Σετ ασκήσεων Θεωρίας Ομάδων

Σωμάτιο μάζας μ εγκλωβισμένο στο τετραγωνικό δυναμικό:

$$U(x,y)=\begin{cases}0, & (x,y)\in\left[-\frac{L}{2},\frac{L}{2}\right]\times\left[-\frac{L}{2},\frac{L}{2}\right]\\ \infty, & (x,y)\notin\left[-\frac{L}{2},\frac{L}{2}\right]\times\left[-\frac{L}{2},\frac{L}{2}\right]\end{cases}$$

i) Ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές:

Για ευκολία στους υπολογισμούς, θα λύσουμε το πρόβλημα για $(x',y')\in[0,L]\times[0,L]$ και στο τέλος θα κάνουμε την αλλαγή

$$x'=x+\frac{L}{2}\ ,\ y'=y+\frac{L}{2}$$

Άρα θα λύσουμε το πρόβλημα:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2\psi(x',y')}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2\psi(x',y')}{\partial y'^2}\right)=E\psi(x',y').$$

με συνοριακές συνθήκες: $\psi(0,y')=\psi(L,y')=\psi(x',0)=\psi(x',L)=0.$

→ Για να λύσουμε το συγκεκριμένο πρόβλημα θα χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο των χωριζομένων μεταβλητών. Γιατί;

Αρχικά ας παρατηρήσουμε ότι το δυναμικό μπορεί να γραφεί ως:

$$U(x',y')=V(x')+V(y')\text{ όπου γενικά }V(z)=\begin{cases}0, & z\in[0,L]\\ \infty, & z\notin[0,L].\end{cases}$$

Επομένως, η εξίσωση Schrödinger γράφεται ως εξής:

$$\underbrace{(\hat{H}_{x'}+\hat{H}_{y'})\psi(x',y')=E\psi(x',y')\text{ όπου }\hat{H}_{x'}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx'^2}+V(x')}$$

ομοίως για $\hat{H}_{y'}$

Σε αυτή τη περίπτωση μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο των χωριζομένων μεταβλητών!

Επομένως, για τη κυματοσυνάρτηση έχουμε: $\psi(x',y') = \psi_1(x')\,\psi_2(y')$.

$$\xRightarrow{\text{Schrödinger}} -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{\psi_1}\frac{d^2\psi_1}{dx'^2} + \frac{1}{\psi_2}\frac{d^2\psi_2}{dy'^2}\right) = E.$$

$$\Rightarrow \quad \bullet\ \frac{d^2\psi_1}{dx'^2} = -\frac{E_1 2\mu}{\hbar^2}\psi_1 = -k_1^2\psi_1$$

$$\bullet\ \frac{d^2\psi_2}{dy'^2} = -\frac{E_2 2\mu}{\hbar^2}\psi_2 = -k_2^2\psi_2$$

όπου $E_1 + E_2 = E$.

Η λύση των δυο παραπάνω εξισώσεων είναι η:

- $\psi_1(x') = A_1\sin(k_1x') + B_1\cos(k_1x')$
- $\psi_2(y') = A_2\sin(k_2y') + B_2\cos(k_2y')$.

Από τις συνοριακές συνθήκες $\psi_1(0) = \psi_2(0) = 0$ προκύπτει ότι:

$$\psi_1(x') = A_1\sin(k_1x') \quad , \quad \psi_2(y') = A_2\sin(k_2y')$$

και τέλος από τις συνοριακές συνθήκες $\psi_1(L) = \psi_2(L) = 0$ έχουμε:

$$\left.\begin{array}{l}\sin(k_1L) = 0\\ \sin(k_2L) = 0\end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l}k_{1,n} = n\pi/L = k_n\\ k_{2,m} = m\pi/L = k_m\end{array}$$

Επομένως, οι ιδιοενέργειες είναι ίσες με:

$$E = E_1 + E_2 = \frac{k_1^2\hbar^2}{2\mu} + \frac{k_2^2\hbar^2}{2\mu}$$

$$\Rightarrow \boxed{E_{n,m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu L^2}\left(n^2 + m^2\right)}$$

$$\overset{N}{\underset{\parallel}{}}$$

Για τις ιδιοκαταστάσεις: $\varphi_{n,m}(x',y') = A_1 A_2 \sin(k_n x')\sin(k_m y')$

Κανονικοποίηση: $\int_0^L dx' \int_0^L dy' \, |\varphi_{n,m}(x',y')|^2 = 1 \Rightarrow \dots \Rightarrow N = L/2.$

Άρα $\varphi_{n,m}(x',y') = \frac{1}{2}\sin(k_n x')\sin(k_m y')$

και τέλος θα κάνουμε την αλλαγή $x' = x + L/2$ και $y' = y + L/2$

Χρησιμοποιώντας την τριγωνομετρική ταυτότητα:

$$\sin(a+b) = \sin a \cos b + \cos a \sin b.$$

$$\Rightarrow \dots \Rightarrow \boxed{\begin{aligned}\varphi_{n,m}(x,y) = \frac{2}{L}\Big\{ & \sin(k_n x)\sin(k_m y)\cos(n\pi/2)\cos(m\pi/2) + \\ & \sin(k_n x)\cos(k_m y)\cos(n\pi/2)\sin(m\pi/2) + \\ & \cos(k_n x)\sin(k_m y)\sin(n\pi/2)\cos(m\pi/2) + \\ & \cos(k_n x)\cos(k_m y)\sin(n\pi/2)\sin(m\pi/2) \Big\}\end{aligned}}$$

