Symetrie v kvantové mechanice

- kvantový systém – stav popsaný vektorem (funkcí) z Hilbertova prostoru
  např. vekt. prostor kvadrat. integrabilních funkcí $L^2(\mathbb{R}^3)$
  pro jednu částici (neuvažujeme spin)

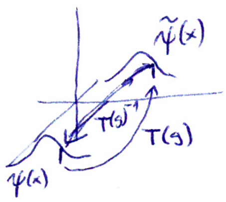
- pokud se systémem provedeme transformaci jako posunutí, rotace apod.
  bude systém popsaný jiným vektorem z Hilbertova prostoru
  než před transformací → této transformaci bude odpovídat
  určitý operátor na Hilb. prostoru $\mathcal{H}$

- uvažujeme-li celou grupu transformací (na $\mathbb{R}^3$ to může být např. $SO(3)$, $O(3)$, C_i, $D_{\infty h}$ atd.), bude tato grupa působit na Hilb. prostoru $\mathcal{H}$ pomocí lineárních operátorů ⇒ obecně (∞-rozměrná) reprezentace

- požadavek (přirozený, aby se zachovávaly pravděpodobnosti) na zachování skalárního součinu (a normy) při těchto transformacích vede na působení unitárními operátory na $\mathcal{H}$, tj. platí

$$\langle U(g)\psi | U(g)\varphi\rangle = \langle \psi | \varphi \rangle \quad \Rightarrow \quad U(g)^\dagger U(g) = 1$$

- pokud transformace na $\mathbb{R}^3$ odpovídající prvku $g \in G$ jisté abstraktní grupy bude $T(g)$, pak vlnová fce v $L^2(\mathbb{R}^3)$ se změní na



$$\boxed{\tilde\psi(x) = U(g)\psi(x) = \psi(T(g)^{-1}x)}$$

[Jde o působení na $\mathcal{H}$, neboť
$$U(g_1)U(g_2)\psi(x) = U(g_1)\psi(T(g_2)^{-1}x) = \psi(T(g_2)^{-1}T(g_1)^{-1}x) = \psi(T(g_1g_2)^{-1}x) = U(g_1g_2)\psi(x)$$
]

a obdobně pro fci mnohočásticovou (všechny vekt. $\vec{x}$ se ztransformují pomocí $T(g)$)

- pokud máme více komponent vlnové fce, mohou se navíc „míchat" při určité transformaci systému jednotlivé komponenty pomocí matic, které tvoří tolika rozměrnou repr. dané grupy, kolik ~~tea~~ komponent máme, např. pro bispinory bychom měli

$$U(g)\begin{pmatrix}\psi_1(x)\\ \psi_2(x)\\ \psi_3(x)\\ \psi_4(x)\end{pmatrix} = D(g)\begin{pmatrix}\psi_1(T(g)^{-1}x)\\ \psi_2(T(g)^{-1}x)\\ \psi_3(T(g)^{-1}x)\\ \psi_4(T(g)^{-1}x)\end{pmatrix},$$

kde $D(g)$ je jistá 4-rozm. maticová reprezentace dané grupy

- transformace operátorů – transformovaný systém bude popsán fcí $U(g)\psi$ namísto původní fce ψ a hledáme operátor $\tilde{A}$, který bude mít stejné střední hodnoty (a obecně maticové elementy $\langle\tilde\psi|\tilde A|\tilde\psi\rangle$) v novém stavu jako operátor A ve stavu původním, tj.

$$\left.\begin{aligned}\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\tilde\psi|\tilde A|\tilde\psi\rangle &= \langle U(g)\psi|\tilde A U(g)\psi\rangle \\ \text{unitarita} \Rightarrow \| \quad & \langle U(g)\psi|U(g)A\psi\rangle\end{aligned}\right\} \Rightarrow \boxed{\tilde A = U(g)\,A\,U(g)^\dagger}$$

- je to v souladu s tím, co dostaneme, pro operátor závislý na x, neboť

pokud označíme $\phi(x) = A(x)\psi(x)$

tak $U(g)\,\phi(x) = \begin{cases} U(g)\,A(x)\,\psi(x) \\ \phi(T(g)^{-1}x) = A(T(g)^{-1}x)\,\psi(T(g)^{-1}x) = A(T(g)^{-1}x)\,U(g)\,\psi(x) \end{cases}$

a tedy $U(g)A(x) = A(T(g)^{-1}x)\,U(g) = \tilde{A}(x)\,U(g)$

- Hamiltonián H systému se obecně ztransformuje na

$$\tilde{H} = U(g)\,H\,U(g)^{\dagger}$$

nás ale budou zajímat takové transformace (operátory $U(g)$), které nechávají Hamiltonián nezměněn (tj. nemění energii systému), tj.

$$\tilde{H} = H = U(g)HU(g)^{\dagger} \Rightarrow \boxed{HU(g) = U(g)H}$$

$\Rightarrow$ grupě všech $U(g)$ komutujících s H daného kvantového systému říkáme grupa symetrie systému popsaného Hamiltoniánem H

[jde o grupu, neboť $U(g_1g_2)\,H\,U(g_1g_2)^{\dagger} = U(g_1)U(g_2)\,H\,U(g_2)^{\dagger}U(g_1)^{\dagger} = H$
pokud $U(g_1)$ a $U(g_2)$ patří do grupy symetrie]

- nechť ψ je vlastní fce H, tj. $H\psi = \lambda\psi$ a nechť H je invariantní při působení G na $\mathcal{H}$ pomocí $U(g)$, pak

$$\boxed{H\,U(g)\psi = U(g)\,H\psi = \lambda\,U(g)\psi}$$

neboli $U(g)\psi$ je též vlastní vektor H se stejnou vlastní hodnotou λ

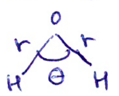
$\Rightarrow$ podprostor $\mathcal{H}_\lambda \subset \mathcal{H}$ příslušný vl. hodnotě λ je invariantní při působení grupy G

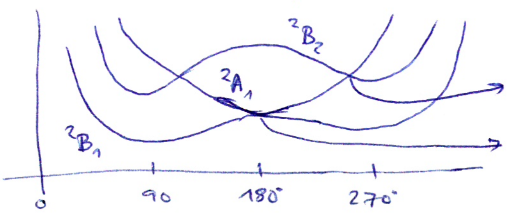
$\Rightarrow$ lib. báze v $\mathcal{H}_\lambda$ tvoří bázi reprezentace grupy G, tj.

$$U(g)\psi_n = \sum_{m=1}^{d} \psi_m D_{mn}(g)$$

- pokud $\mathcal{H}_\lambda$ neobsahuje žádný netriviální inv. podprostor, jde o IR grupy G a její dimenze se rovná degeneraci příslušné vl. hodnoty λ
  $\Rightarrow$ degenerace je vysvětlena symetrií systému
- pokud se $\mathcal{H}_\lambda$ skládá ze dvou či více invariantních podprostorů pak buď nemáme úplnou grupu symetrie (př. atom vodíku v nerelat. kvant. mechanice)
  nebo jde o „ryzí" náhodnou degeneraci, která vzniká při vhodném nastavení „konstant" systému (parametrů)

Př. H_2O





→ náhodná degenerace pro určité θ při fixním r

→ zde vyšší symetrie $D_{\infty h}$ – má 2-rozm. IR