量子力学特論I　1998年度後期

§1　対称性

§2.　有限群　§2-1 群　§2-2 表現　§2-3 点群　§2-4 対称群

§3.　Lie群とLie代数

§4　su(2)　§4-1 SU(2)とSO(3)　§4-2 su(2)

§5　su(3)

§6　単純Lie代数

§7　Poincaré群　§8　量子群　§9　Kac-Moody代数

参考書

「群と表現」　吉川圭二　岩波書店　理工系の基礎数学9

「応用群論」　犬井・田辺・小野寺　裳華房

「物理数学特論・群と物理」　佐藤光　丸善　パリティ物理学コース

「物理学におけるリー代数」　ジョージアイ（九後訳）　吉岡書店

など

レポート

- 授業でとばした証明や問題
- 自分で興味を持った話題・物理への応用

期末の締切日直前の一夜漬ではなく着実に勉強してほしいので，毎月レポートを提出して下さい。締切日は 10/30，11/30，1/11，2/12。

（三号罫紙）

信州大学

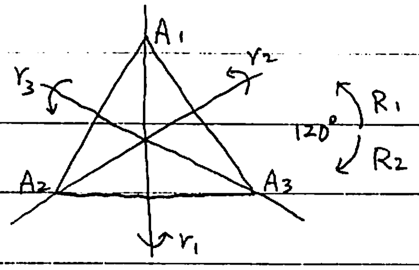
§1 対称性

◎ 対称操作

対象 X に操作σを施して不変のとき，σを X の対称操作という。

σ達は　　をなす。

例　正三角形板の合同変換



◎ 波動関数 $\psi(\vec{x})$ に操作 R を行う。　$\psi' = R\psi$　⤳ R ユニタリ

例　回転・平行移動　$\vec{x}' = R\vec{x} = \begin{cases} R(\vec{\theta})\vec{x} \\ \vec{x}+\vec{a} \end{cases}$

=

言い換えると　$\psi'(\vec{x}) =$　　　=

解釈 { 波を回した．　能動的解釈
　　　座標軸を回した　受　〃

演算子 A は　$(A\psi)' = R(A\psi)$　より
　　　　　　　〃　　　〃　　.

この操作 R で A が不変とすると　$A' = A$

つまり　$RAR^{-1} = A$　　つまり

◎　　　$= 0$　（ハミルトニアン H の）対称性　（A の時間発展は $i\hbar\dot{A} = [A, H]$）

保存量，（エネルギー）縮退，同時対角化，…

例 1.　$H = \frac{1}{2m}\vec{p}^2 + V(r)$　球対称ポテンシャル　ex. 水素原子 $V(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{-e^2}{r}$

空間回転で不変 ⤳

角運動量 ⟶

例2　分子, 結晶

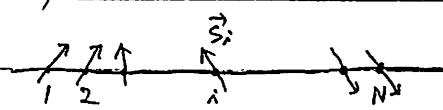
原子配置を不変に保つ対称操作 ⤳

例3.　周期ポテンシャル

$[H, \qquad\qquad]=0$ ⤳

$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$, $u_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{T}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$　　Blochの定理

例4　スピン鎖



Heisenberg模型

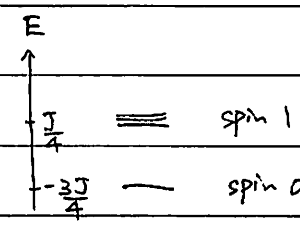
$$H = J\sum_{i=1}^{N} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \qquad \vec{S}_i : \text{スピン } s$$

$[H, \quad]=0$

ex.　$s=\frac{1}{2}$　$\vec{S}_i = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$

e.g.　$N=2$　$H = \frac{J}{4}\begin{array}{cccc} \uparrow\uparrow & \uparrow\downarrow & \downarrow\uparrow & \downarrow\downarrow \end{array}$
$$\frac{J}{4}\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & 2 & \\ & 2 & -1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

$J>0$
antiferro



$N=3, 4$ では？

例5　quark flavour　SU(3)　（近似）
香り

u, d, s　　$p=uud$　　$n=udd$　　$\pi^+ = u\bar{d}$

例6　ゲージ理論　　gauge群

電磁相互作用　QED

弱い　〃　(QFD)

