

Symmetrie in de Kwantummechanica

 tuyaux.winak.be/index.php/Symmetrie_in_de_Kwantummechanica

Symmetrie in de Kwantummechanica

Richting	<u>Fysica</u>
----------	---------------

Jaar	<u>MFYS</u>
------	-------------

Bespreking

Dit vak wordt sinds enkele jaren gegeven door professor Bart Partoens. Het examen staat op 20 en geeft ook het finale punt voor dit vak, het examen is volledig openboek en je mag alles meenemen: cursus, de besproken boeken in de cursus en zelfs opgeloste oefeningen. Het examen is (normaal gezien) representatief t.o.v. de oefeningen in de les en de theorie die aangehaald is.

Puntenverdeling

Openboekexamen: 20/20

Examenvragen

Academiejaar 2022-2023 1^{ste} zit

Examen

1. Toon aan dat als een klasse de inverse van elk van zijn elementen bevat, dan is het karakter horende bij deze klasse reëel.
2. We hebben volgend lemma bewezen: *Elke representatie met niet-singuliere matrices kan unitair gemaakt worden (d.w.z. elk van de representatiematrices is unitair) door een tweestaps gelijkvormigheids-transformatie.* In uitdrukking (2.10) wordt de matrix $\mathbf{d}^{-1/2}$ gebruikt. Wat wil dat zeggen, die matrix tot de macht $-1/2$ verheffen? Hoe bereken je die matrix concreet?
3. Voldoet volgende representatie van de groep met drie elementen $\{e, a, b\}$
 $e=(1001), a=12(-1-3-\sqrt{3}-\sqrt{-1}), a=12(-13-\sqrt{-3}-\sqrt{-1})$
 $e=(1001), a=12(-13-3-1), a=12(-1-33-1)$

aan het groot orthogonaliteitstheorema? Verklaar je antwoord.

4. Beschouw de molecule BrF_5 met pyramidale structuur
 - Bepaal de symmetriegroep.
 - Bepaal de irreducibele representaties van de normaaltrillingen van deze molecule. (Een schets van de normaaltrillingen zelf wordt niet gevraagd.)
 - Infrarood (IR) spectra zijn het resultaat van de absorptie van licht door een molecule. De overeenkomstige interactie-Hamiltoniaan wordt gegeven door de dipooloperator. Als we ervan uitgaan dat bij kamertemperatuur de meeste moleculen zich in de vibrationele grondtoestand bevinden, die volledig symmetrisch is, welke van de gevonden modes kunnen dan aangeslagen worden onder infrarood licht?
5. Bepaal de evolutie van de opsplitsing van een ^3P term in functie van toenemende sterkte van een Kristalveld (H_C) met D_3 symmetrie, rekening houdend met de spin-baankoppeling (H_{SO}). (Beschouw dus zowel het geval $H_C \gg H_{SO}$ als $H_{SO} \gg H_C$, zoals in figuur 3.5 voor term ^4F onder invloed van een kubisch kristalveld en de spin-baankoppeling.) Geef ook de ontaarding van elk energieniveau.
6. Beschouw de representatie $\Gamma_8\Gamma_8$ van de kristal-dubbelgroep O' (zie karaktertabel 3.19). Schets een manier hoe je expliciete 4×4 representatie-matrices zou kunnen genereren voor deze representatie.
7. Schets de 'weight' diagrammen van alle 9-dimensionale representaties van $SO(4)$. Geef duidelijk aan welke grootte je op je assen plaatst. Welke van deze diagrammen zijn relevant (worden gegenereerd door een multiplet van het waterstofatoom?) Verklaar je antwoord.
8.
 - Gebruik makende van de definities in hoofdstuk 5, toon aan dat de set van operatoren $\{U^+, U^-, U^3\}$ met $2U^3 = 23Y^+ - T^3$ een subalgebra van $\text{su}(2)\text{su}(2)$ opspannen.
 - Beschouw een algemene representatie $D^{(\rho, 0)}$ van $SU(3)$. Toon aan dat de toestand met de kleinste waarde van Y gegeven wordt door $|T=0; Y=-2/3\rangle$.

Academiejaar 2017-2018 1^{ste} zit

- Invariante subgroep, cosets, factorgroep, complexe vermenigvuldiging.
- Wat is een representatie, een equivalente, unitaire en reducibele representatie?

Reductie van reducibele representaties + formule.

