1. Considérer l'Hamiltonien $1D$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

où $V(x)$ est un potentiel périodique de période a, c'est à dire

$$V(x+a) = V(x).$$

Supposer que le système soit confiné dans une région de largeur $L = ah$, h étant un nombre entier positif.

(i) Trouver le groupe de symétrie G de l'Hamiltonien $\hat{H}$ et écrire toutes les représentations irréductibles de ce groupe.

Solution

Dans le cas général les seules transformations de symétrie de l'Hamiltonien H sont les translations $T_a^{(n)} = (T_a)^n$ qui translatent la coordonnée x de $-na$ où n est un multiple entier. L'operateur $P_{T_a^{(n)}}$ qui correspond à la translation $T_a^{(n)}$ et qui agit sur les fonctions d'onde $\psi(x)$ est defini par

$$P_{T_a^{(n)}}\psi(x) = \psi(x+na).$$

Pour déterminer le groupe G de ces translations, il suffit de voir que, donnée la taille finie $L = ha$, les translations non-équivalentes sont h et que chaque translations est égale à une puissance de la translation de a, T_a, c'est à dire

$$G = \{T_a, T_a^2, T_a^3, ...T_a^{h-1}, T_a^h = e\}.$$

Donc le groupe G est le groupe cyclique d'ordre h.

Pour determiner les représentations irréductibles de G il faut trouver des groupes de matrices satisfaisant la lois de composition du groupe cyclique G. Pour un groupe cyclique la recherche est très simple. En fait, il est immédiat de trouver h représentations irréductibles non-équivalentes de G de dimension 1, en considérant que la racine h-ième de l'unité et ces puissances satisfaient la lois de composition du groupe cyclique G. En particulier, on considère la représentation $\Gamma^{(n)}$, et on considère un vecteur $v \in V^{(n)}$ dans le sous-espace $V^{(n)}$ relatif à cette représentation. Alors l'élément fondamentale du groupe T_a est représenté par un operateur dont l'action sur v est

$$\Gamma^{(n)}(T_a)v = e^{i2\pi n/h}v, n = 1, ..., h$$

(la représentation $\Gamma^{(h)}$ est la représentation identique). Finalement on peut utiliser le théorème de Burnside pour affirmer qu'il y a pas d'autres représentations irréductibles non-équivalentes.

(ii) Déterminer la lois de transformation des fonctions propres de $\hat{H}$ sous les transformations du groupe de symétrie G.

Solution

On peut séparer l'espace des fonctions propres de H en h sous-espaces $H^{(n)}$, $n = 1, ..., h$ de dimension 1, relatifs aux h représentations $\Gamma^{(n)}$. La fonction propre $\psi_n(x) \in H^{(n)}$ se transforme selon la lois de transformations de la représentation $\Gamma^{(n)}$, c'est à dire:

$$P_{T_a}\psi_n(x) = \Gamma^{(n)}(T_a)\psi_n(x) = e^{i2\pi n/h}\psi_n(x) = e^{ik_n a}\psi_n(x),$$

où $k_n = (2\pi/L)n$. Vue cette correspondance, il est plus intuitif d'utiliser le vecteur d'onde k comme indice des sous-espaces au lieu de n.

(iii) Montrer que les fonctions propres de $\hat{H}$ sont de la forme

$$\psi_k(x) = u_k(x)e^{ikx} \quad (k = 2\pi n/L, n = 1, 2, ..., h).$$

où les fonctions $u_k(x)$ sont périodiques de période a. Ce résultat est, en une dimension, le théorème de Bloch pour les états électroniques dans un crystal.

Solution

On écrit la fonction $\psi_k(x)$ dans la forme

$$\psi_k(x) = u_k(x)e^{ikx} \quad (k = 2\pi n/L, n = 1, 2, ..., h)$$

et on utilise la lois de transformation de ψ_k. On trouve

$$u_k(x)e^{ik(x+a)} = e^{ika}\psi_k(x) = \psi_k(x + a) = u_k(x + a)e^{ik(x+a)},$$

donc les fonctions u_k sont periodiques: $u_k(x + a) = u_k(x)$.