- Έστω n,m περιττοί:

$$\varphi_{n,m}(x,y) = \frac{2}{L}\cos(k_n x)\cos(k_m y)\sin(n\pi/2)\sin(m\pi/2)$$

- Έστω n,m άρτιοι:

$$\varphi_{n,m}(x,y) = \frac{2}{L}\sin(k_n x)\sin(k_m y)\cos(n\pi/2)\cos(m\pi/2).$$

- Έστω n περιττός, m άρτιος:

$$\varphi_{n,m}(x,y) = \frac{2}{L}\cos(k_n x)\sin(k_m y)\sin(n\pi/2)\cos(m\pi/2)$$

• Έστω n άρτιος, m περιττός:

$$\psi_{n,m}(x,y) = \frac{2}{L}\sin(k_n x)\cos(k_m y)\cos(n\pi/2)\sin(m\pi/2).$$

Άρα γενικά:

$$\psi_{n,m}(x,y) = C_{n,m}(L)\begin{Bmatrix}\cos(k_n x)\\ \\ \sin(k_n x)\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}\cos(k_m y)\\ \\ \sin(k_m y)\end{Bmatrix}.$$

Συμβολισμός: Συνδυάζουμε ένα οποιοδήποτε στοιχείο της πρώτης στήλης στις αγκύλες με ένα στοιχείο της δεύτερης στήλης.

cos → n ή m περιττός

sin → n ή m άρτιος.

και $C_{n,m}(L) = \pm 2/L$.

Ερώτημα ii) Χαμιλτονιανή ομάδα του προβλήματος:

Ένα πολύγωνο με N κορυφές έχει τις εξής συμμετρίες:

$2N$ στοιχεία.
- N ανακλάσεις
- στροφές κατά $2\pi j/N$, $j=1,2,\dots,N-1$.
- ουδέτερο στοιχείο.

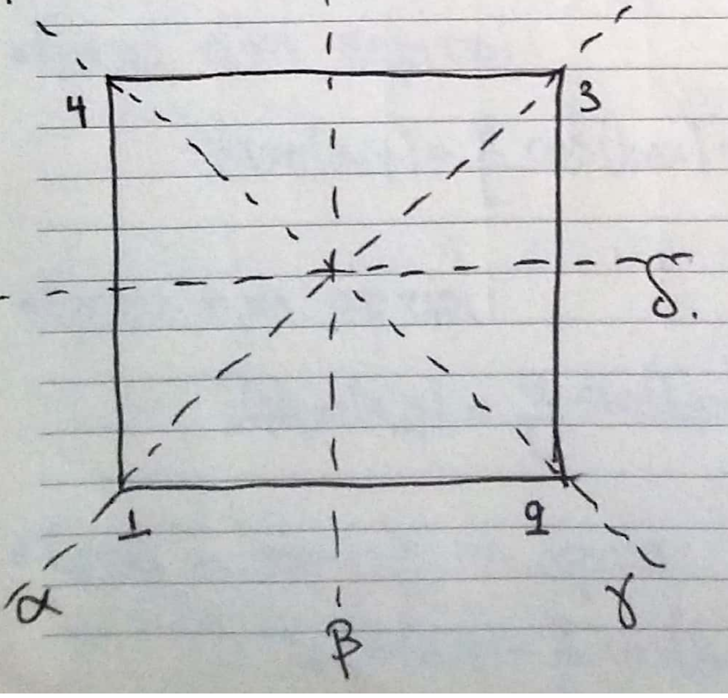
Τις ομάδες συμμετρίας των κανονικών πολυγώνων τις συμβολίζουμε με D_N.

⇒ Στο πρόβλημα δίνεται το τετράγωνο, άρα η ομάδα συμμετρίας είναι η D_4.

Παρατήρηση: Η συνολική Χαμιλτονιανή παραμένει αναλλοίωτη σε αυτούς τους μετασχηματισμούς. Ανακλάσεις και στροφές δεν αλλάζουν τα μήκη διανυσμάτων. Το διάνυσμα είναι το $\vec{\nabla}$. Το μήκος του είναι η Λαπλασιανή ∇^2.

Προσοχή: Δεν αφήνουν όλοι οι γραμμικοί μετασχηματισμοί αναλλοίωτη την H.

Εμείς μελετάμε τη κατηγορία των δυναμικών που είναι 0 σε ένα χωρίο του R^2 και άπειρο απ' έξω. Η ομάδα συμμετρίας καθορίζεται από τις συμμετρίες που έχει το χωρίο.
Αν αυτές οι συμμετρίες αφήνουν αναλλοίωτη και τη Λαπλασιανή ∇^2 τότε αυτή είναι η Χαμιλτονιανή ομάδα του προβλήματος.



