Symetrie v kvantové mechanice

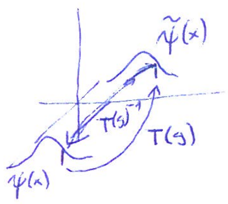
- kvantový systém – stav popsaný vektorem (funkcí) z Hilbertova prostoru
  např. vekt. prostor kvadrat. integrabilních funkcí $L^2(\mathbb{R}^3)$
  pro jednu částici (neuvažujeme spin)

- 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 $\mathcal{H}$

- uvažuje-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 ⇒ obecné (∞-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



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

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

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

- 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 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 $\langle\tilde{\psi}|\tilde{A}|\tilde{\varphi}\rangle$) v novém stavu jako operátor A ve stavu původním, tj.
  $$\left.\begin{aligned}\langle\psi|A|\varphi\rangle = \langle\tilde{\psi}|\tilde{A}|\tilde{\varphi}\rangle &= \langle U(g)\psi|\tilde{A}\,U(g)\varphi\rangle\\ \text{unitarita} \Rightarrow \quad &\| \\ &\langle U(g)\psi|U(g)A\varphi\rangle\end{aligned}\right\} \Rightarrow \boxed{\tilde{A} = U(g)\,A\,U(g)^\dagger}$$

- 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 <u>grupa symetrie</u> systému popsaného Hamiltoniánem H

[Jde o grupu, neboť $U(g_1g_2)HU(g_1g_2)^\dagger = U(g_1)U(g_2)HU(g_2)^\dagger U(g_1)^\dagger = H$
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

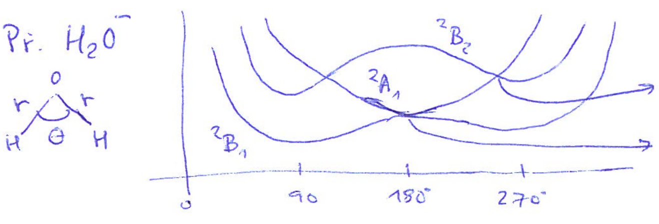
$\Rightarrow$ podprostor $\mathcal{H}_\lambda \subset \mathcal{H}$ příslušný vl. hodnotě λ je <u>invariantní</u> při působení grupy G

$\Rightarrow$ 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