- Regel van Burnside.
- Regels opstellen voor karaktertabel (+ bijvraag GOT).
- Wat is de groep van de Schrödingervergelijking? Leg uit: hoe zijn representaties en eigentoestanden van de Hamiltoniaan gelinkt? Geschikte kwantumgetallen?
- Leid de representatie voor een algemene transformatie rond een specifieke as af.
- Leid de karaktertabel van $SO(3)$ af.
- Symmorphic symmetry...?
- Bespreek de termsplitting in het "intermediair veld" geval van het kristalveld.

Hamiltoniaan. Hoe pas je dit toe voor atomaire termen?

- Hetzelfde maar voor het “zwak veld” geval, dubbelgroepen en JJ.
- Wat zijn compatibiliteitsrelaties? Leg uit hoe ze aan de energieniveaus, de bandenstructuur en de dispersierelatie relateren.
- Wat zijn de representaties van halftallige JJ? Hoe bekom je de karakters? Wat is een dubbelgroep?
- Wat is de groep van de kk-vectoren wat zijn de effecten op de elektronorbitalen? Wat is het verschil tussen de groep van de kk en de kk ster?
- Behoud van totale isospin.
- Verband $SU(3)SU(3)$ en gegeven multiplet (die van pionen).
- Representaties van $SU(3)SU(3)$, formules van karakters geven. Wat is er verschillend voor halftallige JJ-waarden?
- Welke multipletten zijn ontstaan bij isospin symmetrie, welke kwantumgetallen horen hier bij?
- GOT formula given: explain + derive burnside theorem.
- Explain what effect a weak crystal field has on an atomic term + background about double group.
- Explain isospin multiplets in atomic nuclei.

Academiejaar 2015-2016 1^{ste} zit

Praktijk

1.
 - Bepaal de karaktertabel van de groep D_{3d} op basis van het feit dat deze groep een direct product is van D_3 en i (ii bevat enkel de identiteit en de inversie).
 - Uitgaande van een gekende unitaire irreduciebele representaties van D_3 , hoe kan je nu de representatiematrices voor D_{3d} vinden? Geef hiervan twee expliciete voorbeelden.
2. Een hypothetische molecule bestaat uit vier identieke atomen op de hoeken van een vierkant. Beschouw enkel verplaatsingen van de atomen in het vlak van dit vierkant.
 - Reduceer de representatie bekomen uit de verplaatsingscoördinaten gebruikt als basisfuncties. Identificeer translaties, rotaties, of vibraties van de molecule.
 - Bepaal de orthogonale trillingswijzen, en geef ze schematisch weer. (Eventueel de projectie- en/of generator-operatoren gebruiken, al is een andere aanpak mogelijk.)
3. Beschouw een atoom met een $4P$ -toestand in een kristalveld met octahedrische symmetrie (groep O_h) dat zwak is t.o.v. de spin-baankoppeling. Van welke atomaire niveaus vertrek je en hoe splitsen die op in dit octahedrisch kristalveld? (Tip: je maakt ook gebruik van de dubbelgroep.)

4. Geef de isospin van de volgende kernen in de grondtoestand en eventueel laagste aangeslagen toestanden, en de ontaardingen die volgen uit SU_2 -symmetrie (m.a.w. indien enkel sterke wisselwerkingen optreden), in de reeksen:
- ^{24}Na , ^{24}Mg , ^{24}Al , waarvoor $Z=11$, 12 en 13, respectievelijk.
 - ^{43}Ca , ^{43}Sc , ^{43}Ti , waarvoor $Z=20$, 21 en 22, respectievelijk.

Academiejaar 2014-2015 2^{de} zit

Praktijk

1. Bepaal de symmetriegroep (enkel alle gewone rotaties) van een regelmatige vijfhoek. Geef de klassen en de subgroepen. Bepaal de coëfficiënten die optreden in de klassenvermenigvuldiging.
2. Beschouw een atoom met een 4S - en een 2D -toestand in een kristalveld van intermediaire sterkte en met octahedrische symmetrie (groep O).
 - Hoe splitsen de orbitale termen op in dit octahedrisch kristalveld?
 - Hoe splitsen de energieniveaus verder indien men de koppeling van spin aan de baanbeweging in rekening brengen? (Tip: gebruik maken van de dubbelgroep.)
3. Beschouw een simpel kubisch kristalrooster met puntsymmetrie O_h . (Zie bijzondere lijnen en punten in de 1^{ste} BZ in figuur). Duidt de symmetrielementen aan voor de punten Λ . Stel de compatibiliteitsrelaties op tussen de 'kleine representaties' uitgaande van het hoekpunt R naar punten Λ .
4. Bespreek de $D^{(11)}$ representatie van de SU_3 groep (hieronder schematisch afgebeeld): De kwantumgetallen van de basistoestanden, de verschillende types multipletten, en behouden grootheden binnen die multipletten.

