„Fizyka materii skondensowanej i struktur półprzewodnikowych” (1101-4FS22)

Tomasz Kazimierczuk

Zakład Fizyki Ciała Stałego
Instytut Fizyki Doświadczalnej
Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski

Grupy punktowe

	e	*a*	*b*	*c*	*d*	*f*
e	*e*	*a*	*b*	*c*	*d*	*f*
a	*a*	*b*	*e*	*d*	*f*	*c*
b	*b*	*e*	*a*	*f*	*c*	*d*
c	*c*	*f*	*d*	*e*	*b*	*a*
d	*d*	*c*	*f*	*a*	*e*	*b*
f	*f*	*d*	*c*	*b*	*a*	*e*

- rząd tej grupy wynosi 6
- grupa jest nieprzemienna
- np.: ***c•a*** = ***d***
  a•c = ***f***

P. Kowalczyk, Fizyka cząsteczek

Klasy elementów sprzężonych

Jeśli $\boldsymbol{x}$ i $\boldsymbol{z}$ są dowolnymi elementami grupy, to przekształcenie podobieństwa $\boldsymbol{y = z^{-1} \bullet x \bullet z}$ prowadzi do elementu $\boldsymbol{y}$ sprzężonego do $\boldsymbol{x}$ za pomocą elementu $\boldsymbol{z}$

Pełny zbiór elementów grupy, które są ze sobą wzajemnie sprzężone (za pomocą dowolnych elementów grupy) ***nazywa się klasą.***

Grupa symetrii cząsteczki amoniaku, C_{3v}

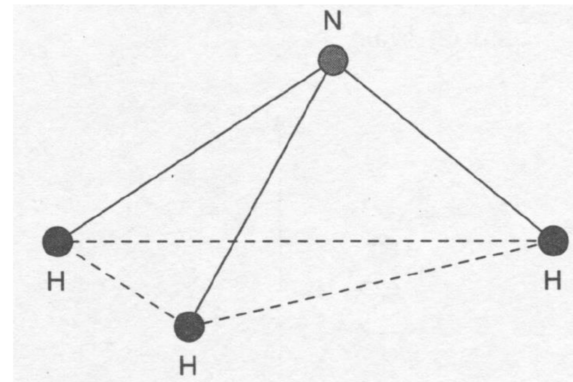
Tabela grupowa grupy C_{3v}

(notacja Schönfliesa)

	E	C_3	C_3^2	σ_1	σ_2	σ_3
E	E	C_3	C_3^2	σ_1	σ_2	σ_3
C_3	C_3	C_3^2	E	σ_2	σ_3	σ_1
C_3^2	C_3^2	E	C_3	σ_3	σ_1	σ_2
σ_1	σ_1	σ_3	σ_2	E	C_3^2	C_3
σ_2	σ_2	σ_1	σ_3	C_3	E	C_3^2
σ_3	σ_3	σ_2	σ_1	C_3^2	C_3	E

P. Kowalczyk, Fizyka cząsteczek

Cząsteczka NH_3



- rząd tej grupy wynosi 6
- grupa jest nieprzemienna
- grupa zawiera 3 klasy:
  - $\{E\}$ – klasa elementu neutralnego
  - $\{C_3, C_3^2\}$ – obroty
  - $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$ – odbicia

Macierze operacji symetrii

Punktowe operacje symetrii są izometriami, a więc każdej z nich można przypisać jakąś macierz ortogonalną M (tzn. taką, że $M^{-1} = M^T$ oraz $\det M = \pm 1$)

W oczywisty sposób macierze te będą spełniały reguły mnożenia grupowego:

jeśli: $\boldsymbol{a} \bullet \boldsymbol{b} = \boldsymbol{c}$

to: $M(\boldsymbol{a}) \cdot M(\boldsymbol{b}) = M(\boldsymbol{c})$

Zbiór takich macierzy, z działaniem mnożenia macierzy także będzie stanowił grupę – jedną z możliwych ***reprezentacji grupy operacji symetrii G***

Macierze operacji symetrii

Na przykład:

$$M(C_{z,\alpha}) = \begin{bmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