2. Considérer le groupe de rotations C_{3v}.

(i) Considérer l'éspace vectoriel $\mathbb{R}^2$ avec vecteurs (x, y). Dériver la représentation $R(u)$ $(u \in C_{3v})$ dans cet éspace.

Solution

Une fois choisie une base de l'espace vectoriel, nous pouvons en écrire les images sous l'action des rotations du groupe C_{3v}. En choisissant comme base les vecteurs

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, v_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

la matrice qui représente le miroir σ_1 est donnée par ,

$$R(\sigma_1) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{1}$$

parce qu'on a: $R(\sigma_1)v_1 = -v_1$ et $R(\sigma_1)v_2 = v_2$. De la même façon on trouve pour la rotation S: $R(S)v_1 = -\frac{1}{2}v_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}v_2$ et $R(S)v_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2}v_1 - \frac{1}{2}v_2$, c'est à dire

$$R(S) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Nous devons vérifier que les possibles produits entre ces matrices suivent la table de multiplication de C_{3v} (et donc que nous avons trouvé une représentation de C_{3v}). Par exemple, on voit facilement que $R(S)R(\sigma_1) = R(\sigma_1)R(S)^2$. Les deux éléments S et σ_1 sont des générateurs du groupe C_{3v}, donc tous les autres éléments sont obtenus à partir de produits du type $S^\alpha \sigma_1^\beta$, avec α et β entiers positifs. En utilisant la table de multiplication, on peut alors construire les autres matrices de la représentation à partir de $R(S)$ et $R(\sigma)$.

(ii) Montrer que c'est une représentation unitaire irréductible.

Solution

C'est immediat de vérifier l'unitarité, parce qu'on a évidemment $R(\sigma_1)^T = R(\sigma_1)^{-1}$, $R(S)^T = R(S)^{-1}$ etc..., et les matrices sont réelles.
On peut démontrer que la représentation est irréductible en utilisant le lemme de Schur. Considérons une matrice arbitraire M qui commute avec toutes les matrices de la représentation. Cela impose sur les éléments de la matrice les conditions suivantes.

$$R(\sigma_1)M = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a & -b \\ c & d \end{pmatrix}, \tag{3}$$

$$MR(\sigma_1) = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a & b \\ -c & d \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Pour satisfaire $MR(\sigma_1) = R(\sigma_1)M$, il faut que $b = c = 0$. D'autre part

$$R(S)M = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -a & -\sqrt{3}d \\ \sqrt{3}a & -d \end{pmatrix}, \tag{5}$$

$$MR(S) = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -a & -\sqrt{3}a \\ \sqrt{3}d & -d \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Donc $a = d$ et M est forcement une matrice multiple de l'identité.

Pour cet exercice nous avons utilisé le corollaire du lemme de Schur enoncé au cours. Ce corollaire dit que si les seules matrices M, qui commutent avec toutes les matrices d'une représentation, sont des multiples de l'identité, alors la représentation est irréductible.

(iii) Considérer l'éspace vectoriel $\mathcal{H}$ de fonctions, généré par les fonctions

$$\Psi_1(\mathbf{r}) = x^2 e^{-r},$$

$$\Psi_2(\mathbf{r}) = y^2 e^{-r},$$

$$\Psi_3(\mathbf{r}) = 2xy e^{-r},$$

où $r = |\mathbf{r}| = \sqrt{x^2 + y^2}$. Le produit scalaire dans cet espace est défini comme

$$\langle \Psi_\alpha | \Psi_\beta \rangle = \int d\mathbf{r} \Psi^*_\alpha(\mathbf{r}) \Psi_\beta(\mathbf{r}).$$

Ecrire la représentation du groupe C_{3v}, $\Gamma(u)$, définie sur cet espace de fonctions, en utilisant le fait que l'operateur de transformation P_u, relatif à l'element $u \in G$ et qui agit sur la fonction Ψ_ν de l'espace $\mathcal{H}$, est defini par

$$P_u \Psi_\nu(\mathbf{r}) = \sum_\mu \Psi_\mu \Gamma_{\mu\nu}(u) \equiv \Psi_\nu(R^{-1}(u)\mathbf{r}), \forall u \in C_{3v}, \Psi \in \mathcal{H},$$

où $R(u)$ sont les matrices dérivées au point (i). En mécanique quantique, par exemple, une telle transformation d'un ensemble de fonctions correspond à une rotation du repère cartésien. Montrer que c'est une représentation du groupe, et qu'elle n'est pas unitaire.

