2018 10834

第16回 量子力学　相原大地

対称操作の作る群とその表現

回転操作など一般の対称操作をRとかくと，

$$\psi(\vec{r}) \mapsto R\psi(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r})$$

であったが，これを少し一般化して，

$$\psi \mapsto \psi^R = R\psi$$

$$|\psi\rangle \mapsto R|\psi\rangle$$

と書く。以下，この変換は全空間での確率を保存し，Unitaryとする。

$$\langle\psi^R|\psi^R\rangle = \langle\psi|R^\dagger R|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$$

$$R^\dagger R = 1 \quad \therefore R^\dagger = R^{-1} \quad \text{: Unitary}$$

ここで一連の対称操作Rに対して以下の関係式が成り立つとき，対称操作は群をつくるという。

- 積について閉じている　$R_2 R_1 = {}^\exists R$
- 結合律　$(R_3 R_2)(R_1) = R_3(R_2 R_1)$
- 単位元Eの存在　$R\,{}^\exists E = {}^\exists E R = R$
- 逆元の存在　$R\,{}^\exists R^{-1} = {}^\exists R^{-1} R = E$

例1　$C_1 = \{E, I\}$　$\psi(x) \to \psi^I(x) = \psi(-x)$

C_1の群表

R_2 \ R_1	E	I
E	E	I
I	I	E

演算子Oの変換は変換後と前とで期待値が等しくなるよう定める

$$\langle\psi^R|O^R|\psi^R\rangle = \langle\psi|R^\dagger O^R R|\psi\rangle = \langle\psi|O|\psi\rangle$$

$$\therefore O^R = ROR^\dagger = ROR^{-1}$$

特にHamiltonian Hがこの変換で不変なら，

$$RHR^{-1} = H$$

$$[H, R] = 0$$

とHamiltonianはRと可換となる

なお，Hamiltonianを不変にする操作も群をつくる

$[H, R_1] = 0$，$[H, R_2] = 0$　つまり $HR_1 = R_1 H$，$HR_2 = R_2 H$

なら $HR_2R_1 = R_2HR_1 = R_2R_1H$ より，$[R_2R_1, H] = 0$

結合則と単位元の存在はほぼ自明で，

$HR_1 = R_1H$ なら $R_1^{-1}H = HR_1^{-1}$

群の表現

縮退した状態がつくるHamiltonianを不変とする対称操作のつくる群の表

$$H|\psi_i\rangle = |\psi_i\rangle E, \quad \langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}, \quad i=1,\cdots,d$$

これにUnitary変換Rを作用

$$RH|\psi_i\rangle = HR|\psi_i\rangle = R|\psi_i\rangle E$$

つまり $R|\psi_i\rangle$ も同じenergyの固有状態となるから、次のように $\{|\psi_i\rangle\}$ の線形結合として書けるはずである。

$$R|\psi_i\rangle = |\psi_j\rangle D_{ji}(R)$$

ここで線形結合の係数は対称操作Rに依存するはずなので $D_{ji}(R)$ と書いた。これを

$$\psi = (|\psi_1\rangle, \cdots, |\psi_d\rangle) \qquad \psi^\dagger\psi = E_d$$

$$\{D(R)\}_{ji} = D_{ji}(R)$$

として次のように書く。

$$R\psi = \psi D(R)$$

よって、対称操作Rが群をつくり、

$$R_{21} = R_2R_1$$

とすれば、

$$R_{21}\psi = R_2R_1\psi = R_2\psi D(R_1) = \psi D(R_2)D(R_1)$$
$$= \psi D(R_{21})$$

となる。これは群の操作Rごとに定まるd次元のUnitary行列D(R)が

$$D(R_2R_1) = D(R_2)D(R_1)$$

を満たすことを意味する。また、$D(E) = E_d$, $D(R^{-1}) = [D(R)]^{-1}$

この関係を $\{D(R)\}$ がRのd次元表現を作り、ψ がその基底になると言う。または、ψ がRのd次元表現D(R)に従って変換すると表現する。少し一般に言えば、対称操作が群を作り、基底の変換則を定める行列D(R)がその群の表現を与える。

さらに基底のUnitary変換を

$$\psi = \psi' S, \quad S^\dagger S = E_d$$

とすれば、$R\psi' S = \psi' S D(R)$ なので

$$R\psi' = \psi' D'(R), \quad D'(R) = SD(R)S^{-1}$$

表現のUnitary性

なお、RがUnitaryであるから、

$$(R\psi)^\dagger = \psi^\dagger R^\dagger = (\psi D)^\dagger = D^\dagger\psi^\dagger$$

$$\psi^\dagger R^\dagger R\psi = \psi^\dagger\psi = E_d = D^\dagger\psi^\dagger\psi D = D^\dagger D$$

とDもd次元のUnitary行列となる。