Groupes et symétries discrets en physique (automne 2007)
Corrigé 2: Symétrie de l'Hamiltonien; rappel de théorie des groupes.

1.
i) Verifier que H est invariant sous toutes rotations-inversions dans l'espace à 3 dimensions

Solution

Puisque le potentiel $V(r)$ dépend seulement de la norme du vecteur position, il est invariant sous une rotation-inversion. Il reste à montrer que le terme cinétique est invariant sous une rotation-inversion générique. Une inversion échange le signe des dérivées premières mais laisse invariées les derivées deuxièmes. Finalement une rotation générique peut être décomposée dans le produit de 3 rotations autour des axes x,y,z. Donc on peut se limiter à considérer l'effet d'une rotation autour de l'axe z sans perdre de généralité. Si on écrit l'operateur laplacien dans les coordonnées cylindriques (r, θ, z),

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

on voit qu'il ne depend pas de la valeur de l'angle θ (mais seulement de la derivée respect à θ) et donc qu'il reste invarié sous une rotation autour de z, dont le seul effet est la variation de θ.

ii) Montrer que la dégénéréscence des niveaux $2p$ de l'atome d'hydrogène est nécessaire.

Solution

Il faut montrer qu'aucune fonction de l'espace de fonctions V_{2p} est invariante sous l'application des transformations du groupe de symétrie de H, mais que, au contraire, pour chaque fonction $\psi_i \in V_{2p}$ on trouve une transformation u telle que

$$P_R\psi_i(\mathbf{r}) \equiv \psi_i(R^{-1}(u)\mathbf{r}) = \sum_{\psi_j \in V_{2p}} c_j\psi_j(\mathbf{r})$$

où au moins un c_j pour $j \neq i$ est non nulle (ici, $R(u)$ est la représentation de la transformation u dans l'espace de coordonnées). En particulier, la rotation d'un angle θ autour de l'axe z est definie dans l'espace des coordonnées par la matrice

$$R_z(\theta) = \begin{pmatrix} cos\theta & -sin\theta & 0 \\ sin\theta & cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

et on a

$$R_z(\theta)\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} xcos\theta - ysin\theta \\ xsin\theta + ycos\theta \\ z \end{pmatrix}.$$

Donc on trouve

$$P_Rz(\pi/2)\psi_1(\mathbf{r}) = \psi_2(\mathbf{r})$$

et

$$P_Rz(\pi/2)\psi_2(\mathbf{r}) = -\psi_1(\mathbf{r}).$$

Analoguement, une rotation d'un angle $\pi/2$ autour de l'axe $x(y)$ transforme la fonction ψ_3 dans la fonction $\psi_{2(1)}$.
iii) Même chose pour les orbitaux 3d.

Solution

On suit la même démarche, en utilisant des rotations d'un angle $2\pi/3$.
iv)

Solution

Evidemment, aucune rotation ne peut transformer une fonction à symétrie sphérique s en une fonction à symétrie non-sphérique, comme une combinaison des fonctions s et p doit être. Les deux orbitaux sont dégénérés parce que le groupe de symétrie de l'atome d'hydrogène contient une transformation de symétrie additionnelle, non spatiale, qui correspond à une constante du mouvement non triviale, le vecteur de Lenz.

2. Considérer un groupe fini d'ordre 6.

i)Ecrire les tables de multiplication possibles pour ce groupe. Vérifier qu'il y a seulement deux tables de multiplication possibles, qui correspondent respectivement à un groupe abélien et a un groupe non-abélien. suffisament

Solution

Appellons G ce groupe fini d'ordre 6. On sait de la théorie que l'ordre des sous-groupes propres de G doit être diviseur de 6. Donc on peut avoir seulement sous-groupes propres d'ordre 2 ou 3. Trois cas sont alors possibles: 1) on a seulement sous-groupes de dimensions 2; 2) G n'a pas sous-groupes propres ni de dimension 2 ni de dimension 3; 3) G a un sous-groupe de dimension 3.

Partons de l'hypothèse que pour chaque $g \epsilon G$, $g^2 = e$ (on a tous sous-groupes de dimension 2). Alors on peut écrire la table incomplète suivante

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

parce que la choix de la deuxième ligne est libre. Maintenant il suffit de calculer $bc = (ac)c = a(cc) = ae = a$ et $ba = b(bc) = (bb)c = ec = c$ pour arriver à une contradiction: on devrait poser $bd = f$ ou $bf = f$ mais ça contredit le théorème de réarrangement parce qu' on a déjà $ad = f$ et $ef = f$. Cela demontre que G ne peut pas avoir seulement sous-groupes de dimension 2.
Maintenant on commence à écrire la table sans introduire sous-groupes non triviales. Cette hypothèse conduit à la table incomplète suivante:

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

En fait, la deuxième ligne est imposée par les considérations:
1) $ab = e \Rightarrow ba = e, b^2 = a$, c'est à dire qu'on aurait un sous-groupe de dimension 3. On doit donc poser $ax = e, x \neq b$, par exemple $ac = e$.
2) $ab = c \Rightarrow ba = c, b^2 = e$, c'est à dire qu'on aurait un sous-groupe de dimension 4, resultat impossible. On doit donc poser $ab = x, x \neq e, c$, par exemple $ab = d$.
3) Pour le théorème de réarrangement on doit poser $af = c$ et donc $ad = f$. Il suffit de calculer $ba = ab = d$ et $b^2 = a^2b = ad = f$, pour avoir univoquement détérminés les autres entrées de la troisième ligne (encore une fois par le théorème de réarrangement).
Maintenant, en utilisant le fait que $b^2 = f$ et $ca = afa = ac = e$, on voit qu'on peut completer la table seulement en introduisant un sous-groupe de dimension 2 (formé par e et d) et un de dimension 3 (formé par e,b et f). Finalement on trouve:

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

On est donc tombé sur le groupe cyclique (on peut calculer que $a^2 = b$,$a^3 = d$,$a^4 = f$,$a^5 = c$ et $a^6 = e$), qui est abélien.
Considérons enfin le cas où il y a un sous-groupe d'ordre 3 et plusieurs sous-groupes d'ordre 2. On peut choisir, par exemple, que $\{e, d, f\}$ forment un sous-groupe, donc:

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

où on a fait une des deux choix possibles pour les autres entrées des deux dernières lignes (cette choix est libre).
On peut verifier que si on pose $ad = da$,$bd = db$,$cd = dc$ on retrouve le groupe cyclique. On fait donc l'autre choix possible.
On a evidemment $a^2 = adc = c^2 = cdb = b^2 = x$. Or, $ab = e$ donnerait $b = a^{-1} \Rightarrow ba = e$ et $x \neq e$ et ça contredit le théorème de réarrangement. On arrive à la même contradiction si $ac = e$. Donc on doit avoir $x = e$.
Finalement la seule choix consistente est $ca = f$,$ba = d$ et la table résultante est donnée par:

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

ii) Montrer que le groupe non-abélien ainsi trouvé est isomorphe au groupe des permutations de trois éléments.

Solution

Pour un ensemble de 3 trois éléments, on a six permutations possibles: $\Pi_e(x_1, x_2, x_3) = (x_1, x_2, x_3)$,$\Pi_1(x_1, x_2, x_3) = (x_2, x_1, x_3)$, $\Pi_2(x_1, x_2, x_3) = (x_3, x_2, x_1)$,$\Pi_3(x_1, x_2, x_3) = (x_1, x_3, x_2)$, $\Pi_4(x_1, x_2, x_3) = (x_2, x_3, x_1)$,$\Pi_5(x_1, x_2, x_3) = (x_3, x_1, x_2)$.
On peut définir la composition de deux permutations comme $(\Pi_i \bullet \Pi_j)(x_1, x_2, x_3) = \Pi_i(\Pi_j(x_1, x_2, x_3))$. C'est immediat de verifier que les propriétés d'un groupe sont satisfaites et que la composition suit la table correspondant au groupe non-cyclique d'ordre 6, trouvée au point i), si on pose $\Pi_1 = a$,$\Pi_2 = b$,$\Pi_3 = c$,$\Pi_4 = d$,$\Pi_5 = f$. On peut éviter le calcul explicit, en verifiant que ce groupe a un sous-groupe d'ordre 3, constitué par $\{\Pi_e, \Pi_4, \Pi_5\}$ (en fait, $\Pi_4(\Pi_5(x_1, x_2, x_3)) = (x_1, x_2, x_3)$).

iii) Montrer qu'il est également isomorphe au groupe C_{3v} des symétries de la molécule d'ammoniac vu dans la série précédente.

Solution

Pour semplifier le problème il faut de se rappeler que l'action des rotations du groupe C_{3v} est dans le plan xy. On peut donc se réduire à considérer les matrices 2×2 qui agissent dans le plan et verifier leur table de multiplication. Les matrices des trois réflexions σ_1,σ_2,σ_3 et des rotations S et S^{-1} sont réspectivement

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

$$D = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \; F = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Comme pour le point ii), on peut verifier que D et F forment un sous-groupe d'ordre 3 avec l'identité.

iv) Trouver les classes de conjugaison de C_{3v}. Elles seront indiquées par $C_1 = E$,C_2,... Etablir la décomposition de chaque possible produit de deux classes:

$$C_i \cdot C_j = \sum_k n_{ijk} C_k$$

Solution

Pour trouver la classe de a il faut trouver les éléments y qui satisfont $x^{-1}ax = y$ pour quelque x appartenant au groupe. En utilisant la table de multiplication,on trouve $b^{-1}ab = c$,$c^{-1}ac = b$ et $a^{-1}da = f$. Ça suffit à établir les trois classes qui composent le groupe: $C_1 = \{e\}$,$C_2 = \{a, b, c\}$,$C_3 = \{d, f\}$. Evidemment, $C_1C_i = C_i$.
$C_2C_3 = \{ad, af, bd, bf, cd, cf\} = \{c, b, a, c, b, a\} = 2C_2$.
$C_2C_2 = \{a^2, ab, ac, b^2, ba, bc, c^2, ca, cb\} = 3C_1 + 3C_3$.
$C_3C_3 = \{d^2, df, f^2, fd\} = 2C_1 + C_3$.
Donc on a établi $n_{23\lambda} = 2\delta_{2,\lambda}$, $n_{22\lambda} = 3(\delta_{1,\lambda} + \delta_{3,\lambda})$, $n_{33\lambda} = 2\delta_{1,\lambda} + \delta_{3,\lambda}$.