Academiejaar 2014-2015 1^{ste} zit

Praktijk

Test 1

1.
 1. Bepaal de karaktertabel van de groep D_{3d} op basis van het feit dat deze groep een direct product is van D_3 en i (i bevat enkel de identiteit en de inversie). [De karaktertabel van D_3 is gegeven.]
 2. Uitgaande van een gekende unitaire irreduciebele representaties van D_3 , hoe kan je nu de representatiematrices voor D_{3d} vinden? Geef ook 2 expliciete voorbeelden van 2×2 matrices.

2. Beschouw op elk van zes atomen, geplaatst op hoeken van een regelmatige zeshoek in een vlak, telkens een p-orbitaal dat loodrecht op dit vlak staat (p_z orbitaal, neem de z-as loodrecht op het vlak van de zeshoek). Beschouw de transformaties van deze p_z functies onder de operaties van de puntgroep D_6 (groep van de symmetrie-rotaties van de zeshoek). [De karaktertabel van D_6 is gegeven.]
 1. Bepaal het karakter van de representatie die men bekomt met deze functies als basisfuncties.
 2. Is deze representatie irreduciebel, en indien niet, welke irreduciebele representaties zijn erin vervat?
 3. Gebruik de zwakke projectieoperatoren om symmetrie-aangepaste functie te vinden die horen bij de gevonden irreduciebele representaties.

Test 2

1. Behandel de opsplitsing van een 2F -energieniveau van een atoom onder invloed van een kristalveld met octahedrische symmetrie (groep O).
 1. Hoe splitst de orbitale term op in het geval van 'intermediaire' (tussen Coulomb repulsie en spin-baankoppeling) veldsterkte?
 2. Hoe splitsen de energieniveaus verder indien men de zwakke spin-baankoppeling in rekening brengt?
 3. Beschouw de opsplitsingen in een 'zwak' (t.o.v. de spin-baankoppeling) kristalveld en de relatie met de energieniveau's in het intermediaire-veldgeval.
2. Bepaal voor een systeem met D_{3h} symmetrie de mogelijke magnetische dipoolovergangen vertrekkend vanuit een elektronische toestand die bij de A''_2 irreduciebele representatie van deze groep behoort. (Tip: beschouw de verschillende componenten van het magnetische dipoolmoment.) [De karaktertabel van D_{3h} is gegeven.]

Test 3

1. Beschouw een kubisch kristalrooster met puntsymmetrie O_h . In de figuur (zie slides) staan de bijzondere punten in de eerste Brillouinzone aangeduid. Stel de Compatibiliteitsrelaties op tussen de 'kleine representaties' die optreden wanneer men van hoekpunt R naar punten T op de ribbe van de kubus gaat.
2. Nemen we een kern met drie nucleonen met enkel de sterke wisselwerkingen (in SU_2): Welk isospin multipletten bekomt men hiervoor, en welk is dan de isospin van de toestanden met laagste energie? Met welke atomen komen deze laagste toestanden van het 3-nucleon systeem overeen?
3. Bespreek de $D^{(11)}$ representatie van de SU_3 groep [schematisch weergegeven als bijlage]: De kwantumgetallen van de basistoestanden, de verschillende types multipletten, en behouden grootheden binnen die multipletten.

Academiejaar 2010-2011 1^{ste} zit

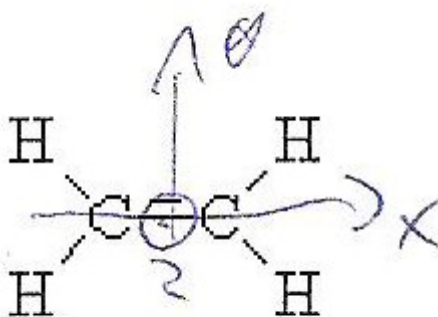
Theorie

1. Vertel wat je weet over zwakke en sterke projectieoperatoren

2. Isospinvraag : Hoe kom je aan het schema van $D(3,0)$ en welke operator werkt erop in
3. Hoe bereken je de niveauopsplitsing voor het intermediaire veldgeval