Ανακλάσεις

- $(1\ 2\ 3\ 4) \xrightarrow{\alpha} (1\ 4\ 3\ 2)$
- $(1\ 2\ 3\ 4) \xrightarrow{\gamma} (3\ 2\ 1\ 4)$
- $(1\ 2\ 3\ 4) \xrightarrow{\beta} (2\ 1\ 4\ 3)$
- $(1\ 2\ 3\ 4) \xrightarrow{\delta} (4\ 3\ 2\ 1)$

Στροφές

- $(1\ 2\ 3\ 4) \xrightarrow{\pi/2} (2\ 3\ 4\ 1)$
- $(1\ 2\ 3\ 4) \xrightarrow{\pi} (3\ 4\ 1\ 2)$.
- $(1\ 2\ 3\ 4) \xrightarrow{3\pi/2} (4\ 1\ 2\ 3)$.

Επομένως, τα στοιχεία της ζητούμενης ομάδας είναι τα:

$$e=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\1&2&3&4\end{pmatrix}$$

$$g_2=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\1&4&3&2\end{pmatrix}, \quad g_3=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\3&2&1&4\end{pmatrix}$$

$$g_4=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\2&1&4&3\end{pmatrix}, \quad g_5=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\4&3&2&1\end{pmatrix}.$$

$$g_6=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\3&4&1&2\end{pmatrix}.$$

$$g_7=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\2&3&4&1\end{pmatrix}, \quad g_8=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\4&1&2&3\end{pmatrix}.$$

Τώρα, θα υπολογίσουμε τον πίνακα πολλαπλασιασμού. Ας βρούμε κάποια στοιχεία.

$$g_2g_3=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\1&4&3&2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&3&4\\3&2&1&4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3&2&1&4\\3&4&1&2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&3&4\\3&2&1&4\end{pmatrix}=$$

$$=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\3&4&1&2\end{pmatrix}=g_6.$$

$$g_3g_2=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\3&2&1&4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&3&4\\1&4&3&2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&4&3&2\\3&4&1&2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&3&4\\1&4&3&2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\3&4&1&2\end{pmatrix}=g_6$$

$$g_2 g_7 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 3 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 & 1 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = g_5.$$

$$g_7 g_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 3 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 3 & 2 \\ 2 & 1 & 4 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 3 & 2 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 4 & 3 \end{pmatrix} = g_4.$$

$\Rightarrow$ Μη αβελιανή ομάδα.

Συνολικά, ο πίνακας πολλαπλασιασμού που προκύπτει:

D_4	e	g_2	g_3	g_4	g_5	g_6	g_7	g_8
e	e	g_2	g_3	g_4	g_5	g_6	g_7	g_8
g_2	g_2	e	g_6	g_8	g_7	g_3	g_5	g_4
g_3	g_3	g_6	e	g_7	g_8	g_2	g_4	g_5
g_4	g_4	g_7	g_8	e	g_6	g_5	g_2	g_3
g_5	g_5	g_8	g_7	g_6	e	g_4	g_3	g_2
g_6	g_6	g_3	g_2	g_5	g_4	e	g_8	g_7
g_7	g_7	g_4	g_5	g_3	g_2	g_8	g_6	e
g_8	g_8	g_5	g_4	g_2	g_3	g_7	e	g_6

Είναι εύκολο τώρα να δούμε την τάξη όλων των στοιχείων:

- $g_2^2 = g_3^2 = g_4^2 = g_5^2 = g_6^2 = e.$
- $g_7^4 = g_8^4 = e$

Γεννήτορες

Μια επιλογή θα ήταν τα στοιχεία $\{g_2, g_7\}$ ⟹ προσδιορίζουν όλα τα στοιχεία της ομάδας.

⟹ Δεν είναι όμως η μοναδική. Για παράδειγμα τα στοιχεία $\{g_3, g_7\}$ είναι επίσης γεννήτορες.

Γενικά μια ανάκλαση κάθετη μαζί με μια διαγώνια ανάκλαση είναι γεννήτορες.

Επίσης, μια ανάκλαση (οποιαδήποτε) μαζί με μια στροφή ($\pi/2$ ή $3\pi/2$) είναι επίσης γεννήτορες.

Υποομάδες

Αφού τα στοιχεία g_2, g_3, g_4, g_5, g_6 είναι τάξης 2:

⟹ Το κάθε ένα από αυτά μαζί με το ουδέτερο θα ορίζουν υποομάδες.

Επίσης από το Θεώρημα Lagrange, γνωρίζουμε ότι οι δυνατές υποομάδες θα έχουν:

είτε 1 στοιχείο ⟹ το ουδέτερο.
" 2 στοιχεία ⟹ τις βρήκαμε
" 4 " ⟹ πρέπει να τις βρούμε.
" 8 " ⟹ η ίδια η ομάδα!

Από τον πίνακα πολλαπλασιασμού είναι εύκολο να δούμε ότι τα σύνολα $\{e, g_4, g_5, g_6\}$, $\{e, g_6, g_7, g_8\}$ και $\{e, g_2, g_3, g_6\}$ ικανοποιούν τις ιδιότητες ομάδας. Άρα συνολικά:

$H_2^{(1)} = \{e, g_2\}$

$H_2^{(2)} = \{e, g_3\}$.

$H_2^{(3)} = \{e, g_4\}$.

