

2.1 Grupper

En gruppe er en mængde af operationer som operere med symmetrier i et system. Dette forklares letteste vha. et eksempel, så lad os se på et kvadrat (fra opgaven 2-1 i Tinkham):

Et kvadrat har en række symmetrier, såsom rotationsymmetrien i urets retning i bidder af $\frac{\pi}{2}$, π og $\frac{3\pi}{2}$. Operationerne, *gruppeelementerne*, der roterer systemet i disse bidder kalder vi henholdsvis F, G og H. Desuden har kvadratet fire spejlings symmetrier, vist herunder, hvor spejling i hver af disse akser er et gruppeelement i gruppen.



Figur 1: Et kvadrat med integnet symmetriakser, indekset fra A-D som sammenholdes med gruppeelementerne der spejler figuren i den pågældende akse

Disse syv symmetri-operation samt enheds-operationen, E, ("at multiplicere med én" eller gøre intet) udgør gruppen for kvadratsystemmet. De har selvfølgelig et indbyrdes forhold til hinanden, hvilket lettest angives i en *multiplikationstabel*, vist herunder, som er en tabel over multiplikationen af gruppeelementerne. Ved multiplikation af to gruppeelementer menes der at man først gør den ene operation og dernæst den næste. Altså vil multiplikationen $A \cdot G$ betyde at man først spejler figuren i A-aksen og dernæst roterer den π i urets retning. Men jeg kunne havde kunne endt det samme sted hvis jeg blot havde spejlet i B-aksen, altså brugt operationen B på systemet. Altså skriver vi $A \cdot G = B$. Det kan hurtigst se at rækkefølgen ikke er ligegyldigt for dette eksempel, men hvis man finder en gruppe hvor rækkefølgen *er* ligegyldig, altså at multiplikation er kommuntativ, siges gruppen at være *Abelian*.

	E	A	B	C	D	F	G	H
E	E	A	B	C	D	F	G	H
A	A	E	G	F	H	C	B	D
B	B	G	E	H	F	D	A	C
C	C	H	F	E	G	B	D	A
D	D	F	H	G	E	A	C	B
F	F	D	C	A	B	G	H	E
G	G	B	A	D	C	H	E	F
H	H	C	D	B	A	E	F	G

Tabel 1: Multiplikationstabel for gruppen for kvadratsystemet. Tabellen skal læses således at rækkefølgen bliver at man først ser párækken, dernæst søjlen. Altså således at man læser 4. række (C) ganget med 3. søjle (B) giver F ($C \cdot B = F$)

Multiplikationstabeller er ofte måden man præsentere en gruppe uden brug af repræsentationer (se afsnit 1.2), men vi kan sagtens trække mere information ud af gruppen ved at se mere på elementernes indbyrdes forhold. Et interessant emne er klasser.

2.1.1 Klasser

Klasser skal forståes på den måde at når elementerne i samme klasse så ”minder” de om hinanden. For at to elementer skal være i klasse sammen skal de opfølge kravet at de to elementer skal være konjugeret til hinanden:

$$B = XAX^{-1} \text{ } eller \text{ } A = XBX^{-1} \tag{1}$$

I vores eksempel med kvadratet er elementerne A og B; C og D; F, G og H samt E i hver deres klasse, hvilket og giver god mening geometisk da disse operationer minder om hinanden. Gruppeelementet E er altid sin egen klasse. Vores gruppe kan altså deles op i fire klasser, hvilket er en information der viser sig at være vigtig når man skal undersøge karakteren af repræsentationen. En lille sætning[1] der gør livet lettere når man tester hvilke gruppe elementer der er konjugeret til hinanden er:

> Hvis elementerne A og B begge er konjugeret til C så er B og A også konjugeret til hinanden.

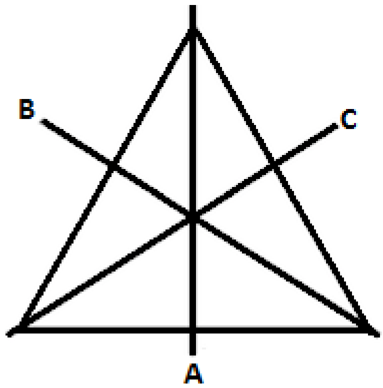
2.2 Repræsentationer

Repræsentationen af en gruppe er måden vi udtrykker gruppen på. Dette kan gøres på flere forskellige måder, men der er en række theoremmer der hjælper os med at finde ud af hvor mange der er i alt, samt hvilke er *irreducible.* Først ser vi dog på den første regl for en repræsentation:

$$\mathbf{\Gamma}(A) \cdot \mathbf{\Gamma}(B) = \mathbf{\Gamma}(A \cdot B) \tag{2}$$

[1] Fra Tinkham s. 12

Altså skal repræsentationen følge multiplikationstabellen. Få at få lidt mere kød på hvad disse repræsentationer er tager vi igen og ser på et eksempel, denne gang en trekant[2]: Gruppen for trekanten, som vist herunder, består af seks elementer, altså har gruppen *orden 6*, tre operationer der rotere figuren π om hver sin akse (A, B og C), tooperationer som roterer trekanten $\frac{2\pi}{3}$ henholdsvis med og mod uret (D og F) og selvfølgelig enhedsoperationen, E.



Figur 2: En trekant hvor de akserne som gruppeelementerne A-C roterer om er indtegnet og indekseret

Vi kan repræsentere gruppen vha. seks 2x2 matricer:

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \ A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \ B = \begin{pmatrix} \frac{-1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$
$$C = \begin{pmatrix} \frac{-1}{2} & \frac{-\sqrt{3}}{2} \\ \frac{-\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \ D = \begin{pmatrix} \frac{-1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{-\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \ og \ F = \begin{pmatrix} \frac{-1}{2} & \frac{-\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{-1}{2} \end{pmatrix} \tag{3}$$

Denne repræsentation, som jeg navngiver $\Gamma^(1)$ siges at være *sand* eller *tro* mod gruppen hvis hver element har sin egen unikke repræsentations matrix. *Dimensionen* af repræsentationen bestemmes af dimensionen af matricerne det består af, således at denne repræsentation er todimensionel. Denne repræsentation følger multiplikationstabellen (ikke skrevet her). Man kan finde en anden repræsentation ($\Gamma^(2)$) af gruppen ved at se på determintanten af disse matricer. Gruppe elementerne vil så bliver repræsenteret af ± 1. Denne repræsentation følger også multiplikationstabellen da $|\mathbf{\Gamma}(A)| \cdot |\mathbf{\Gamma}(B)| = |\mathbf{\Gamma}(A)\mathbf{\Gamma}(B)| = |\mathbf{\Gamma}(AB)|$. Denne repræsentation er kun endimensionel. En tredje repræsentation ($\Gamma^(3)$) er blot at repræsenterere alle elementerne som 1-taller.

Kan jeg finde flere *irreducible* repræsentationer end disse tre? Svaret er et rungende nej, og forklaringen er at vha. en mægtigt sætning, ortogonalitet sætningen[3], kan jeg udfra gruppens orden og antallet af klasser finde præcis hvor

[2] Jeg følger Tinkhams eksempel for nemhedens skyld
[3] Denne sætning er udledt med meget besvær i Tinkham på s.20-25

mange repræsentationer, med deres dimension, der er i alt. Ortogonalitets sætningen fortæller mig at:

$$\sum_i l_i^2 = h \tag{4}$$

hvor l_i er dimensionen af den i'te repræsentation og h er orden af gruppen.

