物理における群論入門

慶応大学物理学科３年　松永拓

構成

- 1．群とは何か？

(群の基本的な知識)

- 2．量子力学における群論

(縮退や摂動を記述する道具として)

なぜ物理で群論を使うのか

一般に、対称性を規定している変換の集合は群をなす

つまり、群は対称性を記述するのに便利

対称性を扱う物理では、群論が便利な道具となる

まず、群とはどんなものか見ていこう！

１．群の定義

$g_1, g_2, \cdots, g_n$が集合Gの元で、任意の２つの元g_i, g_jのあいだに演算・が定義されていて、以下を満たすときにGは群であるという。

1. $g_i, g_j \in \mathrm{G}$に対して、 $g_i \cdot g_j \in \mathrm{G}$が成立。
2. $g_i, g_j, g_k \in \mathrm{G}$に対して、 $(g_i \cdot g_j) \cdot g_k = g_i \cdot (g_j \cdot g_k)$
3. ある$e \in G$が存在して、任意の$g_i \in G$に対して $e \cdot g_i = g_i \cdot e = g_i$が成り立つ。
4. 任意の$g_i \in G$に対してある元${g_i}^{-1} \in G$が存在して $g_i \cdot {g_i}^{-1} = {g_i}^{-1} \cdot g_i = e$が成り立つ。

要するに

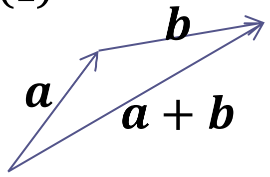
- 大体群というのは
  - 変換しない、という変換を含み
  - 変換に対して逆変換を含む

ような集合のこと。

例：並進群

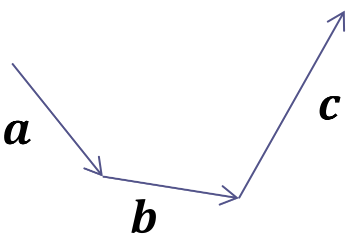
平行移動全体の集合$\{\boldsymbol{a}$(任意のベクトル)$|\boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}\}$は群をなす。
(簡単な証明)
積の演算・を平行移動のベクトルの和で定義する

(1)



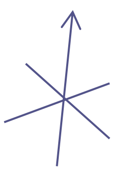
$\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}$も平行移動の
ベクトル

(2)



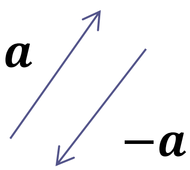
$(\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}) + \boldsymbol{c} = \boldsymbol{a} + (\boldsymbol{b} + \boldsymbol{c})$

(3)



動かさない
($\mathbf{o}$を加える)

(4)