強い　〃　QCD

標準模型　$SU(3)_c \times SU(2)_L \times U(1)_Y$

◎ Key word

,　　(　　　)

,

◎古典力学

・運動方程式　$m\ddot{\vec{r}}=\vec{f}$

運動量　$\vec{p}=$　　　$\dot{\vec{p}}=\vec{f}$　　　$\vec{f}=\vec{0}\Rightarrow\vec{p}$ 保存（$\vec{f}$ のある成分 $=0\Rightarrow\vec{p}$ のその成分保存）

角運動量　$\vec{L}=$　　　$\dot{\vec{L}}=\vec{r}\times\vec{f}\equiv\vec{N}$　　　$\vec{N}=\vec{0}\Rightarrow\vec{L}$ 〃（$\vec{N}$ 〃　　$\vec{L}$ 〃　）

保存力　$\vec{f}=$

エネルギー　$E=$　　　　　　保存

・保存則　⟵〜〜　対称性

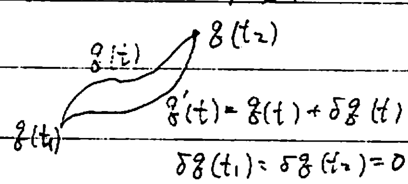
運動量 保存　　　　　　の一様性

角運動量 〃　　　　　　の等方性

エネルギー 〃　　　　　の一様性

・作用　$S=\int_{t_1}^{t_2}L(q,\dot{q},t)\,dt$　　Lagrangian　$L=\frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}^2-U(\vec{r})$ など

・（端を固定して）変分



$$\delta S=\int_{t_1}^{t_2}L(q',\dot{q}',t)\,dt-\int_{t_1}^{t_2}L(q,\dot{q},t)\,dt$$

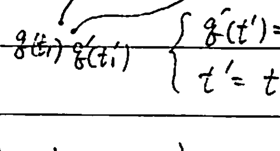
$$=\int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial q}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}\right)\delta q\,dt$$

☺〜〃

最小作用の原理　$\delta S=0$　⤳　　　　　　$=0$

運動方程式　Euler-Lagrange eq.

・（一般の）変分



$$\begin{cases}q'(t')=q(t)+\Delta q(t)\\ t'=t+\delta t\end{cases}$$

$$\delta S=\int_{t_1'}^{t_2'}L(q'(t'),\dot{q}'(t'),t')\,dt'-\int_{t_1}^{t_2}L(q(t),\dot{q}(t),t)\,dt$$

$$=\int_{t_1}^{t_2}\left(\left(\frac{\partial L}{\partial q}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}\right)\delta q+\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}\delta q+L\delta t\right)\right)dt$$

但し $\delta q(t)=q'(t)-q(t)$　☺〜〃

・Noetherの定理

$\begin{cases}q'(t')=q(t)+\Delta q(t)\\ t'=t+\delta t\end{cases}$ と変化させたときに 作用が不変

つまり $\delta S=0$

⟹（運動方程式の下で）保存則　$\frac{d}{dt}Ⓗ=0$

ここで $\Theta =$ $\qquad\qquad$, $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$, $H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L$

☺ ～～//

(注) $\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \frac{dF(q)}{dt} dt = F(q(t_2)) - F(q(t_1)) \Rightarrow \frac{d}{dt}(\Theta - F) = 0$ （$\dot{q}$によらない）

例1 $L = L(q, \dot{q})$

時間の平行移動 $t' = t + \varepsilon$ で不変 $\delta L = 0$ $\quad \therefore \delta S = 0$

$\Theta =$ $\qquad\qquad$ エネルギー保存

例2. $L = \sum_i \frac{1}{2} m_i \dot{\vec{r}}_i^{\,2} - \sum_{i \neq j} V_{ij}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$

空間の平行移動 $\vec{r}_i{}' = \vec{r}_i + \vec{\varepsilon}$ で不変 $\delta L = 0$ $\quad \therefore \delta S = 0$