– macierz obrotu wokół osi *z* o kąt *α*

$$M(i) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

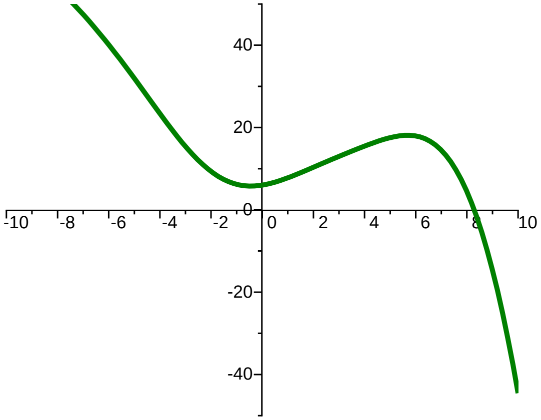
– macierz inwersji

$$M(\sigma_{xz}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

– macierz odbicia w płaszczyźnie *y* = 0

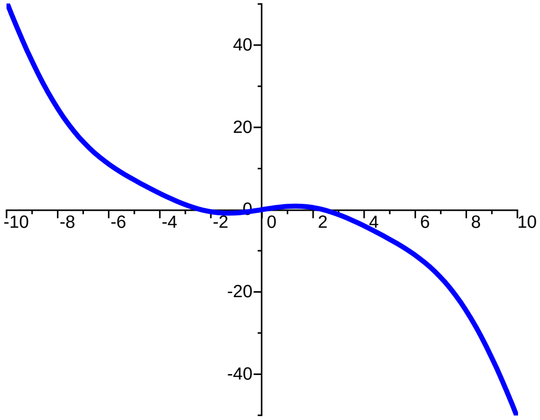
Oś symetrii x=0

f(*x*)



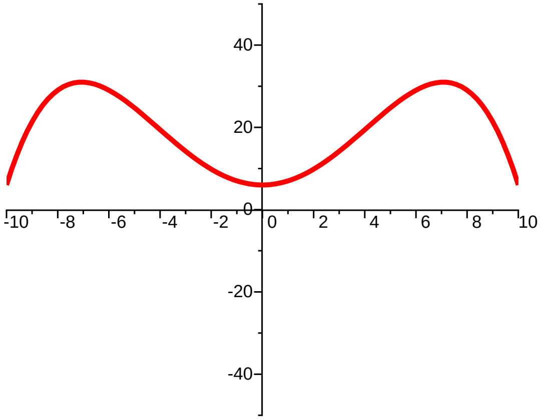
=

Część antysymetryczna



+

Część symetryczna



Oś symetrii x=0

- Rozważmy grupę z symetrią odbicia x→-x
- Grupa ma 2 elementy: E, σ
- Tabela charakterów reprezentacji nieprzywiedlnych:

C_s	E	σ
A'	+1	+1
A''	+1	-1

Symetryczna: $f(-x) = f(x)$

Antysymetryczna: $f(-x) = -f(x)$

Część symetryczna: $(f(x)+f(-x))/2$

Część antysymetryczna: $(f(x)-f(-x))/2$

Oś symetrii x=0

- Ogólnie rzutowanie obiektu (tu: funkcji) na daną reprezentację:

$$f^{\Gamma}(x) = \sum_a \chi^{\Gamma}(a) f(a(x))$$

a – operacje symetrii w grupie
$\chi^{\Gamma}(a)$ – charaktery danej reprezentacji

C_s	E	σ
A'	+1	+1
A''	+1	-1

Symetryczna: $f(-x) = f(x)$
Antysymetryczna: $f(-x) = -f(x)$

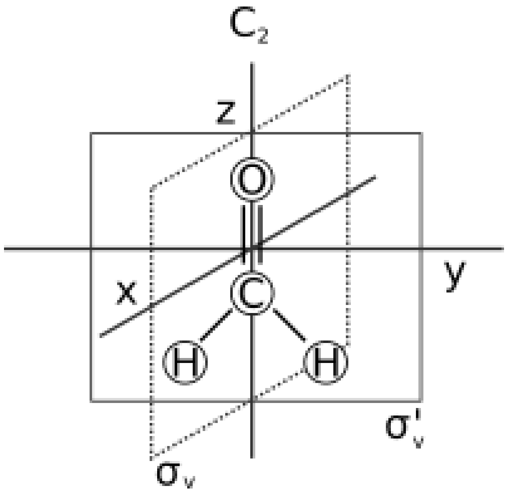
Część symetryczna: $(f(x)+f(-x)) /2$
Część antysymetryczna: $(f(x)-f(-x)) /2$

