Cvičení: Subdukovaná reprezentace a poruchový počet

Úvod:

- Nechť H_0 (neporušený hamiltonián) má grupu symetrie G_0 a nechť je systém popsaný H_0 ovlivněn poruchou V, tj. celkový hamiltonián $H = H_0 + V$. Ten bude mít obvykle ~~?~~ menší grupu symetrie G, která bude podgrupou G_0.

1) Pokud je $G = G_0$, tak ~~?~~ možné typy vlastních stavů a hodnot budou stejné a ~~nemůže dojít~~ nedochází k rozštěpení hladin, které měl neporušený systém, neboť opět $\langle \varphi_i^\mu | H | \varphi_j^\nu \rangle = \delta_{\mu\nu}\, \delta_{ij}\, h^\mu$, podobně jako pro H_0.

   Dojde pouze k posunu těchto hladin (tedy pokud není náhodná degenerace, která může být poruchou odstraněna), neboť h^μ se mohou lišit pro ~~dvě ireduc. ...~~ dvě sady ~~?~~ vlastních vekt. φ_i^μ příslušných různým ireduc. repr.)

2) Pokud má V a H nižší symetrii než H_0, popsanou grupou $G \subset G_0$, dochází obecně k rozštěpení hladin, které je dané rozkladem subdukované reprezentace $D(g_0) \downarrow G = D$ na ireduc. repr. G. Tj. přestože vlastní podpr. φ_i^μ byl ireduc. ~~?~~ při působení G_0, tak při působení pouze $G \subset G_0$ se může rozpadnout na několik inv. ireduc. podpr., jejichž vektory budou mít obecně různé vlastní hodnoty.

   Př. H_3^+ „nabourané" $\to$ obecný trojúhelník $\to$ bodová grupa symetrie C_s

   degenerované hladina E se rozštěpí

	E	σ_v
$\chi(g)$	2	0

C_s	E	σ
A'	1	1
A''	1	-1

$$\Rightarrow \quad E = A' \oplus A''$$

Příklad Rozštěpení hladin atomu vloženého do krystalu se symetrií O.

a) hladiny s jsou nedegenerované (pokud odhlédneme od spinu)

$\to$ žádné štěpení

b) hladina p je trojnásobně degenerovaná, obecný charakter pro rotaci o úhel φ je $\chi^\ell(\varphi) = \dfrac{\sin(\ell + \frac{1}{2})\varphi}{\sin \frac{1}{2}\varphi} = \sum_{m=-\ell}^{\ell} e^{im\varphi}$

odtud

O	E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_4$	$6C_2'$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
E	2	-1	2	0	0
T_1	3	0	-1	1	-1
T_2	3	0	-1	-1	1
$\ell = 1 \to \chi^1$	3	0	-1	1	-1

$\Rightarrow$ hladina p se nerozštěpí, vlastní stavy tvoří bázi ireduc. repr. T_1

c) hladina D – 5-násobně genenerované pro $l=2$

nyní

	E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_4$	$6C_2'$
χ^2	5	−1	1	−1	1

$a^{A_1} = \frac{1}{24}(5-8+3-6+6) = 0$

$a^{A_2} = \frac{1}{24}(5-8+3+6-6) = 0$

$a^{E} = \frac{1}{24}(10+8+6) = 1$

$a^{T_1} = \frac{1}{24}(15-3-6-6) = 0$

$a^{T_2} = \frac{1}{24}(15-3+6+6) = 1$

$\Rightarrow \Gamma^D = E \oplus T_2$, rozštěpení na dvě hladiny: 2-násobně a 3-nás. degenerované

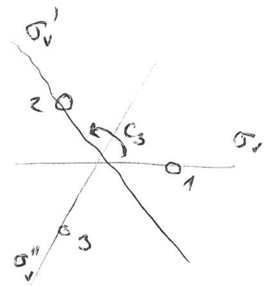
d) hladina F

	E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_4$	$6C_2'$
χ^3	7	1	−1	−1	−1

$\Rightarrow \Gamma^F = A_2 \oplus T_1 \oplus T_2$

Cvičení: Indukovaná reprezentace a Frobeniův recipr. teorém

1) $G = C_{3v}$, $H = \{E, \sigma_v\} \sim C_s$ (pozor $C_{3v} \neq C_3 \times C_s$)



$D_H^1 = A'$ – ireduc. repr. podgrupy H

Zkonstruujte indukovanou repr. $A' \uparrow C_{3v}$:

$G = H + C_3 H + C_3^2 H$ tj. $g_1 = E$, $g_2 = C_3$, $g_3 = C_3^2$

$= \{E, \sigma_v\} + \{C_3, \sigma_v''\} + \{C_3^2, \sigma_v'\}$

E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ_v''
C_3	C_3^2	E	σ_v''	σ_v	σ_v'
C_3^2	E	C_3	σ_v'	σ_v''	σ_v
σ_v	σ_v'	σ_v''	E	C_3	C_3^2
σ_v'	σ_v''	σ_v	C_3^2	E	C_3
σ_v''	σ_v	σ_v'	C_3	C_3^2	E

Obecně $D_G(g)_{sj,ti} = \delta_{st}(g)\, D_H(g_s^{-1} g g_t)_{ji}$

Protože v A' je $D_H(h) = 1$ pro $\forall h \in H$

odpadají indexy j, i a máme

$$D_G(g)_{st} = \delta_{st}(g) \begin{cases} 1 & \text{pro } g g_t \in g_s H \\ 0 & \text{pro } g g_t \notin g_s H \end{cases}$$

$E g_t \in g_s H$

$$D_G(E) = \begin{array}{c|c} & t \\ \hline s & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

pro první řádek $s=1$
$g_1 = E$ máme $g_t \in H$
2. řádek $g_2 = C_3$: $g_t \in C_3 H$
atd.

$$D_G(C_3) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \leftarrow C_3 g_t \in H \\ \leftarrow C_3 g_t \in C_3 H \\ C_3 g_t \in C_3^2 H \end{array}$$

$$D_G(C_3^2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad D_G(\sigma_v) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad D_G(\sigma_v') = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad D_G(\sigma_v'') = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$\sigma_v g_t \in H$

$A_1' \uparrow G$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
$\chi^{A' \uparrow G}$	3	0	1
A_1	1	1	1
A_2	1	1	−1
E	2	−1	0
$\chi^{A'' \uparrow G}$	3	0	−1

$\frac{1}{6}\sum_g |\chi(g)|^2 = \frac{1}{6}(9+3) = 2 = \sum a_m^2$

známe $\rightarrow A_1$ obsažena 1x

$a_{A_1} = \frac{1}{6}(3+3) = 1$

$\hookrightarrow$ charakter $\rightarrow$ $\chi_G(g) - \chi_{A_1}(g)$

$A' \uparrow G = A_1 \oplus E \qquad a_E^{A' \uparrow G} = 1$

viz

$E \downarrow H = A' \oplus A'' \qquad a_{A'}^{E \downarrow H} = 1$

ok

Podobně $A'' \uparrow G = A_2 \oplus E \qquad a_{A''}^{E \downarrow H} = 1 = a_E^{A'' \uparrow G}$

Přímo z charakterů

$\chi_G(g) = \sum_s \delta_{ss}(g) \underbrace{\chi_H(g_s^{-1} g g_s)}_{1}$

$\delta_{ss}(g) = 1$ pro $g g_s = g_s H$

stačí pro třídy sdruž. prvků