物理数学3　homework 2

2016/10/3

1　関数の表現

任意の一変数関数 $f(x)$ から、偶関数 $f(x)+f(-x)$ と奇関数 $f(x)-f(-x)$ が作れる。この簡単な事実を表現論の言葉に通訳すると、点群 $\{I,\sigma\}$(σ は原点に対する鏡映) に対して、任意の $f(x)$ から $D(I)=D(\sigma)=1$ 表現の基底と $D'(I)=-D'(\sigma)=1$ 表現の基底が作れることである。[1] ここで、$f(x)+f(-x)=\sum_{g\in\{I,\sigma\}}D(g)g\cdot f(x)$ と $f(x)-f(-x)=\sum_{g\in\{I,\sigma\}}D'(g)g\cdot f(x)$ であることに注意せよ。[2]
以下では、以上の事実を一般した問題を考えよう。任意の関数 $f_1(\boldsymbol{r}),f_2(\boldsymbol{r}),...,f_{n_a}(\boldsymbol{r})$(変数 $\boldsymbol{r}$ は何次元でもよい) から、有限点群 G の n_a 次元表現 D_a の基底 $\varphi_1(\boldsymbol{r}),\varphi_2(\boldsymbol{r}),...,\varphi_{n_a}(\boldsymbol{r})$ がどうやって作れるのか？偶関数と奇関数の例を見ると、下のような推測が自然である。

$$\begin{bmatrix}\varphi_1(\boldsymbol{r})\\ \varphi_2(\boldsymbol{r})\\ \cdots\\ \varphi_{n_a}(\boldsymbol{r})\end{bmatrix}=\sum_{g\in G}D_a(g)\begin{bmatrix}g\cdot f_1(\boldsymbol{r})\\ g\cdot f_2(\boldsymbol{r})\\ \cdots\\ g\cdot f_{n_a}(\boldsymbol{r})\end{bmatrix}.\qquad(*)$$

(1) 式 $(*)$ で得られた $[\varphi_1(\boldsymbol{r}),\varphi_2(\boldsymbol{r}),...,\varphi_{n_a}(\boldsymbol{r})]^{\mathrm{T}}\equiv\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{r})$ は $g\cdot\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{r})=D_a^{-1}(g)\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{r}),\forall g\in G$ を満たすことを示せ。ただし、$g\cdot\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{r})=[g\cdot\varphi_1(\boldsymbol{r}),g\cdot\varphi_2(\boldsymbol{r}),...,g\cdot\varphi_{n_a}(\boldsymbol{r})]^{\mathrm{T}}$ である。
(2) $\varphi_1(\boldsymbol{r}),\varphi_2(\boldsymbol{r}),...,\varphi_{n_a}(\boldsymbol{r})$ の線形結合 $f(\boldsymbol{r})=\sum_{j=1}^{n_a}c_j\varphi_j(\boldsymbol{r})$ に対して、$g\cdot f(\boldsymbol{r})=\sum_{j=1}^{n_a}c'_j\varphi_j(\boldsymbol{r})$, $[c'_1,c'_2,...,c'_{n_a}]^{\mathrm{T}}=D_a(g)[c_1,c_2,...,c_{n_a}]^{\mathrm{T}}$ であることを示せ。
以上の議論から、式 $(*)$ による作り方が正しいことが分かる。

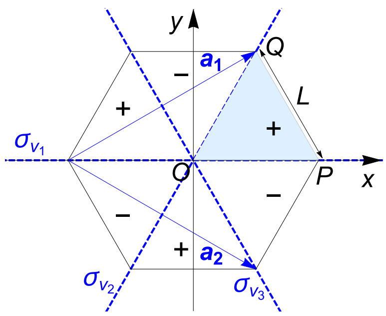

図 1

式 $(*)$ の応用として、無限の深さを持つ正三角形井戸型ポテンシャルの固有値問題を考えよう。この問題に対応するシュレディンガー方程式を直接取り扱うことが難いが、図 1 のように正三角形

[1] $f(x)$ が奇 (偶) 関数であれば、$f(x)+f(-x)=0$ ($f(x)-f(-x)=0$) となり、偶 (奇) 関数が作れない。ここでは $f(x)$ が偶関数と奇関数のいずれでもない場合を考える。
[2] 回転や鏡映等実空間操作 g の関数 $f(\boldsymbol{r})$ への作用は $g\cdot f(\boldsymbol{r})=f(g^{-1}\boldsymbol{r})$ で定義される。これは、関数を平行移動（回転）した効果は、座標を逆方向に平行移動（回転）した効果と同じことに対応している。

OPQ を大きい正六角形の一部とみなし、更に反対称性の条件を課すと、元の境界条件を満たす波動関数が作れる。以下、誘導に従って、正三角形井戸型ポテンシャルの固有波動関数を求めよ。
(3) 二次元自由区間の固有波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ に $\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_1) = \psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_2) = \psi(\boldsymbol{r})$ のような周期的境界条件を課すと、許される $\boldsymbol{k}$ が量子化される。特に、$\boldsymbol{a}_1 = (\frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})L, \boldsymbol{a}_2 = (\frac{3}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2})L$ である場合、許される波数ベクトルを定めよ。
(4) 小問 (3) で得られた波動関数と図 1 での鏡映操作 $\sigma_{v_j}(j=1,2,3)$ から生成される C_{3v} 点群[3] の A_2 表現 ($D_{A_2}(\sigma_{v_j}) = -1$) を式 ($*$) にあてはめることで、正三角形 OPQ の境界でゼロを取る条件を満たす固有波動関数を求めよ。
(5) もう一回式 ($*$) を使って、小問 (4) で得られた固有波動関数から正三角形 OPQ 自身の C_{3v} 点群 (図 2 での鏡映操作 σ_{v_j} から生成される) の既約表現 A_1(恒等表現 $D_{A_1}(\sigma_{v_j}) = 1$)、$A_2$、$E$(二次元表現、実空間操作と一緒) の基底の例を作れ。(ヒント：A_1 の例は基底状態でよいが、E は少なくとも第一励起状態、A_2 は更に高い励起状態と対応する。)

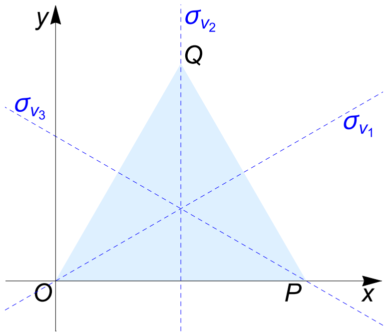

図 2

[3] C_{nv} 点群とは、1 本の主軸 (ここでは xy 平面に垂直する z 軸) に対する角 $\theta_k = \frac{2k\pi}{n}(k=1,2,...,n-1)$ の回転 C_n^k、主軸を含みそれに対する角 $\frac{\pi}{n}$ の回転で互いに移り変わる n 枚の鏡映面 $\sigma_{v_k}(k=1,2,...,n)$ 及び単位元 I のなす群である。