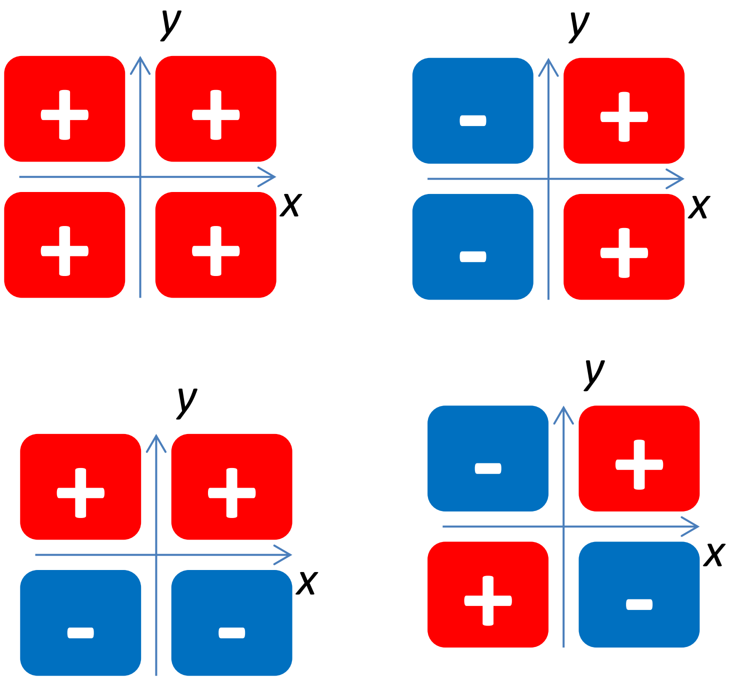
Funkcje zgodne z symetrią

- Grupa z 1 płaszczyzną symetrii (C_s):
  - Funkcje antysymetryczne: $f(x) = x$, (również x^3, sin(x), …)
  - Funkcje symetryczne: x^2

Funkcje zgodne z symetrią

- Grupa z 2 płaszczyznami symetrii (C_{2v})

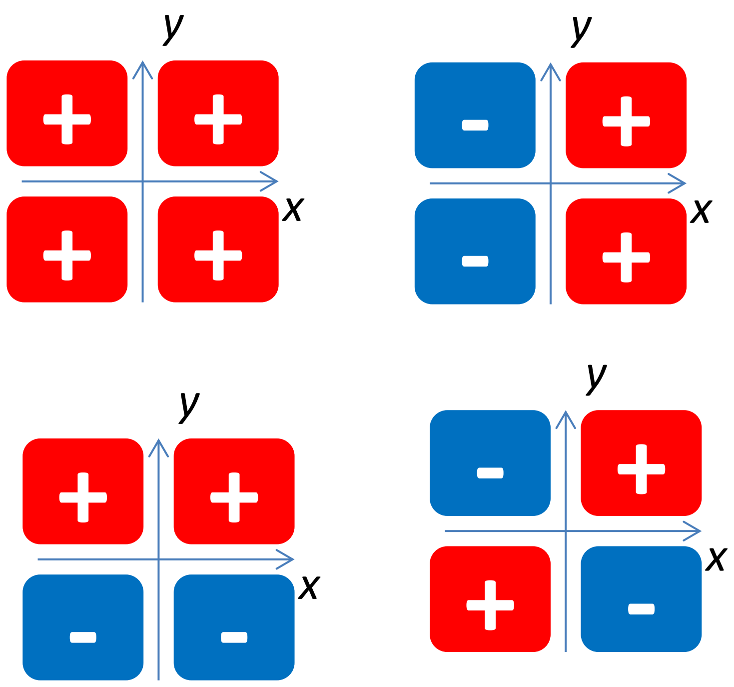




Funkcje zgodne z symetrią

- Grupa z 2 płaszczyznami symetrii (C_{2v})

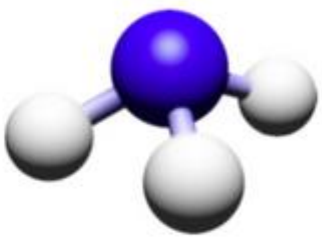
C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ_v		
A_1	+1	+1	+1	+1	z	x^2, y^2, z^2
A_2	+1	+1	-1	-1		xy
B_1	+1	-1	+1	-1	x	xz
B_2	+1	-1	-1	+1	y	yz