$\Theta =$ $\qquad\qquad$ $\vec{P} = \sum_i m_i \dot{\vec{r}}_i$ $\quad$ 運動量保存

例3. $L = \sum_i \frac{1}{2} m_i \dot{\vec{r}}_i^{\,2} - \sum_{i \neq j} V_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$

空間の回転 $\vec{r}_i{}' = \vec{r}_i + \vec{\varepsilon} \times \vec{r}_i$ で不変 $\delta L = 0$ $\quad \therefore \delta S = 0$

$\Theta =$ $\qquad\qquad$ $\vec{L} = \sum_i \vec{r}_i \times m_i \dot{\vec{r}}_i$ $\quad$ 角運動量保存

☺ ～～//

◎ 指数関数

$M(N:\mathbb{C}) = \{N \times N \text{ 複素行列}\} \ni A = (a_{ij}) \longleftrightarrow \begin{pmatrix} a_{11} \\ \vdots \\ a_{NN} \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{N^2}$

ノルム $\|A\| = \sqrt{\sum_{i,j} |a_{ij}|^2}$

・ $\exp z = e^z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} z^n \quad (\forall z \in \mathbb{C})$, $\log(1+z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n} z^n \quad (|z| < 1)$

をまねて、$A \in M(N:\mathbb{C})$ に対し

$\exp A = e^A =$ $\qquad\qquad$ $(\forall A)$, $\log(1 + A) =$ $\qquad\qquad$ $(\|A\| < 1)$ （1 は E）

と定義する.

・ $\log e^A = A \quad (\|A\| < \log 2)$ $\qquad e^{\log A} = A \quad (\|A - E\| < 1)$

$AB = BA \Rightarrow e^{A+B} = e^A e^B$

$(e^A)^{-1} = e^{-A}$, ${}^t(e^A) = e^{{}^tA}$, $(e^A)^\dagger = e^{A^\dagger}$

$P^{-1} e^A P = e^{P^{-1}AP}$, $\det e^A = e^{\mathrm{tr} A}$ $\qquad$ ☺ ～～//

・ $\frac{d}{dt} e^{tA} = \quad = \quad$ ☺ 項別微分 //

$e^A B e^{-A} = \quad = \quad$ ここで $(\mathrm{ad} A)B = [A, B]$, $(\mathrm{ad} A)^0 B = B$

☺ $A \to tA$ $f(t) =$ $g(t) =$

$\begin{cases} f' = \\ f(0) = \end{cases}$ $\begin{cases} g' = \\ g(0) = \end{cases}$ //

◎ 量子化 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

座標を対角化する表示で $x \rightsquigarrow \hat{x} =$

$p \rightsquigarrow \hat{p} =$

$\hat{x}\hat{p} \neq \hat{p}\hat{x}$ なので対称化

・ H : 時間推進の生成元

Schrödinger 方程式 $i\hbar \partial_t \psi(\vec{x}, t) = \hat{H} \psi(\vec{x}, t)$

$e^{-\frac{i}{\hbar}\tau \hat{H}} \psi(\vec{x}, t) =$ ☺ 〜 //

* Schrödinger 表示。Heisenberg 表示なら $e^{-\frac{i}{\hbar}\tau \hat{H}} \psi(\vec{x}, t) e^{\frac{i}{\hbar}\tau \hat{H}} = \psi(\vec{x}, t+\tau)$

・ $\vec{p}$: 並進の生成元 $\hat{p}_j = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}$ $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$

$e^{\frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\vec{p}} \psi(\vec{x}, t) =$ H. rep. なら $e^{\frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\hat{\vec{p}}} \psi(\vec{x}, t) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\hat{\vec{p}}} = \psi(\vec{x}+\vec{a}, t)$