Jeg behøver ikke engang at se på klasserne i trekants gruppen, hvis orden er 6, da der kun er én løsning til (4) nemlig $1^2 + 1^2 + 2^2 = 6$. For helhedes skyld ser jeg dog alligevel på klasserne i gruppen da dette får stor betydning i karaktertionen af repræsentationerne. Der er tre klasser i trekantsgruppen, $\mathscr{C}_1$, $\mathscr{C}_2$, $\mathscr{C}_3$, som deler gruppen op på følgende måde:

$$\begin{aligned}
\mathscr{C}_1 &= E \\
\mathscr{C}_2 &= A,\ B\ og\ C \\
\mathscr{C}_3 &= F\ og\ D
\end{aligned}$$

Jeg kan igen se, da antallet af klasser er det samme som antallet af irreducible repræsentationer[4], at der må være tre irreducible repræsentationer. For at trække information ud af disse repræsentationer som kan bruges i fysiske sammenhæng skal jeg lave en såkaldt karaktertabel. Først skal jeg dog definere hvordan man bestemmer karakteren af en repræsentation.

2.2.1 Karakteren af repræsentationen

Kravet om at kunne karaktersere repræsentations matricer kommer fra at de er relateret til hinanden gennem *unitary* transformationer. Vi leder derfor efter en karaktersation der er invariant under disse transformationer. Heldigvis findes en sådan karaktersation, nemlig sporet af matricen. Sporet af en matrix er blot summen af diagonal elementerne. Vi definerer nu *karakteren* af den j'te repræsentation som rækken af spor for hver repræsentationsmatrix, hvor:[5]

$$\chi^{(j)}(R) = \mathrm{Tr}\left[\mathbf{\Gamma}^{(j)}(R)\right] = \sum_{\mu=1}^{l_j} \Gamma^{(j)}(R)_{\mu\mu} \tag{5}$$

hvor χ er karakteren for repræsentationsmatricen R i den j'te repræsentation og l_j er dimensionen af den j'te repræsentation.

Da det let kan blive uoverskueligt at se på karakteren af repræsentationerne som rækker af spor, konstrukturerer man en *karaktertabel.* Man udnytter at først at der er lige mange irreducible repræsentationer som klasser i gruppen. Ydemere har elementerne i den samme klasse alle det samme spor. Jeg konstrukturerer nu karaktertabellen for min trekantgruppe, og husker at jeg har tre irreducible repræsentationer og tre klasser:

[4]Fra Tinkham s. 26; 3-16
[5]Fra Tinkham s. 25, eq: 3-15

	$\mathscr{C}_1$	$3\mathscr{C}_2$	$2\mathscr{C}_3$
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1
$\Gamma^{(2)}$	1	-1	1
$\Gamma^{(3)}$	2	0	-1

Tabel 2: Karaktertabellen for trekantsgruppen. Tallet foran klasserne i øverst række, benævnes N_k, er antallet af elementer i den pågældende klasse

For at chekke om man har kontrukteret en karaktertabel korrekt er der en række krav der skal være opfyldt[6]:

1. Tabellen skal være kvadratrisk da der skal være lige mange irreducible repræsentationer som klasser

2. Da dimensionen af repræsentationerne er bestemt af $\sum_i l_i^2 = h$ (4) og enhver gruppe har enhedselementet E som skal repræsenteres som enhedsmatricen samt at enhedselementet er sin egen klasse er det første søjle altid blot l_j. Desuden kan man altid finde den irreducible repræsentation hvor alle elementerne repræsenteres af 1-taller, vil den første række kun bestå af 1-taller.

3. Alle søjlerne skal være orthogonale på hinanden, normaliseret til h med vægtningsfaktoren N_k (antallet af elementer i den k'te klasse). Det kan udtrykkes som:
$$\sum_k \chi^{(i)}(\mathscr{C}_k) \cdot \chi^{(j)}(\mathscr{C}_k) \cdot N_k = h\delta_{ij}$$

4. Alle rækkerne skal være orthogonale på hinanden, normaliseret til $\frac{h}{N_k}$:
$$\sum_i \chi^{(i)}(\mathscr{C}_k) \cdot \chi^{(i)}(\mathscr{C}_l) = \frac{h}{N_k} \cdot \delta_{kl}$$

5. Elementerne i den i'te række er relateret med:
$$N_j\chi^{(i)}(\mathscr{C}_j) \cdot N_k\chi^{(i)}(\mathscr{C}_k) = l_i \sum_i c_{jkl} \cdot N_l\chi^{(i)}(\mathscr{C}_l)$$
hvor c_jkl er konstanten defineret fra klassemultiplikation (ikke dækket i denne opgave) i ligningen: $\mathscr{C}_j \cdot \mathscr{C}_k = \sum_l c_{jkl} \cdot \mathscr{C}_l$

Fra karaktertabellen kan vi begynde at bruge gruppeteori på fysiske systemmer da man kan trække egenfunktion og egenværdier ud af karaktertabellen. Jeg begynder derfor at se på den fysiske anvendelse.

2.3 Fysisk anvendelse

Vi ser først og fremmest kun på grupper som lader Hamiltonian'en være invariant ved brug af gruppeelementerne. Før vi kan gå i gang med at trække

[6]fra Tinkham s. 28-29

egenfunktioner ud af vores karaktertabel er vi nød til at indføre operatorer som operere på funktioner. Vi definere disse operationer på følgende måde:

Vi tager gruppeelementet $\mathbf{R}$ som ændre koordinaterne således at $\boldsymbol{Rx} = \boldsymbol{x'}$ og $\boldsymbol{R^{-1}x'} = \boldsymbol{x}$. Vi indfører nu P_R som opfylder:

$$P_R f(\boldsymbol{Rx}) = f(\boldsymbol{x})$$
$$P_R f(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{R^{-1}x})$$

hvor f($\mathbf{x}$) er en funktion af $\mathbf{x}$. Gruppen med P_R er isomorphic med gruppen vi startede med.

Vi definere nu *Schrödinger gruppen* som den gruppe af operatorer P_R der kommentere med Hamiltonianen. Vi ved fra kvantemekanikken at egenfunktionerne til operatorer der kommentere med Hamiltonian også er egenfunktioner til Hamilitonoperatoren. Vi kan nu generer flere eigentilstande med samme egenværdier da $P_R H\psi_n = P_R E_n \psi_n$ eller $HP_R\psi_n = E_n P_R \psi_n$. Rammer vi alle eigentilstandene er udartetheden *normal*. Hvis der er nogen som vi ikke kan få fat i vha. symmetri operationerne kaldes disse "*accidental degeneracy*", som dog ofte viser sig at faktisk at dukke op i en "skjult" symmetri.

Jeg tager en udartet energi E_n som jeg antager at være l_n gange udartet (uden nogen "accidental degeneracy"). Tager vi l_n orthogonale eigentilstande med denne energi må enhver operation med P_R blot give en anden tilstand, stadig med energien E_n. Denne nye tilstand kan nu skrives som en linæer kombination af l_n-tilstandene (da disse udspænder basis for alle tilstande med energien E_n. Dette er et underrum i Hilbert rummet som er invariant under alle operationerne fra Schrödinger gruppen.

