Groupes et symétries discrets en physique (automne 2007)
Série 3: Représentations irréductibles.

---

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.

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

(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.

2. Considérer le groupe C_{3v} des rotations de symétrie de la molécule d'ammoniac.

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

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

(iii) Considérer l'espace vectoriel de fonctions H, 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 $r = |\mathbf{r}| = \sqrt{x^2 + y^2}$, muni du produit scalaire

$$\langle \Psi_\alpha | \Psi_\beta \rangle = \int d^2\mathbf{r} \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}) \Psi_\beta(\mathbf{r}).$$

Ecrire, sous forme de matrices, la représentation du groupe C_{3v} définie comme suit

$$P_{R(u)} \Psi(\mathbf{r}) \equiv \Psi(R^{-1}(u)\mathbf{r}), \forall u \in H,$$

où $R(u)$ sont les matrices dérivées dans le point (i) (en mécanique quantique, par exemple, la fonction d'onde d'une particule obéit à cette loi de transformation suite à une rotation du référentiel). Montrer que c'est une représentation du groupe, et qu'elle n'est pas unitaire.

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

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