☺ 一次元で 左辺 $= e^{a\partial} \psi(x) = \quad = \quad = \psi(x+a)$ //

別) 左辺 $= e^{a\partial} \psi(\hat{x}) e^{-a\partial} \cdot 1$ a

$e^{a\partial} x e^{-a\partial} = \quad = x + a$

$e^{a\partial} x^n e^{-a\partial} = \quad = (x+a)^n$

$= \psi(x+a)$ //

三次元で 〜 //

・ $\vec{L}$: 回転の生成元

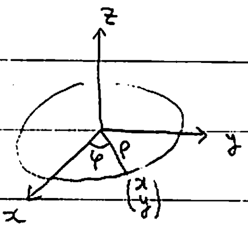
$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \rightsquigarrow \hat{\vec{L}} = \frac{1}{2}(\vec{r} \times \vec{p} - \vec{p} \times \vec{r}) = \vec{r} \times \vec{p}$ ☺ 〜 //

$[L_i, L_j] =$ ☺ 〜 //

$\sqrt{-1}$ $\sum_k$ Einstein の規約

$e^{\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z}\,\psi(\vec{x}) =$ $\qquad \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \qquad z' = z$

☺



$\begin{cases} x = \rho\cos\varphi \\ y = \rho\sin\varphi \end{cases}$

$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$ (∵) 〰 //

$$e^{\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z}\psi(\vec{x}) = e^{\theta\partial_\varphi}\,\psi\left(\begin{pmatrix}\rho\cos\varphi \\ \rho\sin\varphi \\ z\end{pmatrix}\right) = \psi\left(\begin{pmatrix}\rho\cos(\varphi+\theta) \\ \rho\sin(\varphi+\theta) \\ z\end{pmatrix}\right) = \psi(\vec{x}') \quad //$$

別 $e^{\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = e^{\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z}\begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z}\cdot 1$

$$= \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \underbrace{\left[\tfrac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z,\ \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix}\right]} + \frac{1}{2!}\underbrace{\left[\tfrac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z,\qquad\qquad\right]} + \cdots$$

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

$J^2 = -1$

$$= (1 + \qquad\qquad\qquad\qquad)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

$$= \qquad \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \qquad (∵)\ 〰 //$$

$$= \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z}\, x^n y^m = e^{\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z}\,\hat{x}^n\hat{y}^m\, e^{-\frac{i}{\hbar}\theta L_z}\cdot 1 = (e^{\cdots} x\, e^{-\cdots})^n (e^{\cdots} y\, e^{-\cdots})^m = x'^n y'^m \quad //$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\theta}\cdot\hat{\vec{L}}}\,\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}') \qquad \vec{x}' = e^{-A}\,\vec{x} \qquad A = (\omega_{ij}) \qquad \omega_{ij} = \varepsilon_{ijk}\theta_k$$

☺ 〰 //

◎ 指数関数 (続き)

∘ $\frac{d}{dt}e^{tA} =$

$\frac{d}{dx}e^{A(x)} =$

$=$

☺ 〰 //

∘ $e^{a\frac{d}{dx}}\, f(x) =$

$e^{ax\frac{d}{dx}}\, f(x) =$

$e^{\frac{1}{2}a\left(\frac{d}{dx}\right)^2} f(x) = \qquad\qquad (a>0)$

☺ 〰 //

・ (Campbell-Baker-) Hausdorff の公式

$$e^A e^B = e^C$$

$$C = \sum_{m\geq 1} \sum_{\substack{p_1,\cdots,p_m\geq 0\\ q_1,\cdots,q_m\geq 0\\ p_i+q_i\geq 1}} \frac{(-1)^{m-1}}{m} \frac{1}{\prod_{i=1}^{m} p_i!\,q_i!} \frac{1}{\sum_{i=1}^{m}(p_i+q_i)} (\mathrm{ad}A)^{p_1}(\mathrm{ad}B)^{q_1}\cdots(\mathrm{ad}A)^{p_{m-1}}(\mathrm{ad}B)^{q_{m-1}}$$

$$\times\left(\delta_{q_m 0}\delta_{p_m 1} A + \delta_{q_m 1}(\mathrm{ad}A)^{p_m} B\right)$$

$$= A + B + \qquad + \left(\qquad ; \right) + \cdots$$

[,] で書ける

☺ 〰 //

$[[A,B], \overset{A}{B}] = 0 \quad\Rightarrow\quad e^A e^B =$

例えば [A, B] = c 数

☺ 〰 //

§2 有限群

§2-1 群

◎ Def. 集合Gに積（$\forall a, b \in G$ に対して $c \in G$ を対応させる規則, $c = ab$ と書こう）が定義されている時に

Gが群 $\iff$ $\begin{cases} \text{(i) (結合法則)} \\ \text{(ii) (単位元)} \quad \exists e, \forall a, \\ \text{(iii) (逆元)} \quad \forall a, \exists x, \end{cases}$ $x = a^{-1}$ と書く.