Vi kan nu begynde at definere repræsentationsmatricerne af vores Schrödinger gruppe, defineret som:

$$P_R \psi_\nu^{(n)} = \sum_{\kappa}^{l_n} \psi_\kappa^{(n)} \Gamma^{(n)}(R)_{\kappa\nu} \tag{6}$$

Hvor $\Gamma^{(n)}(R)_{\kappa\nu}$ fortæller hvilket koordinat der skal stå i den κ'te række og den ν'te søjle i matricen. Dimensionen af repræsentationen er bestemt af dimensionen af disse matricer som igen er bestemt af antallet af orthogonale eigentilstande med energien E_n. Altså kan vi sige at *til en given irreducible repræsentation til Schrödinger gruppe med dimensionen l_n, findes der l_n orthogonale eigentilstand med energien E_n som udgørr basis'en for alle tilstand med energien E_n.*

Vælger vi en anden basis med andre eigentilstande kommer vi frem til at den nye repræsentationsmatrice er ekvivalent med den gamle[7], altså $\boldsymbol{\Gamma'}(R) = \boldsymbol{\alpha}^{-1}\boldsymbol{\Gamma}(R)\boldsymbol{\alpha}$ hvor $\boldsymbol{\alpha}$ er matricen som tager de gamle eigentilstande over i de nye. Vi kan nu sige at *For de irreducible repræsentationer af Schrödinger gruppe findes én unik egenværdi til Hamiltonianen, og dermed egenenergien, til hver af disse.*

Jeg vil nu se på hvilken metode man skal bruge for at finde egenfunktioner til grupper med flere multidimensionelle repræsentationer, således at en given egenfunktion skal indekseres både mht. hvilken repræsentation den tilhører og hvilken række den tilhører i den givne repræsentation. En egenfunktion bliver

[7]Gennemgået i Tinkham s. 36

dermed benævnt: $\varphi_\kappa^{(j)}$ som tilhører den κ'te række i den j'te repræsentation. Hvilken række en funktion tilhører skal det forståes som at for hver række er der en akse i den basis der udspænder underrummet som repræsentationen lever i.

Da vi allerede ved vi kan finde alle egenfunktionerne med den samme energi udfra blot én enkel benævner vi at $\varphi_\kappa^{(j)}$ sammen med den *partnere* udspænder basis'en for den j'te repræsentation. Vi ved ligeledes at vi kan finde repræsentationsmatricerne vha. (6).

$$P_R\varphi_\kappa^{(j)} = \sum_{\lambda=1}^{l_j} \varphi_\lambda^{(j)} \Gamma^{(j)}(R)_{\lambda,\kappa}$$

Multiplicere vi nu (6) med $\Gamma^{(i)}(R)^*_{\lambda,\kappa'}$, summer over R og udnytter ortogonal sætningen (4) får vi:

$$\sum_R \Gamma^{(i)}(R)^*_{\lambda,\kappa'} \cdot P_R\varphi_\kappa^{(j)} = \frac{h}{l_j}\delta_{ij}\delta_{\kappa\kappa'}\varphi_{\lambda'}^{(j)} \tag{7}$$

Dette omskriver vi til operatoren:

$$\mathscr{P}_{\lambda\kappa}^{(j)} = \frac{l_j}{h}\sum_R \Gamma^{(j)}(R)^*_{\lambda,\kappa} P_R \tag{8}$$

Denne operator er ganske interessant. Først og fremmest giver den nul pånær hvis den operere på en funktion der ligger i den κ'te række af den j'te repræsentation. Disse ikke-nul løsninger giver $\varphi_{\lambda'}^{(j)}$ og ergo kan vi finde basis for den j'te repræsentation vha. (8). Ydemere kan det ses at:

$$\mathscr{P}_{\kappa\kappa}^{(j)}\varphi_\kappa^{(j)} = \varphi_\kappa^{(j)}$$

Samt at:

$$\mathscr{P}_{\kappa\kappa}^{(j)} = \mathscr{P}_{\kappa\kappa}^{(j)}$$

Altså er $\varphi_\kappa^{(j)}$ egenfunktionen til $\mathscr{P}_{\kappa\kappa}^{(j)}$ med egenværdien 1.

Operatoren har en anden vigtig egenskab udover at kunne genere en basis for en given repræsentation, nemlig egenskaben *at projektere delene af* ***hvilken som helst funktion*** *ud der tilhører den κ'te række i den j'te repræsentation*[8]. Altså kan funktionen F skrives som en sum af dele som tilhører irreducible repræsentationer, givet som:

$$F = \sum_{j=1}^{c}\sum_{\kappa=1}^{l_j} f_\kappa^{(j)}$$

hvor c er antallet af irreducible repræsentationer og $f_\kappa^{(j)}$ tilhører den κ'te række i den j'te repræsentation. Bruger vi vores operator på F får vi:

$$\mathscr{P}_{\kappa\kappa}^{(j)}F = f_\kappa^{(j)}$$

Vi kalder den derfor *projektions operatoren*. Vha. vores projektions operator kan vi altså finde basis'en for en irreducible repræsentation udfra en hvilken som

[8]Bevist i Tinkham s. 40-41

helst funktion, ved først at projektere den del ud der tilhører repræsentationen og dernæst finde alle dens partnere. Van Vleck har derfor givet denne metode navnet: "*den basis-funktion genererende maksine*"

Det kan ses at for at bruge projektions operatoren skal man kende hele repræsentationsmatricen, eller i hvert fald alle diagonal elementerne, men oftere kender man kun klassen. Dette er umiddelbart ikke et problem hvis man sætter $\kappa = \lambda$, og summer over κ, således at den nye projektions operator er:

$$\mathscr{P} = \sum_{\kappa} \mathscr{P}^{(j)}_{\kappa\kappa} = \frac{l_j}{h} \sum_{R} \chi^{(j)} (R)^* P_R \tag{9}$$

Vi har nu fundet en metode til at finde egenfunktioner til hamilitonoperatoren vha. Schrödinger gruppen. Vi kan finde hvor mange egenfunktioner der er pr. egenværdi, ergo hvor udartet energieniveauet er (dog er vi opmærksomme på at der kan være "skjulte" symmetrier der giver ydeligere udartet energiniveauer), samt hvor mange energiniveau der er. Alt dette kan vi trække ud af karaktertabellen for en gruppe. Vi kan nu sætte vores forskellige symmetri grupper i system og skal nu blot slå den rigtige gruppe op for at kunne komme i gang med at analysere et givet system.

2.4 Direkte produkt grupper

Et brugbart værktøj i gruppeteori er direkte produkt grupper, som er en måde at genere nye grupper ved at tage produktetet af to grupper. For at forstår hvordan det virker viser jeg det med et eksempel.

Vi arbejder videre med vores trekants gruppe men vil gerne tilføje en ny symmetri, nemlig en reflektions symmetri i planet med trekanten. Vores trekantsgruppe navngives D_3, og vores reflektionsgruppe navngives σ_h (se afsnittet: Punkt grupper). Deres karaktertabeller er:

D_3	E	(A, B, C)	(D, F)
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1
$\Gamma^{(2)}$	1	-1	1
$\Gamma^{(3)}$	2	0	-1

Tabel 3: Karaktertabellen for trekantsgruppen, D_3. Klasserne er skrevet ud for overskuelighedens skyld.

σ_h	E	σ_h
$\Gamma^{(+)}$	1	1
$\Gamma^{(-)}$	1	-1

Tabel 4: Karaktertabellen for reflektion i det horisontiale plan, σ_h. Repræsentationerne er indekseret med + og - for nemhedes skyld når man skal kombinere gruppen med andre grupper.