Solution

Le facteur e^{-r} est invariant et peut être négligé. En considérant que, par exemple $R^{-1}(\sigma_1)(x, y) = (-x, y)$, on trouve que les fonctions de la base se transforment comme suit:

$$P_{\sigma_1} \Psi_i = \Psi_i, \quad i = 1, 2$$

$$P_{\sigma_1} \Psi_3 = -\Psi_3.$$

Donc dans cette représentation

$$\Gamma(\sigma_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

De la même façon, on voit que

$$\mathbf{r}' = R^{-1}(S)\mathbf{r} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}x + \frac{\sqrt{3}}{2}y \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y \end{pmatrix}$$

d'où on calcule

$$P_S\Psi_1 = \frac{1}{4}(\Psi_1 + 3\Psi_2 - \sqrt{3}\Psi_3)$$

(d'ici on a les éléments de la première colonne de $\Gamma(S)$),

$$P_S\Psi_2 = \frac{1}{4}(3\Psi_1 + \Psi_2 + \sqrt{3}\Psi_3)$$

$$P_S\Psi_3 = \frac{1}{4}(2\sqrt{3}\Psi_1 - 2\sqrt{3}\Psi_2 - 2\Psi_3),$$

et donc on trouve

$$\Gamma(S) = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 3 & 2\sqrt{3} \\ 3 & 1 & -2\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & \sqrt{3} & -2 \end{pmatrix}.$$

Encore une fois, nous devons vérifier que la table de multiplication est satisfaite. On peut vérifier par exemple $\Gamma(S)\Gamma(\sigma_1) = \Gamma(\sigma_1)\Gamma(S)^2$.
La représentation n'est pas unitaire parce que les fonctions Ψ_1 et Ψ_2 ne sont pas ortogonales, comme l'on peut vérifier en utilisant la définition du produit scalaire.

(iv) Montrer qu'elle est réductible et trouver la transformation qui la réduit.

Solution

En écrivant $\Psi_1 = r^2\cos^2\theta$ et $\Psi_2 = r^2\sin^2\theta$, on voit que le vecteur $\Psi_I = \Psi_1+\Psi_2$ de l'espace $\mathcal{H}$ est invariant. Pour réduire la représentation il faut donc choisir une base de vecteurs orthogonaux qui contienne Ψ_I. Par exemple, la transformation qui emmène une base dans l'autre est

$$\phi_i = \sum_j \Psi_j T_{ji}$$

avec

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Nous obtenons ainsi la nouvelle base $(\phi_\alpha, \phi_\beta, \phi_\gamma) = (\Psi_1 + \Psi_2, \Psi_3, \Psi_1 - \Psi_2)$. Dans cette nouvelle base, il est facile d'exprimer les matrices de la représentation:

$$\Gamma'(\sigma_1) = T^{-1}\Gamma(\sigma_1)T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Gamma'(S) = T^{-1}\Gamma(S)T = \left(\begin{array}{c|cc} 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{array}\right).$$

(v) La représentation $R(u)$ est-elle équivalente à une des représentations irréductibles du point (iv) ?

Solution

La représentation de dimension 2 que nous avons obtenue au point (iv) est equivalente à la représentation $R(u)$. En effet on voit que, dans les matrices $\Gamma'(S)$ et $\Gamma'(\sigma_1)$, les blocs qui correspondent aux vecteurs de base Ψ_β et Ψ_γ coïncident avec les matrices $R(S)$ et $R(\sigma_1)$.