更に $ab = ba$ が成立する時 可換群 という. Abel群 （$a+b$, 0, $-a$ とも書く）

$|G|$ 位数

◦ 例)

	積	単位元	逆元	位数
・$\mathbb{R}$ = {実数}				
・$\mathbb{R}^\times$ = {0でない実数}				
・$GL(n;\mathbb{R})$ = {n次実正則行列}				
・S_n = {n文字の置換}				

n次対称群
置換群

$\sigma = \{1, 2, \cdots, n\} \to \{1, 2, \cdots, n\}$ 1対1写像

$i \mapsto \sigma(i)$

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ \sigma(1) & \sigma(2) & \cdots & \sigma(n) \end{pmatrix}$$

$\sigma\tau = \sigma \circ \tau$, $\sigma^{-1} = \begin{pmatrix} \sigma(1) & \sigma(2) & \cdots & \sigma(n) \\ 1 & 2 & \cdots & n \end{pmatrix}$, $1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ 1 & 2 & \cdots & n \end{pmatrix}$

ex. $\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}$ $\tau = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}$

$\sigma\tau$ $\begin{array}{cccl} 1 & 2 & 3 & \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \tau \\ 2 & 1 & 3 & \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \sigma \\ 3 & 2 & 1 & \end{array}$ $\sigma\tau = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$ $\sigma^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}$

◦ 群 $\begin{cases} \text{有限群} \\ \text{無限群} \begin{cases} \text{離散群} \\ \text{連続群} \begin{cases} \text{Lie群} \begin{cases} \text{有限次元} \\ \text{無限次元} \end{cases} \\ \end{cases} \end{cases} \end{cases}$

量子群

・基本的性質

・e, a^{-1} は一意的 ☺ ~ //

・乗積表 xy

$x \backslash y$	e	a	b	$\cdots$
e				
a				
b				
$\vdots$				

群表 ← 全ての情報

・群表の各行，各列には同じ元は現れない。 ☺

	b	c
a	d	d

$ab=ac$ ∴ $b=c$ 矛盾//

◎例

・例1 $|G|=1$

$G=\{e\}$

	e
e	

・例2 $|G|=2$

・$G_1=\{0,1\}=\mathbb{Z}_2$ 2を法とする剰余類

積は加法

	0	1
0		
1		

・$G_2=\{1,-1\}$ 2次巡回群

	1	-1
1		
-1		

・$G_3=\{1,P\}$ 空間反転 $P\vec{r}=-\vec{r}$

$1\vec{r}=\vec{r}$

	1	P
1		
P		

・$G_4=\{1,(12)\}=S_2$

	1	(12)
1		
(12)		

G_1	G_2	G_3	G_4
0	1	1	1
1	-1	P	(12)

積の規則が同じである。

群として同じもの。 同型 $G_1\cong G_2\cong G_3\cong G_4$

一般に Def 群 G, G' が同型 ($G\cong G'$ と書く)

$\Longleftrightarrow$ $\exists f: G \to G'$ 上への1対1 (同型写像)

$a \mapsto f(a)$ s.t. $f(ab)=f(a)f(b)$ ┘

・位数2の群 $G=\{e,a\}$

	e	a
e		
a		

(同型を除いて) 1つ

・G_3の例

$H=\frac{1}{2m}\vec{p}^{\,2}+V(\vec{r})$　　偶ポテンシャル　$V(\vec{r})=V(-\vec{r})$

$=0$ ⇝ 同時対角化可能

$=1$ ⇝ 固有値は± 1

$\psi(\vec{r},t)$が解　つまり　$i\hbar\partial_t\psi(\vec{r},t)=H\psi(\vec{r},t)$

⇒ $\psi_\pm(\vec{r},t)=\frac{1}{2}(1\pm P)\psi(\vec{r},t)=\frac{1}{2}(\psi(\vec{r},t)\pm\psi(-\vec{r},t))$ も解（0かもしれない）