For at finde den direkte produkt gruppe af disse to grupper behøver jeg blot at multiplicere alle deres gruppeelementer med hinanden: $D_3 \times \sigma_h = E \cdot E, E \cdot$

$A, \ldots E \cdot F, \sigma_h \cdot E, \sigma_h \cdot A, \ldots \sigma_h \cdot F$. Det kræves dog at alle elementerne kommuntere med hinanden, hvilket er opfyldt her da det ikke betyder noget om vi først roterer og så spejler i planet eller omvendt. Inden jeg går videre vil jeg først gøre nogen hurtige og vigtige observationer[9] om de irreducible repræsentationer af den nye gruppe, som navngives D_{3h}.

Produktet af de irreducible repræsentationer af undergrupperne følger reglerne for matrix-multiplikation således at[10]:

$$\Gamma^{(j)}_{D_3} \cdot \Gamma^{(j)}_{\sigma_h} = \Gamma^{(j)}_{D_{3h}}$$

Udfra Schur's lemma er det givet at produktet af to irreducible repræsentationer giver en ny irreducible repræsentation. Det kan ydemere vises at man faktisk får *alle* de irreducible repræsentationer i den nye gruppe. Ser vi på dimensionen af vores to grupper kan det ses at:

$$\left.\begin{array}{l} \sum_j (l_j^{D_3})^2 = h_{D_3} \\ \sum_i (l_i^{\sigma_h})^2 = h_{\sigma_h} \end{array}\right\} \sum_{i,j} (l_{ij}^{D_{3h}})^2 = \sum_{i,j} (l_i^{\sigma_h} \cdot l_j^{D_3})^2 = \sum_j (l_j^{D_3})^2 \cdot \sum_i (l_i^{\sigma_h})^2$$
$$= h_{D_3} \cdot h_{\sigma_h} = h_{D_{3h}}$$

hvor vi ved at der ikke kan være andre irreducible repræsentationer end dem der er opnået ved multiplikation af de irreducible repræsentationer fra undergrupperne.

Karakteren af de nye repræsentationer er blot produktet af karakteren for de gamle repræsentationer, hvilket ses let:

$$\begin{aligned} \chi_{D_{3h}}(A \cdot B) &= \sum_{a,b} \Gamma^{(j)}_{D_3 \times \sigma_h}(A \cdot B)_{ab} = \sum_{a,b} \Gamma^{(j)}_{D_3}(A)_{aa} \cdot \Gamma^{(j)}_{\sigma_h}(B)_{bb} \\ &= \sum_a \Gamma^{(j)}_{D_3}(A)_{aa} \cdot \sum_b \Gamma^{(j)}_{\sigma_h}(B)_{bb} = \sum_a \Gamma^{(j)}_{D_3}(A)_{aa} \cdot \sum_b \Gamma^{(j)}_{\sigma_h}(B)_{bb} \\ &= \chi_{D_3}(A) \cdot \chi_{\sigma_h}(B) \end{aligned}$$

Nu hvor vi ved at vi rammer alle de irreducible repræsentationer og vi kan udregne deres karakter, er det bare om at skrive resultatet op i en karaktertabel:

D_{3h}	E	(A,B,C)	(D,F)	σ_h	$\sigma_h(A,B,C)$	$\sigma_h(D,F)$
$\Gamma^{(1+)}$	1	1	1	1	1	1
$\Gamma^{(2+)}$	1	−1	1	1	−1	1
$\Gamma^{(3+)}$	2	0	−1	2	0	−1
$\Gamma^{(1-)}$	1	1	1	−1	−1	−1
$\Gamma^{(2-)}$	1	−1	1	−1	1	−1
$\Gamma^{(3-)}$	2	0	−1	−2	0	1

Tabel 5: karaktertabellen for gruppen D_{3h}, skabt ved at tage det direkte produkt mellem grupperne: D_3 og σ_h.

[9] Fra Tinkham s. 44
[10] Vist i Tinkham s. 44

Det kan ses at $h_{D_{3h}} = 12$ som forudsagt da $h_{D_3} = 3$ og $h_{\sigma_h} = 2$ og at repræsentationerne $\Gamma^{(\pm 3)}$ er de eneste to-dimensionelle repræsentationer. Vi kan altså se at D_3 gruppen er lige så degeneret som D_{3h} gruppen. I et senere afsnit skal vi se at dette værktøj er meget brugbart når man skal gøre sit problem lettere at løse.

2.5 Punkt grupper

Når man arbejder med krystaller er det ofte smart at bryde ens problem ned i de mindste geometriske enheder, siden denne kan blot gentages for at danne krystallet. Dette afspejler sig i gruppeteori for krystaller hvor man har katagoriseret ens symmetrigrupper efter deres geometri, fx at grupper som har symmetri omkring en rotationsakse katagoriseres sammen. Der følger selvfølgelig en nomenklatur med dette system, som jeg nu vil kridte op for derefter springe direkte hen til oversigten over de forskellige grupper.

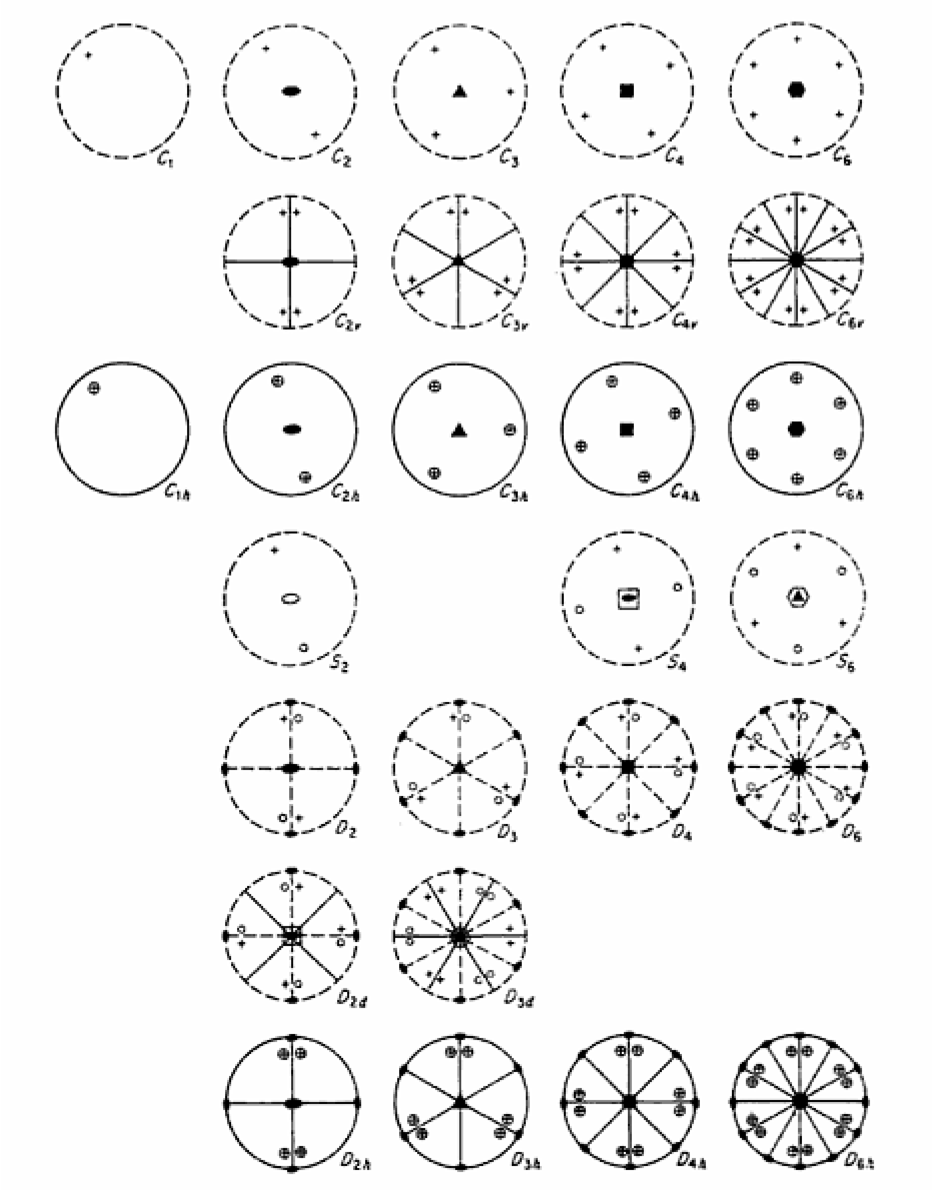
Notationen hedder "*Schoenflies notation*" og består af følgende notation[11]:

- E = identitet
- $C_n = \frac{2\pi}{n}$ rotationer. n kan kun antage værdier af 1, 2, 3, 4 og 6.[12]
- σ = reflektion i planet.
- σ_h = "horisontal" reflektion, altså reflektion i planet der er vinkelret på aksen med den højste rotationssymmetri, som angives som *den principelle akse.*
- σ_v = "vertikal" refleksion, reflektion i planet der går gennem den principelle akse.
- σ_d = "diagonal" reflektion, reflektion i planet der går gennem den principelle akse og deler vinklen mellem de to akser der ligger vinkelret på denne akse. σ_d er blot en speciel vertikal reflektion.
- $S_n = \frac{2\pi}{n}$ "rotations reflektion", altså en rotation og en reflektion gennem et plan der står vinkelret på den principelle akse. Herunder ligger inversionen, $i = \mathbf{s}_2$

Der er en række regler for hvilke af disse operationer kommentere hinanden og hvilke regler der gælder for relationen mellem disse symmetri elementer. De er alle angivet i Tinkham s. 51-53.

Nu har vi nomenklaturen på plads, lad os nu se hvordan vores punktsymmetrigrupper ser ud, vist herunder som stereografiske projektioner[13]:

[11] Fra Tinkham s. 53
[12] Vist i Tinkham s. s. 55-56
[13] Fra Tinkham s. 55 fig. 4-2



Figur 3: Oversigt over punkt-symmetrigrupperne, vist som stereografisk projektioner ned på XY-planet. Den principelle akse er går ud af Z aksen. Et "+" betyder at punktet er over planet, et "O" når det er under.

Lad os nu se hvordan en tabel ser ud hvis vi slår den op[14]. Vi tager som eksempel vores trekantsgruppe som kan beskrives bedst som en D_3 punkt-symmetrigruppe:

[14]Fra Tinkham Appendix B s. 232-329

D_3			E	$2C_3$	$3C_2'$
x^2+y^2, z^2		A_1	1	1	1
	R_z, z	A_2	1	1	-1,
(xz, yz) (x^2-y^2, xy)	(x, y) (R_x, R_y)	E	2	-1	0

Tabel 6: Tabeloversigt for D_3 gruppen. Højredel af tabellen er blot vores karaktertabel (hvor repræsentationerne og klasserne har fået nye navne, se teksten nedenfor), mens venstre del referer til hvilke koordinater hører til hvilke repræsentationer.

Repræsentationerne navngives efter deres dimensioner, henholdsvis A og B for en-dimensionelle –, E for to-dimensionelle – og T for tre-dimensionelle repræsentationer. Forskellen mellem A og B er deres karakter ved en rotation, C_n, omkring den principelle akse. A har en karakter på $+1$ og B har en karakter på -1. Når inversionsymmetri er tilstede bruger man g og u indeks for angivelse af lige og ulige funktioner (fra gerade og ungerade).

Klasserne referer til Schoenflies notation, hvor mærket på C'et ("$3C_2'$") angiver at rotationen går omkring en akse som står vinkelret på den principelle akse.

Venstre side af tabellen fortæller os hvordan de forskellige koordinater opfører sig under transformation. Første søjle er kvadratiske koordinater, mens anden søjle er enkelstående koordinater sammen med "rotations" koordinater, $R_{x,y,z}$ som svarer til at roterer omkring en akse med vinklen ϕ. Denne "vinkelvektor" kan også undergå transformationer fra gruppen såvel som koordinater, og er brugbar når man udtrykker et punkt som en radius og en vinkel frem for de kartesiske koordinater. For at finde ud af hvordan fx z er havnet i rækken med A_2 bruger vi bare vores klasses projektions operator (9) på z:

$$\begin{aligned} \mathscr{P}^{(A_2)} z &= \frac{1}{6} \sum_R \chi^{(A_2)}(R)^* P_R z \\ &= \frac{1}{6} \cdot (1 \cdot z + 2 \cdot z + (-3) \cdot (-z)) \\ \mathscr{P}^{(A_2)} z &= z \end{aligned} \tag{10}$$

Samme operation på z blot med projektionsoperatoren for A_1 giver, som forventet, 0:

$$\begin{aligned} \mathscr{P}^{(A_1)} z &= \frac{1}{6} \sum_R \chi^{(A_1)}(R)^* P_R z \\ &= \frac{1}{6} \cdot (1 \cdot z + 2 \cdot z + 3 \cdot (-z)) \\ \mathscr{P}^{(A_1)} z &= 0 \end{aligned} \tag{11}$$

Vi kan altså nu aflæse hvordan de simpleste funktioner opfører sig. Vi kan nu bruge disse simple funktioner til at bygge mere advanceret funktioner op, således at *hvilken som helst funktion* $\varphi(z)$ *opfører sig som* z *angivet i tabeloversigten.*

Når man får givet et problem, som vi snart skal se, skal man blot slå den rigtige symmetrigruppe op og skrive ens hamiliton op i den base som også er basen til de forskellige repræsentationer af ens symmetrigruppe.

2.6 Udvalgsregler for matrixelementer vha. gruppeteori

Når man nedbryder en symmetri i sit system svare det til at man opsplitter et energiniveau. Nye overgange bliver derfor tilladt, og dette er ofte noget man gerne vil udnytte. Jeg vil nu undersøge hvordan man vha. gruppeteori kan hurtig se hvilke elementer i ens hamiliton giver nul ved en pertubation. For at finde disse udvalgsregler skal vi udnytte den mægtige orthogonal sætning samt vores viden om direkte produkt grupper. Vi skal også undersøge hvordan en repræsentation kan dekomponeres ned til de irreducible repræsentationer der danner den pågældende gruppe vi ser på.

En stærk sætning at gå udfra er[15]:

> Matrix elementer af en operator, H, som er invariant under alle gruppeoperationer, giver nul mellem eigenfunktioner til forskellige repræsentationer eller forskellige rækker i en given repræsentation.