$H_2^{(4)} = \{e, g_5\}$.

$H_2^{(5)} = \{e, g_6\}$.

$H_4^{(1)} = \{e, g_6, g_7, g_8\} \simeq C_4$.

$H_4^{(2)} = \{e, g_4, g_5, g_6\} \simeq C_2 \otimes C_2$

$H_4^{(3)} = \{e, g_2, g_3, g_6\} \simeq C_2 \otimes C_2$

Ερώτημα iii)

Να βρεθούν οι διαστάσεις των μη ισοδύναμων, μη αναγώγιμων αναπαραστάσεων της Χαμιλτονιανής καθώς και ο πίνακας χαρακτήρων που τους αντιστοιχεί.

Για να βρούμε τον αριθμό των μη ισοδύναμων, μη αναγώγιμων αναπαραστάσεων, θα πρέπει να βρούμε τον αριθμό των κλάσεων συζυγίας.

Ξεκινάμε βρίσκοντας τους κανονικοποιητές των στοιχείων:

(ορισμός κανονικοποιητή $N_g = \{g_i \in G \mid g_i g = g g_i\}$).

Από τον πίνακα πολλαπλασιασμού έχουμε:

$N_{g_2} = \{e, g_2, g_3, g_6\} \rightsquigarrow |C_{g_2}| = 2.$

$N_{g_3} = \{e, g_2, g_3, g_6\} \rightsquigarrow |C_{g_3}| = 2.$

$N_{g_4} = \{e, g_4, g_5, g_6\} \rightsquigarrow |C_{g_4}| = 2$

$N_{g_5} = \{e, g_4, g_5, g_6\} \rightsquigarrow |C_{g_5}| = 2$

$N_{g_6} = \{e, g_2, g_3, g_4, g_5, g_6, g_7, g_8\} \rightsquigarrow |C_{g_6}| = 1.$

$N_{g_7} = \{e, g_6, g_7, g_8\} \rightsquigarrow |C_{g_7}| = 2$

$N_{g_8} = \{e, g_6, g_7, g_8\} \rightsquigarrow |C_{g_8}| = 2.$

Άρα μέχρι στιγμής μπορούμε να βρούμε εύκολα 2 κλάσεις συζυγίας:

$\{e\}, \{g_6\}.$

Γνωρίζουμε επίσης ότι μια κλάση συζυγίας αποτελείται από στοιχεία ιδίας τάξης. Άρα αναγκαστικά το σύνολο:

$$\{g_7, g_8\}$$

είναι μια ακόμα κλάση συζυγίας.

Και μας απομένουν τα στοιχεία g_2, g_3, g_4, g_5.

Θα εργαστούμε ως εξής: Βρίσκουμε το σύμπλοκο $g_4 N g_2$:

$g_4 N g_2 = \{g_4, g_7, g_8, g_5\}$.

Ενώ:

$g_4 g_2 g_4^{-1} = \{g_3, g_3, g_3, g_3\}$. ενώ γνωρίζουμε ότι το g_2 ανήκει στη C_{g_2}.

⟶ Άρα η επόμενη κλάση συζυγίας είναι η: $\{g_2, g_3\}$.

Και προφανώς προκύπτει μια ακόμα κλάση συζυγίας με τα στοιχεία: $\{g_4, g_5\}$.

Άρα συνολικά 5 κλάσεις συζυγίας: $\{e\}, \{g_2, g_3\}, \{g_4, g_5\}, \{g_6\}, \{g_7, g_8\}$.

Συμβολισμός.

- $\{e\}$: περιέχει μόνο το ουδέτερο στοιχείο
- $\{g_4, g_5\} = 2\tilde{\sigma}_{v}$ ⟶ ανακλάσεις σε κάθετα επίπεδα.
  ↳ 2 στοιχεία
- $\{g_2, g_3\} = 2\tilde{\sigma}_{d}$ ⟶ ανακλάσεις σε κάθετα επίπεδα που περιέχουν τις διαγωνίους.
- $\{g_6\} = \tilde{C}_2$ ⟶ στροφή κατά $2\pi/2$.
  γενικά $\tilde{C}_n$ = στροφή κατά $2\pi/n$.
- $\{g_7, g_8\} = 2\tilde{C}_4$ ⟶ προσδιορίζει μόνο το g_7 που είναι η στροφή κατά $\frac{2\pi}{4} = \pi/2$

Μη ισοδύναμες μη αναγώγιμες αναπαραστάσεις

Αφού οι κλάσεις συζυγίας είναι 5, θα έχουμε και 5 μη ισοδύναμες, μη αναγώγιμες αναπαραστάσεις, οι διαστάσεις των οποίων θα καθορίζονται από τη σχέση:

$$\sum_{k=1}^{5} d_k^2 = |G| = 8$$ με $d_1 = 1$ πάντα (τετριμμένη αναπαράσταση).

$\Rightarrow d_2^2 + d_3^2 + d_4^2 + d_5^2 = 7 \Rightarrow$ Μοναδική λύση: $d_2 = d_3 = d_4 = 1$, $d_5 = 2$.