☺ $i\hbar\partial_t P\psi(\vec{r},t)=P\cdot i\hbar\partial_t\psi(\vec{r},t)=P\cdot H\psi(\vec{r},t)=HP\psi(\vec{r},t)$

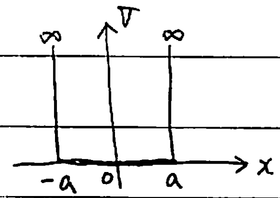
つまり　$i\hbar\partial_t\psi(-\vec{r},t)=H\psi(-\vec{r},t)$ //

$P\psi_\pm(\vec{r},t)=\pm\psi_\pm(\vec{r},t)$　偶関数 / 奇 〃

ex.　$H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$　　$H\psi=E\psi$　　束縛状態

(注) 一次元では束縛状態に縮退がない。 ☺ 〜〜 //

(1)

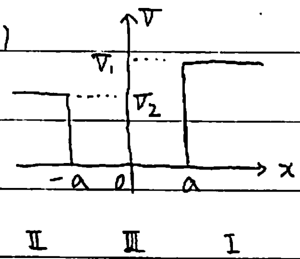


$E_n=\frac{\hbar^2k_n^2}{2m}$　　$k_n=\frac{\pi}{2a}n$　$(n=1,2,\cdots)$

$\psi_{2n-1}=$

$\psi_{2n}=$　　☺ 〜〜 //

(2)



$0\le E<V_2\le V_1$ の場合

$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$,　$V_1=\frac{\hbar^2k_I^2}{2m}$,　$V_2=\frac{\hbar^2k_{II}^2}{2m}$　　$0\le k<k_{II}<k_I$

$$\begin{cases}\psi_I(x)= & (a<x)\\ \psi_{III}(x)= & (-a\le x\le a)\\ \psi_{II}(x)= & (x\le -a)\end{cases}$$

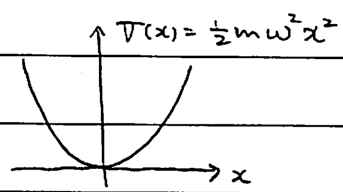
ちょっと面倒。

$V_1=V_2$のときは、ψとして

$$\begin{cases}\text{偶関数}\ (\quad,\quad) & \to\ \tan ka=\frac{\sqrt{k_I^2-k^2}}{k}\\ \text{奇関数}\ (\quad,\quad) & \to\ \cot ka=-\frac{\sqrt{k_I^2-k^2}}{k}\end{cases}$$

のみを考えれば良いので大分楽になる。　☺ 〜〜 //

(3)



$E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$

$\psi_n(x)=$　　　$\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$

・G_4の例

2粒子 $\vec{r}_1, \vec{r}_2$ $\quad (12)\vec{r}_1 = \vec{r}_2 \quad (12)\vec{r}_2 = \vec{r}_1$

$\psi = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2)$

$\psi_\pm = \frac{1}{2}(1 \pm (12))\psi = \frac{1}{2}(\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) \pm \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1))$

粒子の入れ替えで $\begin{cases} \text{対称} & \text{Bose 統計} \\ \text{反対称} & \text{Fermi 統計} \end{cases}$

$\psi_- = \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_1) \\ \psi_1(\vec{r}_2) & \psi_2(\vec{r}_2) \end{vmatrix}$ Slater 行列式

◦例3 $|G| = 3$

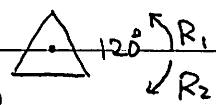
・$G_1 = \{0, 1, 2\} = \mathbb{Z}_3$ 3を法とする剰余類
積は加法

	0	1	2
0			
1			
2			

・$G_2 = \{1, \omega, \omega^2\}$ $\omega = e^{2\pi i/3}$ 3次巡回群

	1	ω	ω^2
1			
ω			
ω^2			

・$G_3 = \{1, R_1, R_2\} = C_3$
正三角形の合同変換(回転のみ)



