6/30　第16回　　　2017 10848　有富洸人

。対称操作の作る群とその表現

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

$$\rightarrow \left(\begin{array}{l} \psi \mapsto \psi^R = R\psi \\ |\psi\rangle \mapsto R|\psi\rangle \end{array} \right.$$

$$\langle \psi^R | \psi^R \rangle = \langle \psi | R^+ R | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle$$
$$R^+ R = 1$$

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　$R\,{}^\exists R^{-1} = {}^\exists R^{-1} R = E$

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.

$$\langle \psi^R | O^R | \psi^R \rangle = \langle \psi | R^+ O^R R | \psi \rangle = \langle \psi | O | \psi \rangle$$
$$O^R = ROR^+ = ROR^{-1}$$

特にハミルトニアンHがこの変換で不変なら,

$$RHR^{-1} = H$$
$$[H, R] = 0$$

以上のようにハミルトニアンは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.

◦ 群の表現とは何か

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

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

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

これを
$$\left(\begin{array}{l} \psi = (|\psi_1\rangle, \cdots, |\psi_d\rangle) \qquad \psi^{+}\psi = E_d \\ \{D(R)\}_{ji} = D_{ji}(R) \end{array}\right.$$
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，$R_{21}=R_2R_1$ とすると，以下のようになる．

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

$\rightarrow$ $D(R_{21}) = D(R_2)D(R_1)$
$D(E) = E_d$, $D(R^{-1}) = [D(R)]^{-1}$

$\rightarrow$ $D(R)$ が R の d 次元表現を作り，ψ がその基底となるという．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．

$$\psi = \psi' S,\quad S^{+}S = E_d$$

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

$$\rightarrow \left(\begin{array}{l} (R\psi)^{+} = \psi^{+}R^{+} = (\psi D)^{+} = D^{+}\psi^{+} \\ \psi^{+}R^{+}R\psi = \psi^{+}\psi = E_d = D^{+}\psi^{+}\psi D = D^{+}D \end{array}\right.$$

$\rightarrow$ D も d 次元のユニタリ行列となる．