Άρα ο πίνακας χαρακτήρων θα έχει αρχικά τη μορφή:

D_4	$\{e\}$	$2C_4$	C_2	$2\tilde{\sigma}_v$	$2\tilde{\sigma}_d$
$\Gamma_1^{(1)}$	1	1	1	1	1
$\Gamma_1^{(2)}$	1				
$\Gamma_1^{(3)}$	1				
$\Gamma_1^{(4)}$	1				
Γ_2	2				

Μπορούμε εύκολα να προσδιορίσουμε τη διδιάστατη μη αναγώγιμη αναπαράσταση, εξετάζοντας τους μετασχηματισμούς του διανύσματος στήλη $(x\ y)^T$ ως προς τη δράση των στοιχείων της ομάδας:

$$e: \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$2\tilde{\sigma}_d$

g_2: Ανάκλαση διαγώνια $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$.

g_3: Ανάκλαση αντιδιαγώνια $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -y \\ -x \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$

ίχνος=0

g_4: Ανάκλαση y-z $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -x \\ y \end{pmatrix} \rightsquigarrow \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

$2\tilde{\sigma}_v$ ίχνος=0.

g_5: Ανάκλαση x-z $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x \\ -y \end{pmatrix} \rightsquigarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

$\tilde{C}_2$: g_6: Στροφή π $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -x \\ -y \end{pmatrix} \rightsquigarrow \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ ίχνος=-2.

$2\tilde{C}_4$ g_7: Στροφή π/2: $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -y \\ x \end{pmatrix} \rightsquigarrow \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix}$.

ίχνος = 0

g_8: Στροφή 3π/2 $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} y \\ -x \end{pmatrix} \rightsquigarrow \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$

Γενικότερη στροφή $\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ +\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$.

Άρα ο πίνακας χαρακτήρων παίρνει τώρα τη μορφή:

D_4	$\{e\}$	$2\tilde{C}_4$	$\tilde{C}_2$	$2\tilde{\sigma}_v$	$2\tilde{\sigma}_d$
$\Gamma_1^{(1)}$	1	1	1	1	1
$\Gamma_1^{(2)}$	1				
$\Gamma_1^{(3)}$	1				
$\Gamma_1^{(4)}$	1	x	y	z	k
Γ_2	2	0	-2	0	0

Και έστω ότι θέλω να βρω τα x, y, z, k:

Από το μεγάλο θεώρημα ορθογωνιότητας:

$$\sum_{\rho=1}^{5} n_\rho \chi_\rho^{*(\kappa)} \chi_\rho^{(\kappa')} = |G| \delta_{\kappa\kappa'}$$

για $\kappa=1, \kappa'=4$: $1+2x+y+2z+2k=0$

για $\kappa=5, \kappa'=4$: $2+0-2y+0+0=0 \Rightarrow y=1$

Άρα σε κάθε γραμμή ο χαρακτήρας του $\tilde{C}_2$ θα είναι 1 !

Δηλαδή

	$\{e\}$	$2\tilde{C}_4$	$\tilde{C}_2$	$2\tilde{\sigma}_v$	$2\tilde{\sigma}_d$
$\Gamma_1^{(1)}$	1	1	1	1	1
$\Gamma_1^{(2)}$	1		1		
$\Gamma_1^{(3)}$	1		1		
$\Gamma_1^{(4)}$	1		1		
Γ_2	2	0	-2	0	0

Τέλος για να συμπληρώσω και τα υπόλοιπα στοιχεία θα κάνω την εξής παρατήρηση. Από τον πίνακα πολλαπλασιασμού έχω:

$$g_2 g_4 = g_7 \quad , \quad g_2 g_7 = g_4.$$

Αυτές οι σχέσεις θα πληρούνται και για τους χαρακτήρες (μονοδιάστατες αναπαραστάσεις)

Δυνατοί τρόποι για να πληρούνται αυτές οι σχέσεις

- $\chi(g_2) = \chi(g_4) = -1 \quad , \quad \chi(g_7) = 1$
- $\chi(g_2) = \chi(g_7) = -1 \quad , \quad \chi(g_4) = 1$
- $\chi(g_4) = \chi(g_7) = -1 \quad , \quad \chi(g_2) = 1.$

Όπως 3 είναι και οι ΜΙ, ΜΑ αναπαραστάσεις που πρέπει να συμπληρώσουμε.

	$\{e\}$	$2\tilde{C}_4$	$\tilde{C}_2$	$2\tilde{\sigma}_s$	$2\tilde{\sigma}_d$
$\Gamma_1^{(1)}$	1	1	1	1	1
$\Gamma_1^{(2)}$	1	1	1	-1	-1
$\Gamma_1^{(3)}$	1	-1	1	1	-1
$\Gamma_1^{(4)}$	1	-1	1	-1	1
Γ_2	2	0	-2	0	0.

<u>Ερώτημα iv)</u> Να ταξινομηθούν οι ιδιοκαταστάσεις του i) ερωτήματος ως προς την αναπαράσταση στην οποία ανήκουν:

• Θα εξετάσουμε χωριστά τις ιδιοκαταστάσεις για $n=m$ και για $n\neq m$.