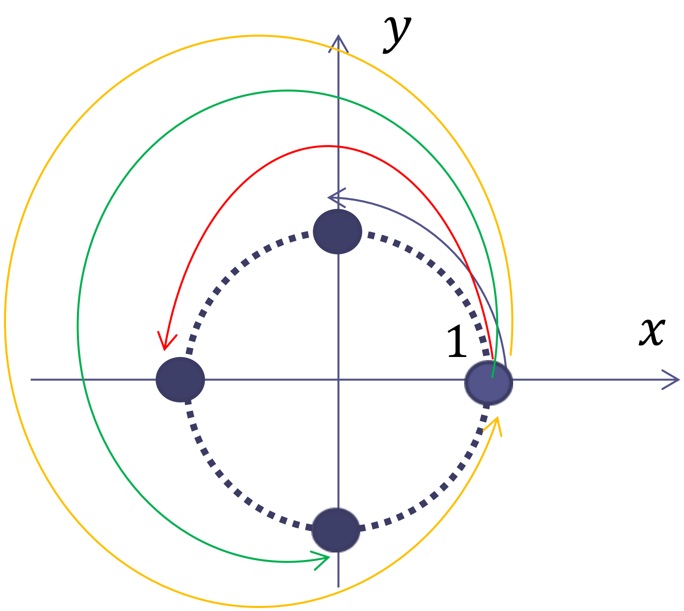


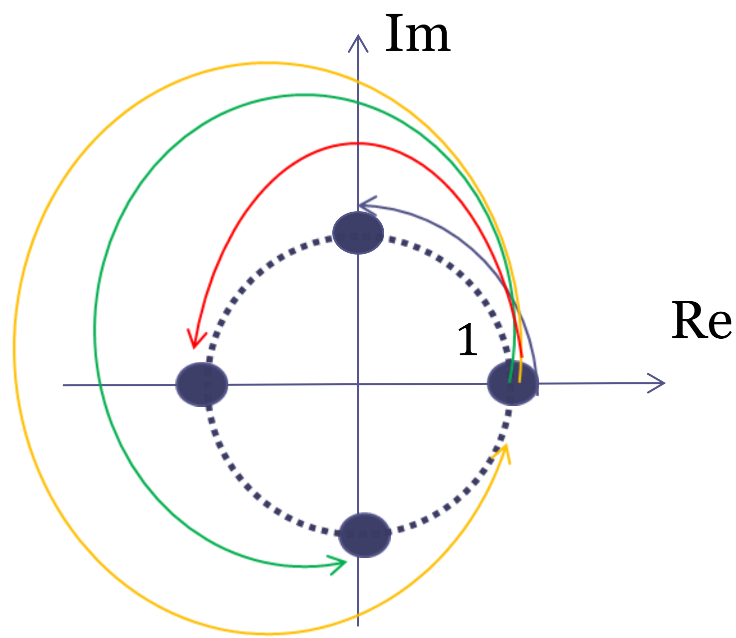
元に戻れる

よって、これは群。

１つの群の異なる表し方

以下の2つは、同じ回転操作群$\left\{R\left(\frac{\pi}{2}\right), R(\pi), R\left(\frac{3\pi}{2}\right), R(2\pi)\right\}$を異なる表し方をしただけと考えられる





$$\left\{\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\right\}$$

$$\{i, -1, -i, 1\}$$

何が言いたいかというと

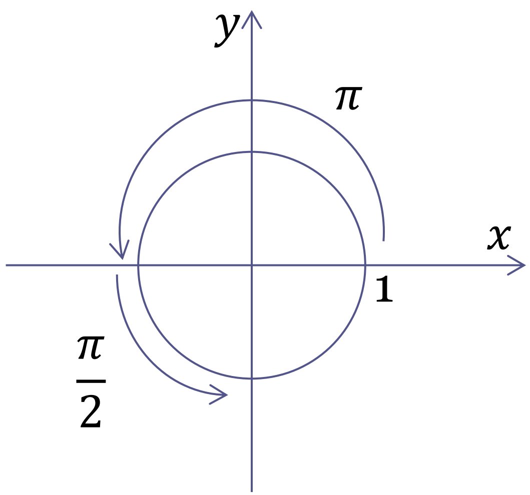
群の定量的な表し方は一通りではない。

例えば、回転操作はx-y平面上より複素平面上で考えたほうが次元が小さくて分かりやすい。

このように群をわかりやすく表現する方法はないか？

→群の表現論という方法がある！！

群の表現とは



$$R\left(\frac{\pi}{2}\right)R(\pi)=R\left(\frac{3\pi}{2}\right)$$

$\Updownarrow$ 対応

$$\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}$$

群元$\left\{R\left(\frac{\pi}{2}\right),R(\pi),R\left(\frac{3\pi}{2}\right),R(2\pi)\right\}$の間の関係と行列$\left\{\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\right\}$の間の関係は対応している！

群の表現の定義

ある群Gの元$G_1, G_2 \cdots$に対してd次元の正方行列$D(G_i)$が存在し、
群元の関係$G_i = G_j G_k$に対応して、行列の積の関係式
$D(G_i)$=$D(G_j G_k)$=$D(G_j)D(G_k)$
が成り立っている。
このとき、行列$\{D(G_1)$,$D(G_2), \cdots\}$
の集まりDを群Gの表現とよぶ。(表現も群なのは略)

$$\left\{D\left(R\left(\frac{\pi}{2}\right)\right), D\big(R(\pi)\big), D\left(R\left(\frac{3\pi}{2}\right)\right), D\big(R(2\pi)\big)\right\}$$
$$= \left\{\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\right\}$$