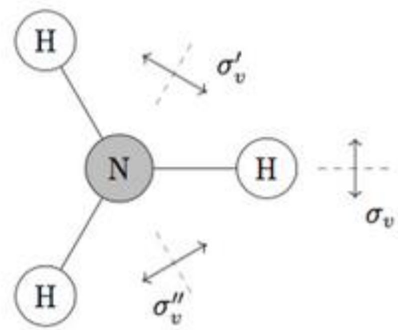


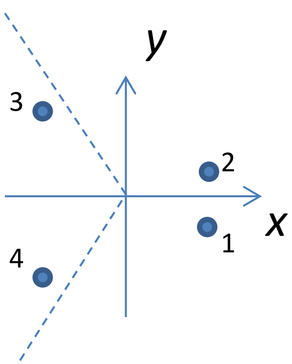
$$f(\vec{r}) = x$$

Funkcje zgodne z symetrią

- Grupa z 3-krotną osią symetrii (C_{3v})







Zakładając, że reprezentacja jest 1-wymiarowa

$$f(C_3(\vec{r})) = \chi(C_3) \cdot f(\vec{r})$$

$\sigma \rightarrow C_3 \rightarrow \sigma \rightarrow C_3$

$$\chi(\sigma) \cdot \chi(C_3) \cdot \chi(\sigma) \cdot \chi(C_3) = 1$$

$$[\chi(C_3)]^2 = 1$$

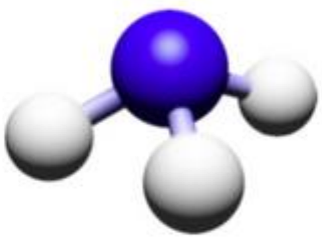
$C_3 \rightarrow C_3 \rightarrow C_3$

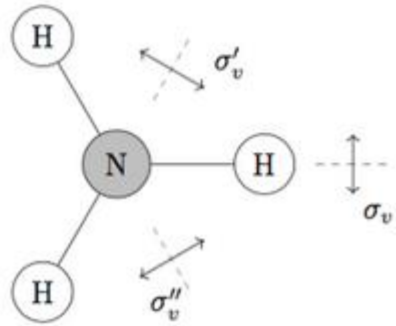
$$\chi(C_3) \cdot \chi(C_3) \cdot \chi(C_3) = 1$$

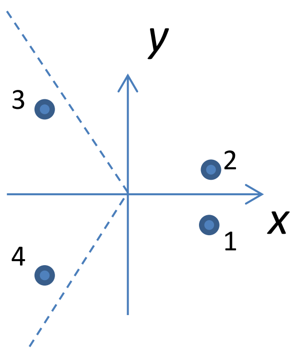
$$[\chi(C_3)]^3 = 1$$

Funkcje zgodne z symetrią

- Grupa z 3-krotną osią symetrii (C_{3v})





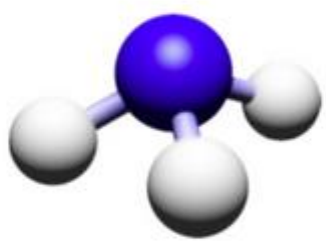


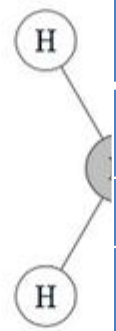
~~Zakładając, że reprezentacja jest 1-wymiarowa~~

$$\left[\begin{array}{c} f(C_3(\vec{r})) \\ g(C_3(\vec{r})) \end{array}\right] = \left[\begin{array}{cc} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} f(\vec{r}) \\ g(\vec{r}) \end{array}\right]$$

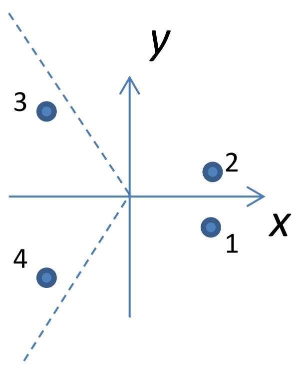
Funkcje zgodne z symetrią

- Grupa z 3-krotną osią symetrii (C_{3v})





C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$		
A_1	+1	+1	+1	z	x^2+y^2, z^2
A_2	+1	+1	-1		
E	+2	-1	0	(x, y)	(x^2-y^2, xy) (xz, yz)



~~Zakładając, że reprezentacja jest 1-wymiarowa~~

Dygresja:

Gdy charaktery są zespolone, często paruje się je w większą reprezentację (przywiedlną)