— Ξεκινάμε από τη περίπτωση $\boxed{n=m.}$

Σε αυτή τη περίπτωση δεν υπάρχει εκφυλισμός και για να βρούμε την αναπαράσταση στην οποία ανήκει η κυματοσυνάρτηση θα χρησιμοποιήσουμε τη σχέση:

$$T_{g_i}\,\psi(\vec{x}) = \psi(t_{g_i}^{-1}\,\vec{x}') \quad \text{όπου} \quad \vec{x}' = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}.$$

$$\vec{x}\in \mathbb{R}^2,\ \psi(\vec{x})\in\mathbb{C} \quad \text{και} \quad \psi: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{C}$$

t_{g_i}: είναι οι μετασχηματισμοί συντεταγμένων (διδιάστατη αναπαράσταση που βρήκαμε στο προηγούμενο ερώτημα), άρα πρέπει να βρούμε όλους τους αντιστρόφους των πινάκων t_{g_i}.

t_{g_i} είναι 2×2 πίνακες της μορφής $\begin{pmatrix} \alpha & b \\ c & d \end{pmatrix}$ και γνωρίζουμε ότι οι αντίστροφοι θα δίνονται από τη σχέση:

$$t_{g_i}^{-1} = \frac{1}{\det(t_{g_i})}\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & \alpha \end{pmatrix}$$

- $tg_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \rightsquigarrow tg_2^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix}.$

- $tg_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \rightsquigarrow tg_3^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} -y \\ -x \end{pmatrix}.$

- $tg_4 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \rightsquigarrow tg_4^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} -x \\ y \end{pmatrix}.$

- $tg_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \rightsquigarrow tg_5^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} x \\ -y \end{pmatrix}.$

- $tg_6 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \rightsquigarrow tg_6^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} -x \\ -y \end{pmatrix}$

- $tg_7 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix} \rightsquigarrow tg_7^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} y \\ -x \end{pmatrix}$

- $tg_8 = \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \rightsquigarrow tg_8^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} -y \\ x \end{pmatrix}.$

Παρατηρήστε τη διαφορά στα στοιχεία g_7 και g_8!

Τώρα είμαστε έτοιμοι να ξεκινήσουμε:

→ Έστω $n = m =$ περιττός

Κυματοσυνάρτηση: $\varphi_{n,n}(\vec{x}) = C_{n,n}(L) \cos(k_n x) \cos(k_n y)$.

Δράση του κάθε στοιχείου:

$$Tg_2\,\varphi_{n,n}(\vec{x}) = \varphi_{n,n}(y,x) = C_{n,n}(L)\cos(k_n y)\cos(k_n x) = \varphi_{n,n}(x,y)$$

$$Tg_3\,\varphi_{n,n}(\vec{x}) = \varphi_{n,n}(-y,-x) = C_{n,n}(L)\cos(-k_n y)\cos(-k_n x) = \varphi_{n,n}(x,y).$$

$$\vdots$$

Γενικά προκύπτει ότι $\forall g_i : Tg_i\,\varphi_{n,n}(\vec{x}) = \varphi_{n,n}(\vec{x})$.

Άρα αυτή η κυματοσυνάρτηση ανήκει στη $\Gamma_1^{(1)}$ αναπαράσταση (τετριμμένη).

Έστω τώρα $n=m=$ άρτιος.

Κυματοσυνάρτηση: $\varphi_{n,n}(x,y) = C_{n,n}(L)\sin(k_n x)\sin(k_n y)$.

$$Tg_2\,\varphi_{n,n}(\vec{x}) = \varphi_{n,n}(y,x) = C_{n,n}(L)\sin(k_n y)\sin(k_n x) = \varphi_{n,n}(x,y).$$

$$Tg_3\,\varphi_{n,n}(\vec{x}) = \varphi_{n,n}(-y,-x) = C_{n,n}(L)\sin(-k_n y)\sin(-k_n x) = \varphi_{n,n}(x,y).$$

$$Tg_4\,\varphi_{n,n}(\vec{x}) = \varphi_{n,n}(-x,y) = C_{n,n}(L)\sin(-k_n x)\sin(k_n y) = -\varphi_{n,n}(x,y)$$

$$Tg_5\,\varphi_{n,n}(\vec{x}) = \varphi_{n,n}(x,-y) = C_{n,n}(L)\sin(k_n x)\sin(-k_n y) = -\varphi_{n,n}(x,y).$$

$$Tg_6\,\varphi_{n,n}(\vec{x}) = \varphi_{n,n}(-x,-y) = C_{n,n}(L)\sin(-k_n x)\sin(-k_n y) = \varphi_{n,n}(x,y).$$

$$Tg_7\,\varphi_{n,n}(\vec{x}) = \varphi_{n,n}(+y,-x) = C_{n,n}(L)\sin(+k_n y)\sin(-k_n x) = -\varphi_{n,n}(x,y)$$

$$Tg_8\,\varphi_{n,n}(\vec{x}) = \varphi_{n,n}(-y,+x) = C_{n,n}(L)\sin(-k_n y)\sin(+k_n x) = -\varphi_{n,n}(x,y)$$

Και από τον πίνακα χαρακτήρων προκύπτει πολύ εύκολα ότι αυτή η κυματοσυνάρτηση ανήκει στην $\Gamma_1^{(4)}$ αναπαράσταση.