表現の基底

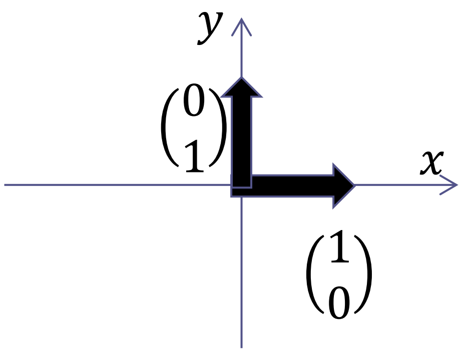
$\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n$をベクトル空間の1次独立な元とし、群Gの元$G_i$がこれらに作用する演算子であって、

$$G_i \psi_\nu = \sum_{\mu=1}^{d} \psi_\mu D_{\mu\nu}(G_i)$$

となるとき、$\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n$を表現$D$の基底という。

($D_{\mu\nu}(G_i)$が作る行列$D(G_i)$の集まりが表現を成すのは略)

表現の基底の例($G_i\psi_\nu = \sum_{\mu=1}^{d}\psi_\mu D_{\mu\nu}(G_i)$)



$$D = \left\{\begin{pmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}-1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0 & 1\\-1 & 0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}\right\}$$

$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$は回転の表現$D$の基底となっている

(証明)

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} D_{11}\left(R\left(\frac{\pi}{2}\right)\right) + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} D_{21}\left(R\left(\frac{\pi}{2}\right)\right) = R\left(\frac{\pi}{2}\right)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \left(= \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right)$$

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} D_{12}\left(R\left(\frac{\pi}{2}\right)\right) + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} D_{22}\left(R\left(\frac{\pi}{2}\right)\right) = R\left(\frac{\pi}{2}\right)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \left(= \begin{pmatrix}-1\\0\end{pmatrix}\right)$$

同値

- 群Gの異なる表現D, D'の表現行列$D(G_i)$, $D'(G_i)$が正則な行列Sによって

$$D'(G_i)=S^{-1}D(G_i)S$$

のように結びつくとき、２つの表現は同値である。

同値の例

回転操作群Gの表現D

$$\left\{\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\right\}$$

同値な変換 $S=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ i & -i\end{pmatrix}, S^{-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & -i\\ i & i\end{pmatrix}$

同値な表現D'

$$\left\{\begin{pmatrix}i & 0\\ 0 & -i\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}-i & 0\\ 0 & i\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\right\}$$

可約と既約

群Gの表現Dの表現行列$D(G_i)$に同値変換を行い、

$$D(G_i)=\begin{pmatrix} D^{(1)}(G_i) & 0 \\ 0 & D^{(2)}(G_i) \end{pmatrix}$$

のような形にできるとき、表現Dは可約であるという。
$D^{(1)}$,$D^{(2)}$も群Gの表現になっている。

可約でない表現を既約な表現という。

直和

- $D(G_i)=\begin{pmatrix} D^{(1)}(G_i) & 0 \\ 0 & D^{(2)}(G_i) \end{pmatrix}$となるとき、表現$D$は表現$D^{(1)}, D^{(2)}$の直和であるといい

$$D=D^{(1)} \bigoplus D^{(2)}$$

と表す。

直和の例

Dに同値な表現D'は既約表現の直和に分解できる。

$$\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = i \oplus -i$$
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -1 \oplus -1$$
$$\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = -i \oplus i$$
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 1 \oplus 1$$

回転群Gの２次元表現D'は回転群Gの１次元表現$\{i, -1, -i, 1\}$を２つ用いて表せた。

ここまでのまとめ

- 群をわかりやすくするために表現というものを考えることがある。
- 可約な表現は同値変換によっていくつかの既約表現の直和に分解できる。

量子力学における群論

量子力学における群論の利用法

量子力学における群論の利用法として

１．エネルギー準位とその固有状態を分類すること。

２．摂動が加わった時のエネルギー準位の分裂を定性的に議論すること。

などがある。

(準備)量子力学における変換

回転、並進等の操作を一般的にUで表すとする。

任意のケットの変換

$$|\tilde{\psi}>=U|\psi>$$
$$|\tilde{\varphi}>=U|\varphi>$$

物理量を表す演算子Aはどう変換するか？

量子力学における変換

$$< \varphi|A|\psi >=< \tilde{\varphi}|A'|\tilde{\psi} >$$

となるように変換後の物理量A'を決める。

$$< \tilde{\varphi}|A'|\tilde{\psi} >=< \varphi\left|U^\dagger A' U\right|\psi >$$