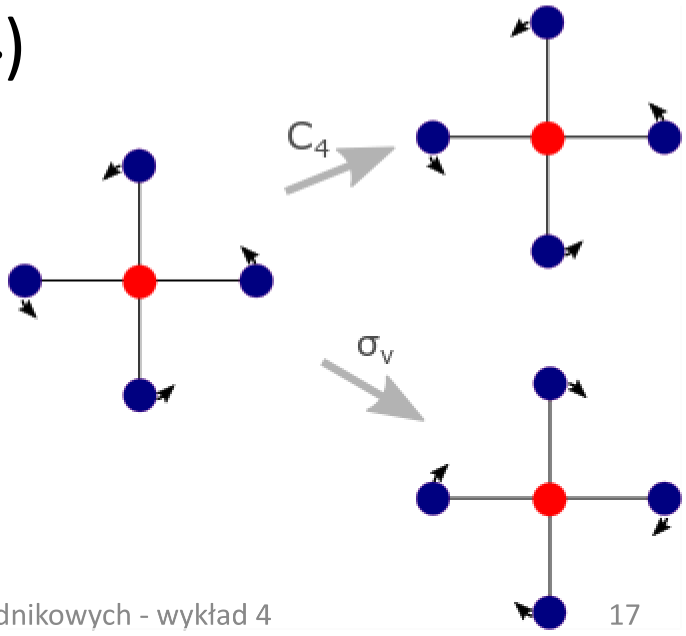
C_3	E	C_3	C_3^2
A	1	1	1
E	$\left\{\begin{matrix} 1 & \epsilon & \epsilon* \\ 1 & \epsilon* & \epsilon \end{matrix}\right\}$		

C_3	E	C_3	C_3^2
A	1	1	1
E	2	-1	1

$$\epsilon = \exp(2\pi i/3) = -\frac{1}{2} + \frac{i\sqrt{3}}{2}$$

Co „transformuje się wg reprezentacji”?

- Pole skalarne (np. $V(\vec{r})$)
- Pole wektorowe (np. $\vec{E}(\vec{r})$)
- Dowolna ich kombinacja (iloczyn, gradient, itp.)
- Operator (np. Hamiltonian *– pełny Hamiltonian odpowiada reprezentacji pełnosymetrycznej, ale np. Hamiltonian zaburzenia niekoniecznie*)
- Deformacja cząsteczki
- Generatory obrotów R_x, R_y, R_z



Charaktery reprezentacji

- Charaktery reprezentacji to ***ślady macierzy reprezentacji***

- Dla wszystkich wzajemnie sprzężonych elementów grupy charaktery są takie same (tzn. dla wszystkich elementów danej klasy)

- Charaktery wszystkich macierzy *I*, *A*, *B*, … danej reprezentacji *G* tworzą ***wektor charakterów reprezentacji***:

$$\vec{\chi}(\Gamma) = \begin{pmatrix} \chi(I) \\ \chi(A) \\ \chi(B) \\ \ldots \end{pmatrix}$$

Charaktery reprezentacji

Własności wektorów charakterów reprezentacji

1. Dla każdej reprezentacji nieprzywiedlnej (i tylko dla nieprzywiedlnej) *G* kwadrat długości wektora charakterów tej reprezentacji jest równy rzędowi grupy, *n*:

$$\left|\vec{\chi}(\Gamma)\right|^2 = n$$

użyteczne kryterium nieprzywiedlności reprezentacji!!!

2. Wektory charakterów dwóch różnych reprezentacji nieprzywiedlnych są ortogonalne

$$\vec{\chi}(\Gamma_1) \cdot \vec{\chi}(\Gamma_2) = 0$$

Charaktery reprezentacji

3. Wśród reprezentacji nieprzywiedlnych zawsze istnieje jednowymiarowa reprezentacja jednostkowa, dla której wektor charakterów złożony jest z samych jedynek (najczęściej nazywana jest ona reprezentacją A_1)

4. Rozkładu reprezentacji przywiedlnej Υ na nieprzywiedlne Γ_i można dokonać poprzez rozkład wektora charakterów reprezentacji przywiedlnej Υ na wektory charakterów reprezentacji nieprzywiedlnych G_i :

$$\vec{\chi}(\Upsilon) = \sum_i \alpha_i \cdot \vec{\chi}(\Gamma_i)$$

α_i określa ile razy w blokowej postaci Υ wystąpi blok macierzy reprezentacji Γ_i

Charaktery reprezentacji

Tabela charakterów reprezentacji nieprzywiedlnych grupy C_{3v}

C_{3v}	E	C_3	C_3^2	σ_1	σ_2	σ_3
A_1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1	-1
E	2	-1	-1	0	0	0

lub krócej:

C_{3v}	E	$2C_3$	3σ	
A_1	1	1	1	z
A_2	1	1	-1	R_z
E	2	-1	0	(x,y), (R_x,R_y)