— Τώρα θα μελετήσουμε τη περίπτωση $n \neq m$.

Έχουμε προφανώς εκφυλισμό τάξης 2, αφού οι κυματοσυναρτήσεις $\varphi_{n,m}$ και $\varphi_{m,n}$ έχουν την ίδια ενέργεια. Επομένως, οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις θα σχηματίζουν υπόχωρο διάστασης 2 και θα ανήκουν σε διδιάστατες αναπαραστάσεις. Μας ενδιαφέρει λοιπόν να προσδιορίσουμε τον τρόπο με τον οποίο αλλάζει η διπλέτα:

$$\begin{pmatrix} \varphi_{n,m}(x,y) \\ \varphi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix}.$$

→ Αν n περιττός και m άρτιος.

πχ $n=3$, $m=2$ ⇝ $\varphi_{3,2} = \cos(k_3 x)\sin(k_2 y)\,\frac{2}{L}\sin(3\pi/2)\cos(2\pi/2)$

$\|$

⇝ $\varphi_{2,3} = \sin(k_2 x)\cos(k_3 y)\,\frac{2}{L}\cos(2\pi/2)\sin(3\pi/2)$

Άρα η διπλέτα σε αυτή τη περίπτωση είναι η:

$$C_{n,m}(L)\begin{pmatrix} \cos(k_n x)\sin(k_m y) \\ \sin(k_m x)\cos(k_n y) \end{pmatrix}$$

Και για τη δράση του κάθε στοιχείου έχουμε:

$$T_{g_2}: \begin{pmatrix} \varphi_{n,m}(x,y) \\ \varphi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \varphi_{n,m}(y,x) \\ \varphi_{m,n}(y,x) \end{pmatrix} = C_{n,m}(L)\begin{pmatrix} \cos(k_n y)\sin(k_m x) \\ \sin(k_m y)\cos(k_n x) \end{pmatrix} =$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{\to \text{Trace}=0.}\begin{pmatrix} \varphi_{n,m}(x,y) \\ \varphi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix}$$

$$Tg_3: \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(-y,-x) \\ \psi_{m,n}(-y,-x) \end{pmatrix} = C_{n,m}(L) \begin{pmatrix} -\cos(k_n y)\sin(k_m x) \\ -\sin(k_m y)\cos(k_n x) \end{pmatrix}$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}}_{\text{Trace}=0} \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix}$$

$$Tg_4: \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(-x,y) \\ \psi_{m,n}(-x,y) \end{pmatrix} = C_{n,m}(L) \begin{pmatrix} \cos(k_n x)\sin(k_m y) \\ -\sin(k_m x)\cos(k_n y) \end{pmatrix}$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{\text{Trace}=0.} \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix}$$

$$Tg_5: \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,-y) \\ \psi_{m,n}(x,-y) \end{pmatrix} = C_{n,m}(L) \begin{pmatrix} -\cos(k_n x)\sin(k_m y) \\ \sin(k_m x)\cdot\cos(k_n y) \end{pmatrix}$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\text{Trace}=0.} \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix}$$

$$Tg_6: \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(-x,-y) \\ \psi_{m,n}(-x,-y) \end{pmatrix} = C_{n,m}(L) \begin{pmatrix} -\cos(k_n x)\sin(k_m y) \\ -\sin(k_m x)\cos(k_n y) \end{pmatrix}$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{\text{Trace}=-2} \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix}$$

$$Tg_7: \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(+y,-x) \\ \psi_{m,n}(+y,-x) \end{pmatrix} = C_{n,m}(L) \begin{pmatrix} -\cos(k_n y)\sin(k_m x) \\ \sin(k_m y)\cos(k_n x) \end{pmatrix} =$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{\text{Trace}=0.} \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix}$$

$$Tg_8: \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(-y,+x) \\ \psi_{m,n}(-y,x) \end{pmatrix} = C_{n,m}(L) \begin{pmatrix} \cos(k_n y)\sin(k_m x) \\ -\sin(k_m y)\cos(k_n x) \end{pmatrix} =$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}}_{\text{Trace}=0.} \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix}$$

Άρα:

$$\left.\begin{aligned} g_2 &\rightarrow \text{Trace}=0 \\ g_3 &\rightarrow \text{''} \quad =0 \\ g_4 &\rightarrow \text{''} \quad =0 \\ g_5 &\rightarrow \text{''} \quad =0 \\ g_6 &\rightarrow \text{''} \quad =-2 \\ g_7 &\rightarrow \text{''} \quad =0 \\ g_8 &\rightarrow \text{''} \quad =0. \end{aligned}\right\}$$

Από τον πίνακα χαρακτήρων βλέπουμε πολύ εύκολα ότι η διπλέτα αυτή ανήκει στη Γ_2 αναπαράσταση.

Με όμοιο τρόπο μπορούμε να δείξουμε ότι αν n άρτιος και m περιττός, η διπλέτα ανήκει στη Γ_2!

→ Έστω n,m άρτια $(n\neq m)$.