$$\therefore U^\dagger A' U = A$$

ユニタリー性$U^\dagger U = 1$を要請する($U^\dagger = U^{-1}$)

$$A' = UAU^{-1}$$

量子力学における対称操作

物理系（ハミルトニアン）を不変に保つ対称操作Uは
$A' = UAU^{-1}$より、

$$H = UHU^{-1} \quad or \quad [U, H] = 0$$

ハミルトニアンと可換である！

対称操作群の例

回転群

球対称なポテンシャルV(r)中の粒子のハミルトニアン

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r)$$

原点の周りのあらゆる空間回転Rに対して不変である。

→$[R, H] = 0$がいえる！

対称操作群のまとめ

ハミルトニアンを不変に保つ対称操作は群を成し、対象操作群とよばれる。

この群の元は$[U, H] = 0$を満たすことがその定義である。

今までと違う縮退の見方

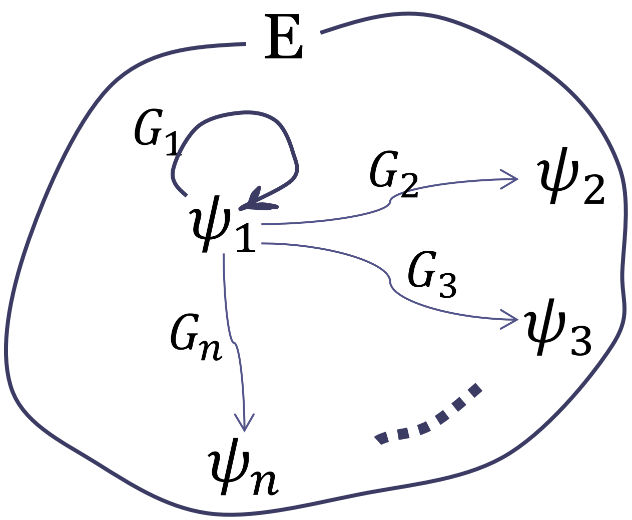
シュレディンガー方程式$H\psi = \mathrm{E}\psi$に、
対称操作群$\mathrm{G} = \{G_1, G_2, \cdots G_m\}$に属する変換$G_i$を作用

$$G_i H\psi = G_i \mathrm{E}\psi$$
$$\Leftrightarrow HG_i\psi = \mathrm{E}G_i\psi$$

→ψが解なら$G_i\psi$も同じエネルギー固有値Eを持つ解

→($G_i\psi$がψの定数倍でなければ)これらの固有状態は縮退している

今までと違う縮退の見方



ψ_1から出発して、対象操作群Gの全ての元をψ_1に作用させると、独立な固有関数の組$\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n (n \leq m, m$は群Gの元の数)を得る。
→対象操作だけですべての縮退した固有状態を調べつくせる！

$$G_i \psi_l = \sum_{k=1}^{n} \psi_k D_{kl} \ (G_i)$$

と表せるので、$\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n$は群Gの表現$D$の基底である。

一つのエネルギー準位に属する固有関数は群Gの表現を張る！

今までと違う縮退の見方

行列で表すとこうなる。

$$G_i \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & D(G_i) & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

対象操作によって固有関数は、同じエネルギーに属する固有関数の１次結合に移り変わる。

定理1

「縮退している固有関数を基底にすると、ハミルトニアンの対象操作群の表現Dは一般に既約となる。」

つまり、Dはこんなかんじになる。

$$D = \begin{pmatrix} -3 & 2 & -7 \\ 0 & 1 & 2 \\ 2 & -1 & 5 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ブロック対角化した形にかけない

