

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。

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

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

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. $C_1 = \{E, I\}$ $\psi(x) \rightarrow \psi^I(x) = \psi(-x)$

C_1 の群表

R_1	E	I
R_2	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。

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

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

特に Hamiltonian H が \exists の変換で不変なら、

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

$$[H, R] = 0$$

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。

$$[H, R_1] = 0, [H, R_2] = 0 \text{ ならば } H R_1 = R_1 H, H R_2 = R_2 H$$

$$\text{ならば } H R_2 R_1 = R_2 H R_1 = R_2 R_1 H \text{ より, } [R_2 R_1, H] = 0$$

結合則と単位元の存在はほぼ"自明"で、

$$H R_1 = R_1 H \text{ ならば } R_1^{-1} H = H R_1^{-1}$$

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現

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

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。

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

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

$$\psi = (|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_d\rangle) \quad \psi^\dagger \psi = E_d$$

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

と R 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、

$$R_2 R_1 = R_2 R_1$$

とすれば、

$$\begin{aligned} R_2 R_1 \psi &= R_2 R_1 \psi = R_2 \psi D(R_1) = \psi D(R_2) D(R_1) \\ &= \psi D(R_2 R_1) \end{aligned}$$

となる。これは群の操作 R とに定まる d -次元の Unitary 行列 $D(R)$ が

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

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

この関係を $\{D(R)\}$ が R の d -次元表現と呼び、 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。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、 $R\psi' S = \psi' S D(R)$ となるので

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

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 $D \in d$ -次元の Unitary 行列となる。