Praktijk

1. Bepaal de karakters van de representaties gevormd door de volgende directe producten, en de geef de reductie naar irreduciebele representaties:
 1. in de hexagonale groep
 $D_{6h}: A_{2g} \times B_{1g}$ en $E_{1g} \times E_{2u}$
 $D_{6h}: A_{2g} \times B_{1g}$ en $E_{1g} \times E_{2u}$
 2. in de kubische dubbelgroep
 $O': \Gamma_2 \times \Gamma_4, \Gamma_3 \times \Gamma_7$ en $\Gamma_6 \times \Gamma_8$
 $O': \Gamma_2 \times \Gamma_4, \Gamma_3 \times \Gamma_7$ en $\Gamma_6 \times \Gamma_8$
2. Bepaal (uitgaande van de symmetriegroep en zijn representaties) een set symmetrie aangepaste coördinaten voor de bewegingen van enerzijds de twee koolstofatomen en anderzijds de vier waterstofatomen in de etheenmolecule C_2H_4 . (zie afbeelding: de zes atomen liggen in hetzelfde vlak, en de waterstofatomen zijn symmetrisch geschikt t.o.v. de dubbele koolstofbinding)
 - Uit welke van deze symmetrische coördinaten kunnen de translaties en rotaties van de molecule worden samengesteld?)
 -



3. Beschouw de representatie $D^{(21)}$ van de groep van SU_3 van de unimodulaire 3×3 matrices, en bespreek het hierbij gegeven (ommezijde) schema van de basistoestanden in het (M_T, Y) vlak: de multipliciteit voor elk punt en enkele voorbeelden van de aanwezige multipletten (isospin, etc...) met hun kwantumgetallen.

Groep 2 namiddag

1.
 1. Bepaal de karaktertabel van de groep D_{3d} op basis van het feit dat deze groep een direct product is van de groepen D_3 en S_2 (S_2 bevat enkel de identiteit E en de inversie i).
 2. Bepaal unitaire matrices voor alle irreduciebele representaties van D_3 (je kan o.m. uitgaan van de transformatie-eigenschappen van de coördinaten in het vlak).
Hoe kan je nu de representatiematrices voor D_{3d} vinden (enkele voorbeelden?)
2. Beschouw een atoom met een $4s-4s$ - en een $2d-2d$ - toestand, en de opsplitsingen ervan in een kristalveld van intermediaire sterkte:
 1. Hoe splitsen deze termen op in een octahedrisch kristalveld (groep O)?
 2. Welk is de verdere opsplitsing in C_3-C_3 - symmetrie (de drietallige as is een van de drietallige assen in O)?
 3. Terug naar het geval van octahedrische symmetrie: hoe splitsen de energieniveaus verder indien we de spin-baankoppeling als storing in rekening brengen?
3. Stel voor de $D(12)D(12)$ representatie van de groep van SU_3 van de unimodulaire 3×3 matrices het schame op met de punten in het (M, Y) vlak die met de basisfuncties van de representatie overeenstemmen. Bespreek de ontaarding in die punten en de dimensie van de representatie. Geef de kwantumgetallen in een van de hoekpunten van de bekomen figuur.

Academiejaar 2009-2010 1^{ste} zit

1. Bepaal de symmetriegroep (enkel alle gewone rotaties) van een regelmatige vijfhoek. Geef de klassen en de subgroepen. Bepaal de coëfficiënten die optreden in de klassenvermenigvuldiging.
2.
 1. Bepaal de karaktertabel van de groep T_h op basis van het feit dat deze groep een direct product is van de tetrahedrische groep T en i (i bevat enkel de identiteit en de inversie).
 2. Bepaal unitaire matrices voor alle irreduciebele representaties van T (je kan o.m. uitgaan van de transformatie van de coördinaten in het vlak)
 3. Hoe kan je nu de representatiematrices voor T_h vinden (slechts enkele voorbeelden?)

3. Beschouw een hypothetische molecule gevormd uit drie identieke atomen op de hoeken van een gelijkzijdige driehoek. Beschouw enkel de verplaatsingen van de atomen in het vlak.
1. Ontbindt de reducibele representatie, bekomen met deze verplaatsingscoördinaten als basis, in irreducibele representaties en identificeer deze overeenkomstig translaties, rotaties, vibraties.
 2. Bepaal de orthogonale trillingswijzen, en geef er een schematische weergave van (je kan eventueel de projectie- en/of generator-operatoren gebruiken, maar een andere aanpak is ook mogelijk)
Tip: een goede keuze van de verplaatsingscoördinaten waar je van vertrekt kan de uitwerking vereenvoudigen

Categorieën:

- Fysica
- MFYS