「対象操作群の表現*D*は一般に既約」とは

もし表現*D*が可約なら・・・

$$\left(\begin{array}{c|cc} 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{array}\right)\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\psi_1\\ 2\psi_2+\psi_3\\ 0\psi_2+2\psi_3\end{pmatrix}$$

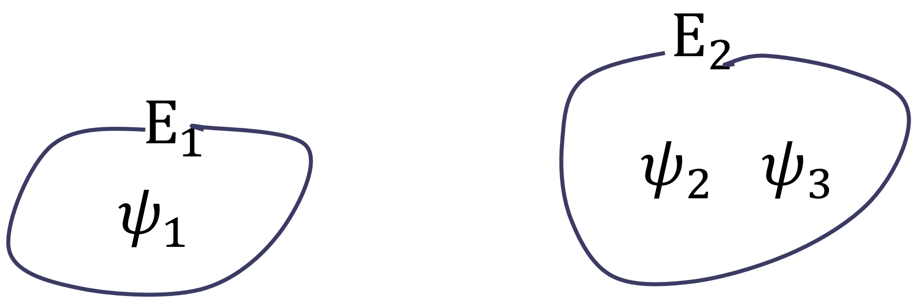
可約表現*D*をブロック
対角化したもの

ある固有値Eに属する固有関数

固有関数が$\{\psi_1\}$と$\{\psi_2,\psi_3\}$の2組に分けられてしまう。
自分たちの中だけで変換していて、相手の組には移らない。

「対象操作の表現*D*は一般に既約」とは

対称操作により互いの1次結合に移り変わる関数たちは、同じエネルギー準位に属するので・・・



表現Dが可約ならば、その基底$\{\psi_n\}$(n=3)から２つの異なったエネルギー固有値が得られてしまう。

！矛盾！

「対象操作群の表現*D*は一般に既約」とは

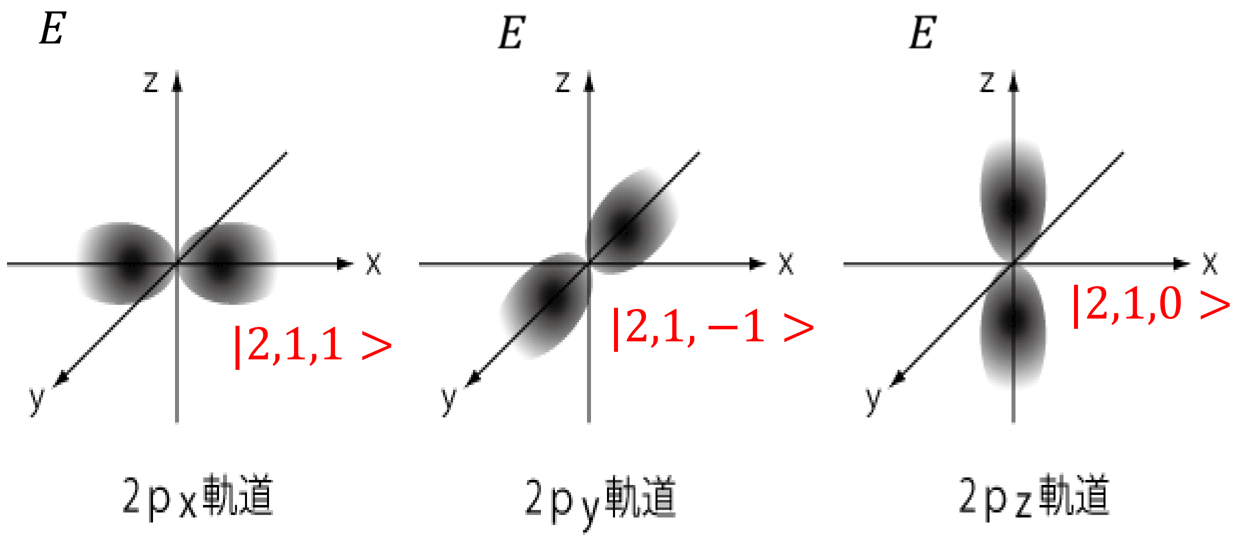
よって、表現*D*は可約でなく既約。

一つのエネルギー準位に属する固有関数は、
対象操作群の既約な表現を張る！

定理1の例:水素原子の2p軌道

電子のハミルトニアン$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}$は回転対称

→下の３つは縮退している。



定理1の例:水素原子の2p軌道

一つのエネルギー準位に属する固有関数は群の表現を張る

$$R|2,1,m>=\sum_{m'=-1}^{1}|2,1,m'>D^{(1)}{}_{m'm}(R)$$

$$D^{(1)}{}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)=<l,m'|\exp(\frac{-il_z\alpha}{\hbar})\exp(\frac{-il_y\beta}{\hbar})\exp(\frac{-il_z\gamma}{\hbar})|l,m>$$