Π.χ $n=4, m=2$ $\rightsquigarrow \psi_{4,2}=\sin(k_4x)\sin(k_2y)\frac{2}{L}\cos(4\pi/2)\cos(2\pi/2)$

$$\shortparallel$$

$\rightsquigarrow \psi_{2,4}=\sin(k_2x)\sin(k_4y)\frac{2}{L}\cos(2\pi/2)\cos(4\pi/2)$

Άρα η διπλέτα είναι η:

$$C_{n,m}(L)\begin{pmatrix}\sin(k_nx)\sin(k_my)\\ \sin(k_mx)\sin(k_ny)\end{pmatrix}.$$

$$T_{g_2}:\begin{pmatrix}\psi_{n,m}(x,y)\\ \psi_{m,n}(x,y)\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}\psi_{n,m}(y,x)\\ \psi_{m,n}(y,x)\end{pmatrix}=C_{n,m}(L)\begin{pmatrix}\sin(k_ny)\sin(k_mx)\\ \sin(k_my)\sin(k_nx)\end{pmatrix}=$$

$$=\underbrace{\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}}_{\text{Trace}=0.}\begin{pmatrix}\psi_{n,m}(x,y)\\ \psi_{m,n}(x,y)\end{pmatrix}$$

$$T_{g_3}:\begin{pmatrix}\psi_{n,m}(x,y)\\ \psi_{m,n}(x,y)\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}\psi_{n,m}(-y,-x)\\ \psi_{m,n}(-y,-x)\end{pmatrix}=C_{n,m}(L)\begin{pmatrix}\sin(k_ny)\sin(k_mx)\\ \sin(k_my)\sin(k_nx)\end{pmatrix}$$

$$=\underbrace{\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}}_{\text{Trace}=0}\begin{pmatrix}\psi_{n,m}(x,y)\\ \psi_{m,n}(x,y)\end{pmatrix}$$

$$T_{g_4}:\begin{pmatrix}\psi_{n,m}(x,y)\\ \psi_{m,n}(x,y)\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}\psi_{n,m}(-x,y)\\ \psi_{m,n}(-x,y)\end{pmatrix}=C_{n,m}(L)\begin{pmatrix}-\sin(k_nx)\sin(k_my)\\ -\sin(k_mx)\sin(k_ny)\end{pmatrix}=\underbrace{\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}}_{\text{Trace}=-2}\begin{pmatrix}\psi_{n,m}(x,y)\\ \psi_{m,n}(x,y)\end{pmatrix}$$

$$Tg_5: \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,-y) \\ \psi_{m,n}(x,-y) \end{pmatrix} = C_{n,m}(L) \begin{pmatrix} -\sin(k_n x)\sin(k_m y) \\ -\sin(k_n x)\sin(k_m y) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{\text{Trace}=-2.} \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix}$$

$$Tg_6: \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(-x,-y) \\ \psi_{m,n}(-x,-y) \end{pmatrix} = C_{n,m}(L) \begin{pmatrix} \sin(k_n x)\sin(k_m y) \\ \sin(k_m x)\sin(k_n y) \end{pmatrix}$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\text{Trace}=2.} \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix}$$

$$Tg_7: \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(y,-x) \\ \psi_{m,n}(y,-x) \end{pmatrix} = C_{n,m}(L) \begin{pmatrix} -\sin(k_n y)\sin(k_m x) \\ -\sin(k_m y)\sin(k_n x) \end{pmatrix}$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}}_{\text{Trace}=0.} \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix}$$

$$Tg_8: \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(-y,+x) \\ \psi_{m,n}(-y,+x) \end{pmatrix} = C_{n,m}(L) \begin{pmatrix} -\sin(k_n y)\sin(k_m x) \\ -\sin(k_m y)\sin(k_n x) \end{pmatrix}$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}}_{\text{Trace}=0.} \begin{pmatrix} \psi_{n,m}(x,y) \\ \psi_{m,n}(x,y) \end{pmatrix}$$

Άρα
$$\begin{aligned}
g_2 &\rightarrow \text{Trace} = 0\\
g_3 &\rightarrow \quad '' \quad = 0\\
g_4 &\rightarrow \quad '' \quad = -2\\
g_5 &\rightarrow \quad '' \quad = -2\\
g_6 &\rightarrow \quad '' \quad = 2\\
g_7 &\rightarrow \quad '' \quad = 0.\\
g_8 &\rightarrow \quad '' \quad = 0
\end{aligned}$$

Από τον πίνακα χαρακτήρων, προκύπτει ότι η μοναδική αναπαράσταση με αυτά τα χαρακτηριστικά είναι η

$$\Gamma_1^{(2)} \oplus \Gamma_1^{(4)}$$

Άρα η διπλέτα ανήκει στην

$$\Gamma_1^{(2)} \oplus \Gamma_1^{(4)}.$$

Τέλος, με όμοιο τρόπο αν n,m περιττά

$$\left(\text{Διπλέτα} \quad C_{n,m}(L) \begin{pmatrix} \cos(k_n x)\cos(k_m y). \\ \cos(k_m x)\cos(k_n y) \end{pmatrix} \right)$$

μπορούμε να δείξουμε ότι η διπλέτα σε αυτή τη περίπτωση ανήκει στην $\Gamma_1^{(1)} \oplus \Gamma_1^{(3)}$!