Dette kan bl.a. ses udfra orthogonal sætningen. Da H er invariant kan den altid tilhører repræsentationen: Γ^1, som er i alle grupper. Lader vi H operere på en eigenfunktion til repræsentationen: $\Gamma^{(j)}$, altså $H\left|\phi_k^{(j)}\right\rangle$, vil denne automatisk ligge i den direkte produkt gruppe af: $\Gamma^1 \times \Gamma^{(j)}$. Dette er en vigtig iagtagelse da tager vi en ny eigenfunktion til en anden repræsentation, $\left|\phi_k^{(j')}\right\rangle$ vil matrix elementet: $\left\langle\varphi_k^{(j')}\right| H \left|\varphi_k^{(j)}\right\rangle$ give nul **undtagen** hvis $\Gamma^{(j')}$ kan findes i $\Gamma_H \times \Gamma^{(j)}$, da orthogonal sætningen siger at disse er orthogonale hvis de tilhører forskellige repræsentationer. Det er vigtigt at bemærke her at selvom man kan finde $\Gamma^{(j')}$ kan findes i $\Gamma_H \times \Gamma^{(j)}$ betyder det ikke nødvendigvis at der findes et matrixelement mellem to tilstande tilhørende de to repræsentationer. Udvalgsreglen fortælle os blot hvilke overgange er forbudte. Overfører vi dette til kvantemekanikken vil der kun være matrixelementer i vores hamiliton mellem tilstande som har den samme energi.

2.6.1 Udvalgsregler for pertubationshamilitonoperatoren

Ofte er vi mere interesseret i hvordan en pertubation bryder symmetrien og dermed giver mulighed for nye overgange. Heldigvis kan vi bruge samme metode som før, hvilket jeg vil demonstrere med et eksempel. Lad vores system være trekanten med symetrigruppen D_3 (se Tabel 2). Vores pertubation er et elektrisk felt, hvis elektriske dipolmoment har operatoren: $e\mathbf{r}\cdot E$, hvor $\mathbf{r}$ er vores standard positionoperator, E er styrken af det elektriske felt og e er elementar ladningen. Det elektriske felt transformere som en vektor med koordinaterne x,y og z. Man kan beskrive rotationen på ϕ-grader omkring z-aksen af sådan en vektor med

[15] Løst oversat fra Tinkham s. 80

repræsentationen:

$$\Gamma_E(\phi) = \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

karakteren for denne repræsentation er:

$$\chi(\Gamma_E) = 2\cos\phi + 1$$

Gruppeelementerne i D_3 i denne repræsentation er følgende matricer:

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \; A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \; B = \begin{pmatrix} \frac{-1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{-\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$
$$C = \begin{pmatrix} \frac{-1}{2} & \frac{-\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{-\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \; D = \begin{pmatrix} \frac{-1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{-\sqrt{3}}{2} & \frac{-1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \; F = \begin{pmatrix} \frac{-1}{2} & \frac{-\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{-1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Nu skal vi se hvordan vi kan dekomponere denne repræsentation ned til irreducible repræsentationer for vores trekantsgruppe. Vi behøver blot at beregne karakteren for pertubationsrepræsentationen under diverse rotationsgruppeelementer. Jeg husker at elementerne i den samme klasse har ens karakterer:

$$\begin{aligned} \chi_{\Gamma_E}(E) &= 3 \\ \chi_{\Gamma_E}(A, B, C) &= -1 \\ \chi_{\Gamma_E}(D, F) &= 0 \end{aligned}$$

Ved at se på disse karakterer er det let at se at:

$$\chi_{\Gamma_E} = \chi_E + \chi_{A_2}$$

hvilket betyder at vi kan dekomponere vores pertubationsrepræsentation til de to irreducible repræsentationer for trekantsgruppen da karakteren af en reducible repræsentation altid kan skrives som summen af karakterene for de irreducible repræsentationer den indeholder[16]. Det kan også ses at de irreducible repræsentationer ligger som blokke langs diagonalen på repræsentationsmatricen. Altså gælder det at:

$$\Gamma_E = E + A_2$$

hvilket vi også ville forvente da vi allerede ved fra karaktertabellen at z transformere som A_2 og (x, y) transformere som E. For at undersøge hvilke overgange der er tilladte udfra udvalgsreglerne for matrixelementerne skal vi se lede efter irreducible repræsentationer i de nye eigentilstande skabt af pertubationen. Da vi kan dekomponere vores pertubationsrepræsentation ned i to mindre irreducible repræsentationer ser vi enkeltvis på disse. Lad os først se på et felt

[16] Se Tinkham s. 29 afsnit 3-5

i z-retningen, således vi leder kun efter repræsentationer, $\Gamma^{(j)}$, der kan findes i $\Gamma_{E_z} \times \Gamma^{(j)} = A_2 \times \Gamma^{(j)}$. De mulige produkter er:

$$A_2 \times A_1 = A_2 \quad A_2 \times A_2 = A_1 \quad A_2 \times E = E$$

hvilket betyder at fordi jeg kan fx finde A_1 i gruppen mellem $A_2 \times A_2$ er der overgange mellem A_2 og A_1. De tilladte overgange for et felt i z-retningen er derfor:

$$A_2 \leftrightarrow A_1 \quad E \leftrightarrow E$$

For et felt i xy-planet laver vi samme beregninger, blot hvor vi husker at i xy-planet følger vores elektriske felt den irreducible repræsentation E:

$$E \times A_1 = E \quad E \times A_2 = E \quad E \times E = A_1 + A_2 + E$$

Her kan vi finde A_1 og A_2 i E og E i både A_1, A_2 og E. Derfor er de tilladte overgange:

$$A_1 \leftrightarrow E \quad A_2 \leftrightarrow E \quad E \leftrightarrow E$$

Vi kan altså nu finde overgange i spektret introduceret ved en pertubation ved at dekomponere pertubationsrepræsentationen ned til irreducible repræsentationer fra vores symmetrigruppe og derefter lede efter hvilke irreducible repræsentationer vi kan finde i direkte produkt grupperne mellem pertubationsrepræsentationen og de irreducible repræsentationer fra vores symmetrigruppe.

2.6.2 Inversion

Inversionsoperationen er altid interessant da det kommunterer med alle vores rotationsoperationer. Vi kan derfor altid lave en direkte produkt gruppe med inversions gruppen og hvilken som helst gruppe. karaktertabelerne er:

$\mathscr{G}$	$\mathscr{C}_1 \ldots \mathscr{C}_n$
$\Gamma^{(1)}$	
$\ldots$	χ
$\Gamma^{(n)}$	

&

i	E	i
$\Gamma^{(g)}$	1	1
$\Gamma^{(u)}$	1	-1

Tabel 7: karaktertabellen for en generel gruppe og for inversion. Indekset af repræsentationerne i inversionsgruppen referer til hvorvidt det er en gerade eller ungerade repræsentation vi ser på.

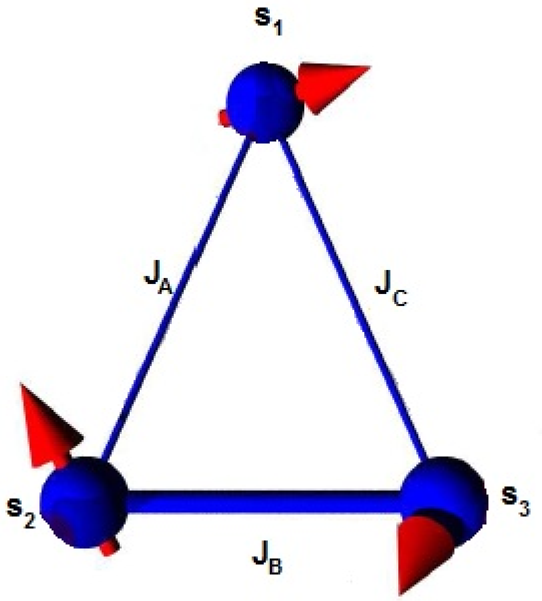
Det direkte produkt er:

$\mathscr{G} \times i$	$\mathscr{C}_1 \ldots \mathscr{C}_n$	$i\mathscr{C}_1 \ldots i\mathscr{C}_n$
$\Gamma^{(1g)}$		
$\ldots$	χ	χ
$\Gamma^{(ng)}$		
$\Gamma^{(1u)}$		
$\ldots$	χ	$-\chi$
$\Gamma^{(nu)}$		

Tabel 8: karaktertabellen for den direkte produkt gruppe mellem en generel gruppe og inversionsgruppen

Det kan ses at hvis vi dekomponere en repræsentation til denne gruppe vil den enten kun bestå af ungerade eller gerade irreducible repræsentationer da en sum af karaktererne mellem en gerade og ungerade repræsentationer vil give 0. Desuden er vestre og højre halvdel af karaktertaellen identiske, borset fra et fortegn, og en sum af karakterene vil blot gentage en masse led. Vi kan altså konkludere at *gerade og ungerade repræsentation dekomponeres henholdsvis kun i gerade og ungerade irreducible repræsentationer, samt at vi kan nøjes med at se på grupperne uden inversionssymetrien når vi skal dekomponere en repræsentation.*

3 Et trekantet kvantesystem med 3 partikler



Figur 4: Et kvantespinsystem for en trekant. $s_{1,2,3}$ angiver spinsitet mens $J_{A,B,C}$ angiver udvekslingskoblingskonstanten mellem to sites. Modificeret ud fra artiklen "Spin electric effect in molecular antriferromagnets" af Trif et al.

Jeg vil opstille en model der forklarer hvordan et trekantet kvantesystem (se fig. 4) kan koble med et elektrisk felt. Jeg opstiller min model udelukkende som et spinsystem da, som jeg vil vise, er nok til at forklare koblingen til et elektrisk felt. Jeg vil med andre ord opstille en model som gør det muligt at koble mellem to spintilstande for et trekantet kvantesystem. Først vil jeg opskrive tilstandene der beskriver spinet på de tre sites, derefter vil jeg opskrive min hamiliton og tilsidst se hvordan et elektrisk felt påvirker systemet.

3.1 Spinmodellen

Vores trekant har tre sites med hver et spin. Det samlet spin, S for trekanten kan altså således enten være $\pm\frac{1}{2}$ eller $\frac{3}{2}$. Jeg ser først på tilstandene for $S = \frac{1}{2}$ som jeg navngiver på følgende måde:

$$S = \frac{1}{2} \Rightarrow |\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2\mathbf{s}_3\rangle = \begin{cases} |{\downarrow\uparrow\uparrow}\rangle = |1\rangle \\ |{\uparrow\downarrow\uparrow}\rangle = |2\rangle \\ |{\uparrow\uparrow\downarrow}\rangle = |3\rangle \end{cases} \tag{12}$$

Resten af tilstandene ser således ud:

$$S = \frac{3}{2} \Rightarrow |\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2\mathbf{s}_3\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$$
$$S = \frac{-3}{2} \Rightarrow |\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2\mathbf{s}_3\rangle = |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$$
$$S = \frac{-1}{2} \Rightarrow |\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2\mathbf{s}_3\rangle = \begin{cases} |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle = |-1\rangle \\ |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = |-2\rangle \\ |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle = |-3\rangle \end{cases}$$

Vi kan bygge en samlet bølgefunktion med $S = \frac{1}{2}$ op som en linæer kombination af tilstandene fra (12) ved at se på symmetrigruppen C_3, da spintilstanden udspænder basisen for denne gruppe (bemærk at C_3-gruppen er en undergruppe af D_3 gruppen. Se afsnittet om direkte produkter grupper):

C_3			E	C_3	C_3^2
x^2+y^2, z^2	R_z, z	A	1	1	1
(xz, yz)	(x, y)	E	1	ω	ω^2
(x^2-y^2, xy)	(R_x, R_y)		1	ω^2	ω

Tabel 9: Tabeloversigt for C_3 gruppen, hvor $\omega = e^{\frac{2\pi i}{3}}$. Dette er symmetrigruppen for spinet i en trekant. Den todimensionelle repræsentation, E, er splittet op så man kan se diagonal elementerne af matricen og ikke blot karakteren (som er: $\omega + \omega^2 = -1$) Denne gruppe er en undergruppe af D_3 gruppen.

Det kan ses at vi har tre mulige bølgefunktion til denne gruppe:

$$|\psi\rangle_S^{(k)} = \begin{cases} \left|\psi_{\frac{1}{2}}^{(0)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle\right) \\ \left|\psi_{\frac{1}{2}}^{(1)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|1\rangle + \omega\,|2\rangle + \omega^2\,|3\rangle\right) \\ \left|\psi_{\frac{1}{2}}^{(2)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|1\rangle + \omega^2\,|2\rangle + \omega\,|3\rangle\right) \end{cases} \tag{13}$$

Hvilket Triff et al. skriver som summen:

$$\left|\psi_{\frac{1}{2}}^{(k)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{j=0}^{2} \varepsilon_j^k C_3^j\,|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$$

Hvor C_3^j er operation som drejer systemet $\frac{2\pi}{3}$ j gange. For ϵ_j^k gælder det blot at $\epsilon_j^k = e^{\frac{2\pi i}{3}\cdot j\cdot k}$ således at ω og ω^2 kommer de rigtige steder hen. Disse nye tilstande er eigentilstande til chiralitets operatoren (opskrevet som Triff et al.):

$$C_z\left|\psi_{\frac{1}{2}}^{(1)}\right\rangle = +\left|\psi_{\frac{1}{2}}^{(1)}\right\rangle$$
$$C_z\left|\psi_{\frac{1}{2}}^{(2)}\right\rangle = -\left|\psi_{\frac{1}{2}}^{(2)}\right\rangle$$
$$C_z\left|\psi_{\pm\frac{1}{2}}^{(0)}\right\rangle = 0$$
$$C_z\left|\psi_{\pm\frac{3}{2}}\right\rangle = 0 \text{ (da } C_z\,|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = C_z\,|\downarrow\downarrow\downarrow\rangle = 0)$$

3.2 Hamilitonoperatoren

Jeg opskriver Hamiliton operatoren for spinsystemet som:

$$\mathscr{H} = J_A \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 + J_B \mathbf{s}_2 \cdot \mathbf{s}_3 + J_C \mathbf{s}_3 \cdot \mathbf{s}_1$$

$$\mathscr{H} \Big/ \tfrac{-\hbar^2}{4} = \begin{array}{c} \\ \langle 1| \\ \langle 2| \\ \langle 3| \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} |1\rangle & |2\rangle & |3\rangle \end{array} \\ \begin{bmatrix} -J_A + J_B - J_C & 2J_A & 2J_C \\ 2J_A & -J_A - J_B + J_C & 2J_B \\ 2J_C & 2J_B & J_A - J_B - J_C \end{bmatrix} \end{array}$$

Hvor J_i er koblingskonstanten mellem de to spin. Hamiliton-matricen er udtryk i basen $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$, men jeg vil gerne have den udtryk i en base af egenfunktioner til chiralitets operatoren. Jeg skal altså bruge basen (fra (13)):

$$\left|\psi^{(0)}_{\frac{1}{2}}\right\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{3}} \left(|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle\right)$$
$$\left|\psi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\right\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{3}} \left(|1\rangle + \omega\,|2\rangle + \omega^2\,|3\rangle\right)$$
$$\left|\psi^{(2)}_{\frac{1}{2}}\right\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{3}} \left(|1\rangle + \omega^2\,|2\rangle + \omega\,|3\rangle\right)$$