(α,β,γ)はオイラー角)

$$=\cdots=e^{-i(m'\alpha+m\gamma)}\begin{pmatrix}\frac{1+cos\beta}{2} & -\frac{sin\beta}{\sqrt{2}} & \frac{1-cos\beta}{2}\\ \frac{sin\beta}{\sqrt{2}} & cos\beta & -\frac{sin\beta}{\sqrt{2}}\\ \frac{1-cos\beta}{2} & \frac{sin\beta}{\sqrt{2}} & \frac{1+cos\beta}{2}\end{pmatrix}$$

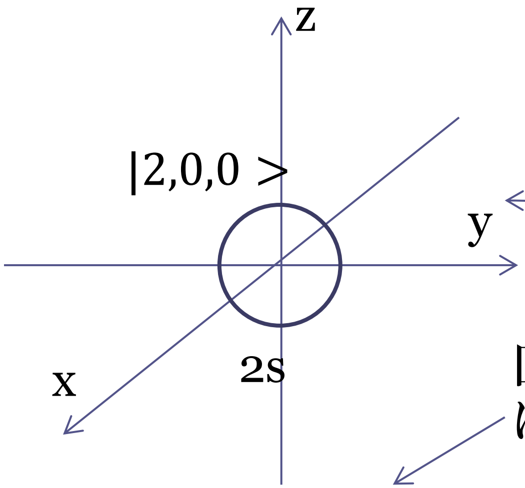
既約表現

定理1の例:水素原子の2p軌道

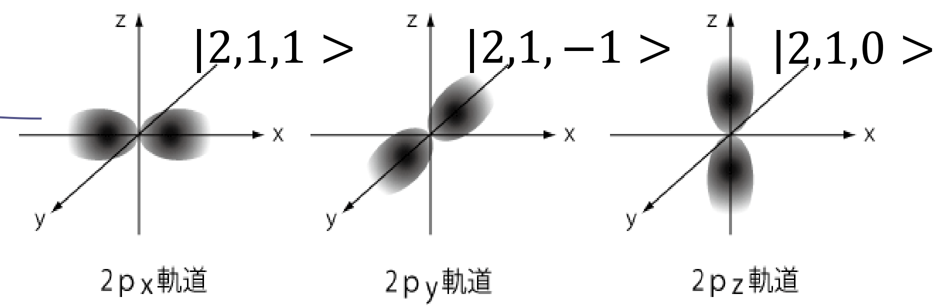
2p軌道の固有関数$|2,1,1>, |2,1,0>, |2,1,-1>$は対象操作群の既約な表現を張っている。

