201810862 高梨 宏介

対称操作のつくる群とその表現

ここで回転操作など一般の対称操作をRとかけば

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

であったが、これを少し一般化して

$\psi \to \psi^R = R\psi$

$|\psi\rangle = R|\psi\rangle$

とかく。以下この変換は全空間での確率を保存しユニタリとする。

$\langle\psi^R|\psi^R\rangle = \langle\psi|R^\dagger R|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$, $R^\dagger R = 1$

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、対称操作は群を作るとよぶ

- 積について閉じている　$R_2R_1 = {}^\exists R$
- 結合律　$(R_3R_2)(R_1) = R_3(R_2R_1)$
- 単位元Eの存在　$R\,{}^\exists E = {}^\exists E\,R = R$
- 逆元の存在　$R\,{}^\exists R^{-1} = {}^\exists R^{-1}\,R = E$

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に定める

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

$O^R = R\,O\,R^\dagger = R\,O\,R^{-1}$

特にハミルトニアンHがこの変換で不変なら

$RHR^\dagger = H$

$[H,R] = 0$

とハミルトニアンはRと可換となる

なおハミルトニアンを不変にする操作も群をつくる

$[H,R_1] = 0$, $[H,R_2] = 0$ 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

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

pdf de note | 8.0mm solid Grid, Mono

群の表現とは

縮退した状態がつくるハミルトニアンを不変にする
対称操作のつくる群の表現

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

これにユニタリ変換Rを作用させれば

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

つまり$R|\psi_i\rangle$も同じエネルギーの固有状態となるから
次のように$\{|\psi_i\rangle\}$の線形結合としてかける

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

これを

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

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

として次のようにかく

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

よって対称操作Rが群をつくり

$R_{21} = R_2 R_1$

とすれば

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

となる. これは群の操作Rごとに定まるd次元の
ユニタリ行列D(R)が

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

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次元表現をつくり,
ψがその基底になるという. 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.

さらに基底のユニタリ変換を

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

とすれば $R \psi S = \psi' S D(R)$ だから

$R \psi' = \psi' D'(R) \quad , D'(R) = S D(R) S^\dagger$

なお，R がユニタリであるから

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

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

と D も d 次元のユニタリ行列となる（表現のユニタリ性）