Jeg skifter base for min hamiliton ved at udregne overlappet mellem baserne:

$$\left\langle \psi^{(k)}_{\frac{1}{2}} \,\middle|\, S \right\rangle \; og \; \left\langle S \,\middle|\, \psi^{(k)}_{\frac{1}{2}} \right\rangle$$

hvor $|S\rangle = |1\rangle \wedge |2\rangle \wedge |3\rangle$. Det gælder at:

$$\left\langle \psi^{(k)}_{\frac{1}{2}} \,\middle|\, S \right\rangle \langle S|\, \mathscr{H}\, |S\rangle \left\langle S \,\middle|\, \psi^{(k)}_{\frac{1}{2}} \right\rangle = \left\langle \psi^{(k)}_{\frac{1}{2}} \middle|\, \mathscr{H} \,\middle| \psi^{(k)}_{\frac{1}{2}} \right\rangle$$

da $|S\rangle \langle S| = \mathbb{1}$. Hamilitonoperatoren i den nye base bliver derfor:

$$\mathscr{H} \Big/ \frac{-\hbar^2}{4} = \begin{array}{c} \\ \left\langle \psi^{(0)}_{\frac{1}{2}} \right| \\ \left\langle \psi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \right| \\ \left\langle \psi^{(2)}_{\frac{1}{2}} \right| \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \left|\psi^{(0)}_{\frac{1}{2}}\right\rangle & \left|\psi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\right\rangle & \left|\psi^{(2)}_{\frac{1}{2}}\right\rangle \end{array} \\ \begin{bmatrix} J & 0 & 0 \\ 0 & -J & \Phi \\ 0 & \Phi^* & -J \end{bmatrix} \end{array}$$

Hvor J er $J = J_A + J_B + J_C$ og Φ er $\Phi = -\left(J_A - 2J_B + J_C\right) + i\sqrt{3}\left(J_A - J_C\right)$ Hvis der ikke er noget ekstern felt kan hamilitonoperatoren forsimples ved at lade de tre koblingskonstanter være lige store, $J_A = J_B = J_C = J$, således at hamilitonoperatoren bliver:

$$\mathscr{H} \Big/ \frac{-3\hbar^2}{4} = \begin{array}{c} \\ \left\langle \psi^{(0)}_{\frac{1}{2}} \right| \\ \left\langle \psi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \right| \\ \left\langle \psi^{(2)}_{\frac{1}{2}} \right| \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \left|\psi^{(0)}_{\frac{1}{2}}\right\rangle & \left|\psi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\right\rangle & \left|\psi^{(2)}_{\frac{1}{2}}\right\rangle \end{array} \\ \begin{bmatrix} J & 0 & 0 \\ 0 & -J & 0 \\ 0 & 0 & -J \end{bmatrix} \end{array}$$

3.3 Kobling med et elektrisk felt

Sætter vi et eksternt elektrisk felt på vores system vil det ikke længere gælde at $J_A = J_B = J_C = J$. Det elektriske felt har formen:

$$\mathscr{E} = \sum_i e\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{E} = e\mathbf{R} \cdot \mathbf{E}$$

hvor $\mathbf{r}_i$ er koordinaterne for den i'te elektron, e er elektronens ladning og $\mathbf{R} = \sum_i \mathbf{r}_i$. $\mathbf{R}$ kan også betragtes som operatoren: $\mathbf{R} = \widehat{X}, \widehat{Y}, \widehat{Z}$. Selvom vi allerede har skrevet den mest generelle hamiltonoperator op for spinsystemet, vil jeg stadig prøve at bruge gruppeteori til at se om jeg kan reducere problemet.

Hvis vi vender tilbage til afsnittet med udvalgsregler for pertubationshamiltonsoperator ser vi at vi allerede har regnet et eksempel med en trekantsgruppen D_3 hvor vi fandt at der kun var ikke-diagonal elementer mellem eigentilstande tilhørende henholdvis A_1 og A_2 og mellem E og E når feltet var udelukkende i z-retningen. Alle overgange var tilladte når feltet var i xy-planet. Vi ser ikke længere på D_3 gruppen, men vores gruppe C_3, men fremgangsmetoden er ækvivalent. Det elektrisk felt dekomponere ned i A og E og de mulige overgange når feltet er i z-retningen er:

$$E = E_z \rightarrow \left\{ \begin{array}{c} A \times A = A \\ A \times E = E \end{array} \right\} \rightarrow A \leftrightarrow A \quad E \leftrightarrow E$$

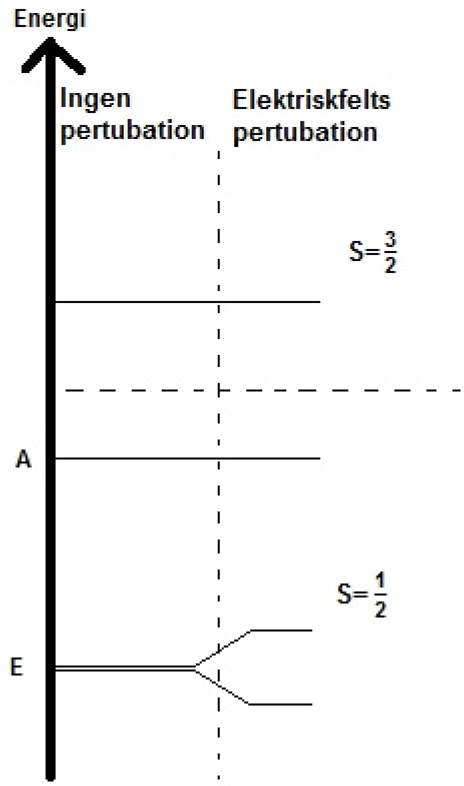
De tilladte overgange når feltet er løber i xy-planet er:

$$E = E_{xy} \rightarrow \left\{ \begin{array}{c} E \times A = E \\ E \times E = A \end{array} \right\} \rightarrow A \leftrightarrow E \quad E \leftrightarrow E$$

Undersøger vi matrixelementerne mellem eigentilstande opdager vi hurtigt at selvom overgangen mellem A og E ikke er forbudt er der ikke noget matrixelement mellem to eigentilstande til hver deres repræsentation. Altså er den endelige hamilitonoperator med pertubationen:

$$\mathscr{H} \Big/ \frac{-\hbar^2}{4} = \begin{array}{c|ccc} & \left|\psi^{(0)}_{\frac{1}{2}}\right\rangle & \left|\psi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\right\rangle & \left|\psi^{(2)}_{\frac{1}{2}}\right\rangle \\ \hline \left\langle\psi^{(0)}_{\frac{1}{2}}\right| & J & 0 & 0 \\ \left\langle\psi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\right| & 0 & -J & \Phi \\ \left\langle\psi^{(2)}_{\frac{1}{2}}\right| & 0 & \Phi^* & -J \end{array}$$

Og energispektrummet bliver derfor:



Figur 5: Energispektrummet for trekantssystemmet. S angiver det totale spin, E og A referere til repræsentationerne tilstandene hører til. Bemærk opsplitningen af det udartet energiniveau for E.

4 Et femkantet kvantesystem med 5 partikler

Jeg bruger samme fremgangsmetode som for trekantssystemmet. Denne gang er gruppen dog noget større, navnligt D_5. Hvis vi betragter kun spinnet i systemet kan vi nøjes med C_5.