ちなみに

2s軌道の波動関数も３つの2pと同じエネルギーを持つが・・・



回転対称性からは説明できない。



mに関する縮退ではない。

エネルギー固有値が量子数mだけでなくlに関しても縮退していることによる。

摂動法における対称性と群

摂動法では、ハミルトニアンHを比較的簡単な部分H_0と摂動部分H_1に分けて

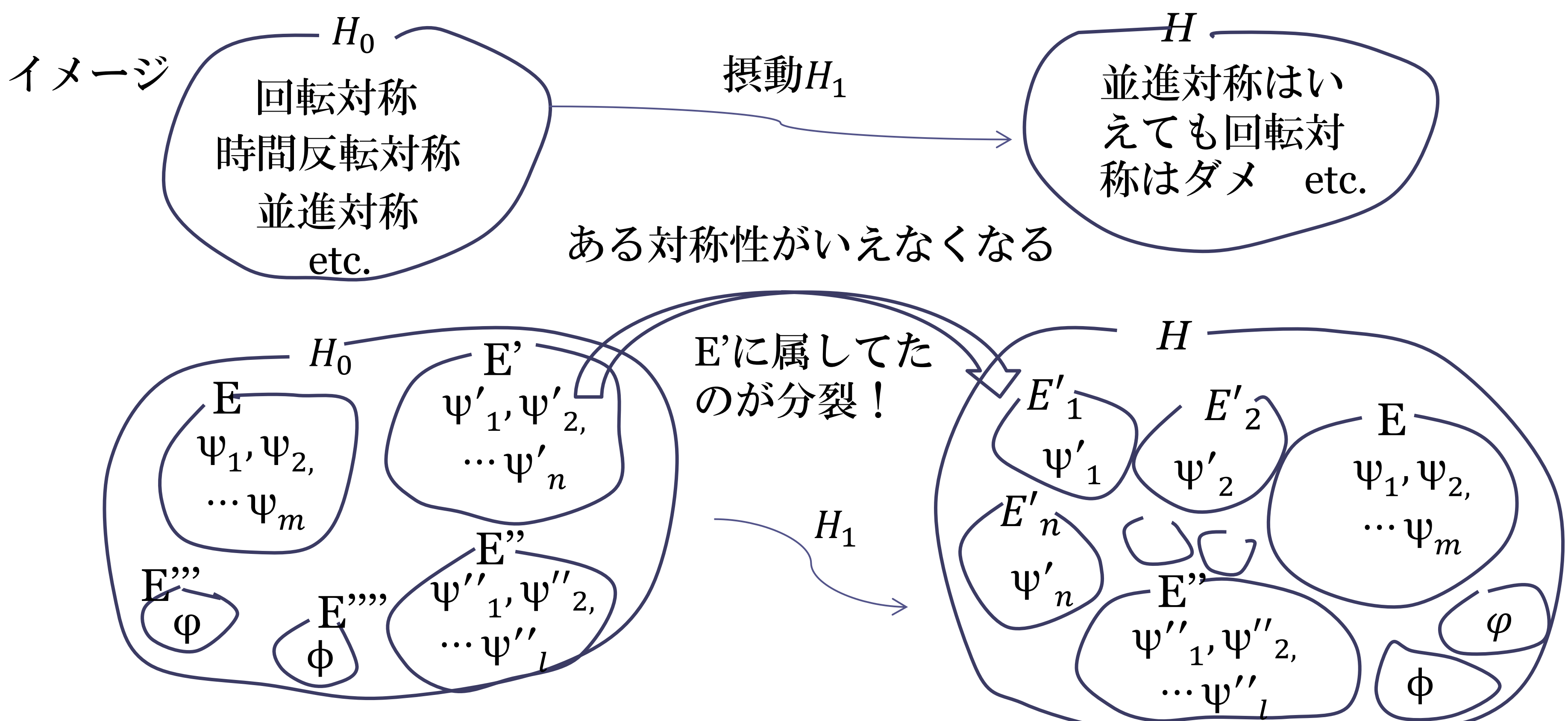
$$H = H_0 + H_1$$

として、近似計算をする。

$$\left(\begin{array}{c} H_0\text{のシュレーディンガー方程式を解き、} \\ H_1\text{を付け加えた時の効果を計算する方法。} \end{array} \right)$$

摂動は縮退をほどく　$H = H_0 + H_1$

一般にH_0はHよりもより高い対称性を持つようにとる。



定理2:摂動の定性的議論　$H = H_0 + H_1$

H_0の対象操作群G_0の既約表現D_0に属する固有関数を考える。

この固有関数をHの対象操作群Gの表現Dの基底にしても、Dは既約になるとは限らない。

$$G_{0_i}\psi_{0_\nu} = \sum_{\mu=1}^{d} \psi_{0_\mu} D_{0_{\mu\nu}}(G_{0_i})$$

これは既約だが

摂動

$$G_i\psi_{0_\nu} = \sum_{\mu=1}^{d} \psi_{0_\mu} D_{\mu\nu}(G_i)$$

これも既約とは限らない
=可約となりうる

定理2:摂動の定性的議論　$H = H_0 + H_1$

摂動H_1を加えて

$$D_0 \to D = D_1 \oplus D_2 \oplus \cdots D_n$$

のように、n個の既約表現をつかってかけたならば、エネルギー準位はn個に分裂する。

つまりこういうこと

$$\begin{pmatrix}-3 & 2 & -7\\ 0 & 2 & 1\\ 2 & -1 & 5\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\end{pmatrix} \xrightarrow{\text{摂動}} \begin{pmatrix}0 & -2 & 6\\ -1 & 1 & 3\\ -1 & -1 & 5\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\end{pmatrix}$$

H_0の対象操作群G_0の表現D_0は既約

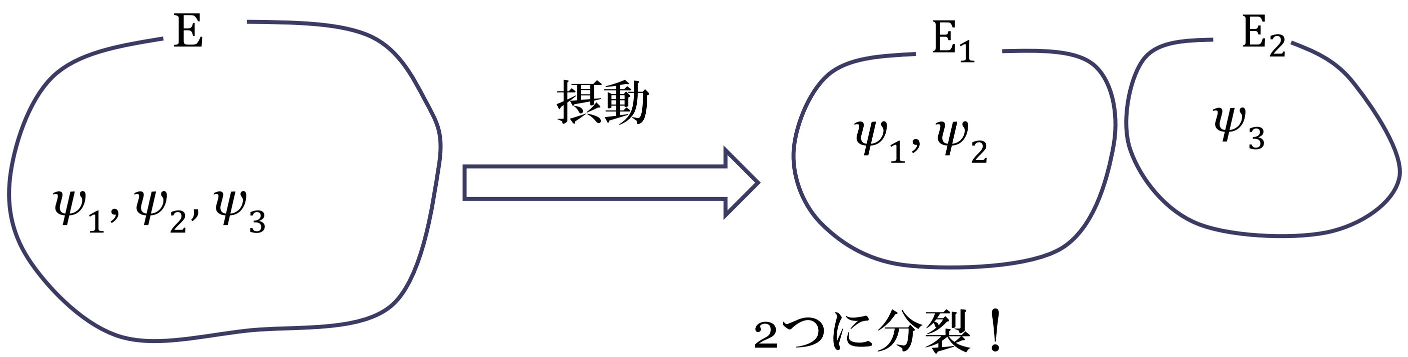
基底は変わらないのでHの対象操作群G の表現Dも既約になるとは限らない

可約表現Dをブロック対角化する

$$\left(\begin{array}{cc|c}-2 & 1 & 0\\ 0 & -2 & 0\\ \hline 0 & 0 & -2\end{array}\right)\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-2\psi_1 + \psi_2\\ 0\psi_1 - 2\psi_2\\ -2\psi_3\end{pmatrix}$$

固有関数は異なるエネルギーをもつ$\{\psi_1, \psi_2\}\{\psi_3\}$の2組に分けられる。

定理2:つまりこういうこと



2つに分裂！

実際、$\left(\begin{array}{cc|c} -2 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ \hline 0 & 0 & -2 \end{array}\right) = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} \oplus -2$なので、2つの既約表現の直和で表せている。

表現Dの最終形。もうこれ以上簡単にできない。

定理２の意義

複雑な摂動で具体的に摂動計算ができない

→非摂動ハミルトニアンの表現を既約表現の直和に分解するだけで解ける縮退の個数が議論できる。

まとめ

1．固有関数は対称性によって分類することができる。その時に群の考え方が役立つ。

2．摂動が加わった時のエネルギー準位の分裂は、非摂動ハミルトニアンの対象操作群の表現から議論できる。

全体を通して

群は対称性を記述する道具として非常に便利な道具である。

対称性を重んじる物理学において、群論は議論を整理するばかりか新しい見方までをも授けてくれるのだった。

参考文献

・「群と物理」佐藤光著　丸善株式会社
・「応用群論」犬井鉄郎著　裳華房
・「量子力学と群論」ハイネ著　PERGAMON PRESS
・「現代の量子力学(上)」J．J．サクライ著　吉岡書店

Special Thanks to Groups!!
群論、どうもありがとう