	1	R_1	R_2
1			
R_1			
R_2			

G_1		G_2		G_3
0		1		1
1	$\leftrightarrow$	ω	$\leftrightarrow$	R_1
2		ω^2		R_2

$G_1 \cong G_2 \cong G_3$

・位数3の群 $G = \{e, a, b\}$

	e	a	b
e			
a			
b			

1つ ☺ 〜 //

◦例4

・$G_1 = \{0, 1, \cdots, n-1\} = \mathbb{Z}_n$ nを法とする剰余類 加法

・$G_2 = \{1, \omega, \cdots, \omega^{n-1}\}$ $\omega = e^{2\pi i/n}$ n次巡回群

$G_1 \cong G_2$

$k \leftrightarrow \omega^k$

◦例5 位数4の群 $G=\{e, a, b, c\}$

G_1	e	a	b	c
e				
a				
b				
c				

と

G_2	e	a	b	c
e				
a				
b				
c				

の2つ

$G_1 \cong \mathbb{Z}_4$

e 　 0
$a \leftrightarrow 1$
b 　 2
c 　 3

$G_2 \cong \mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$

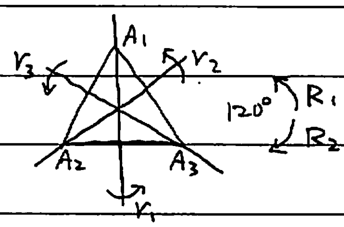
e 　 $(0,0)$
$a \leftrightarrow (1,0)$
b 　 $(0,1)$
c 　 $(1,1)$

一般に Def. 群 G_1, G_2 の直積 $G_1 \times G_2 = \{(a_1, a_2) \mid a_i \in G_i\}$ は
積 $(a_1, a_2)\cdot(b_1, b_2) = (a_1b_1, a_2b_2)$ で群。直積群という。

◦例6

$G = \{$正三角形板の合同変換$\}$
$= \{1, R_1, R_2, r_1, r_2, r_3\}$

回転と思っているとき D_3
鏡映 〃 C_{3v}



	1	R_1	R_2	r_1	r_2	r_3
1	1	R_1	R_2	r_1	r_2	r_3
R_1	R_1	R_2	1	r_3	r_1	r_2
R_2	R_2	1	R_1	r_2	r_3	r_1
r_1	r_1	r_2	r_3	1	R_1	R_2
r_2	r_2	r_3	r_1	R_2	1	R_1
r_3	r_3	r_1	r_2	R_1	R_2	1

$ab \neq ba$ 非可換

C_3がすっぽり入っている

$D_3 \supset C_3 \cong \mathbb{Z}_3$ 部分群

$D_3 \supset \{1, r_1\} \cong \mathbb{Z}_2$
$\{1, r_2\}$
$\{1, r_3\}$

一般に Def. 群Gの部分集合Hが、Gにおける積について群になっているとき、
HをGの部分群という。

・群 $G \supset H$ のとき Hが部分群 $\Leftrightarrow \begin{cases} a, b \in H \Rightarrow ab \in H \\ a \in H \Rightarrow a^{-1} \in H \end{cases}$

・群 $G \supset H$, $|H| < \infty$ のとき (eg. 有限群 G)
Hが部分群 $\Leftrightarrow$ 「$a, b \in H \Rightarrow ab \in H$」

◦例7 $G = \{3$文字の置換$\} = S_3$

$\begin{pmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{pmatrix} = 1$

$\begin{pmatrix}1&2&3\\1&3&2\end{pmatrix} = (23) = \tau_1$

$\begin{pmatrix}1&2&3\\2&1&3\end{pmatrix} = (12) = \tau_3$

$\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix} = (123) = \sigma_1$

$\begin{pmatrix}1&2&3\\3&1&2\end{pmatrix} = (132) = \sigma_2$

$\begin{pmatrix}1&2&3\\3&2&1\end{pmatrix} = (13) = \tau_2$

	1	σ_1	σ_2	τ_1	τ_2	τ_3
1	1	σ_1	σ_2	τ_1	τ_2	τ_3
σ_1	σ_1	σ_2	1	τ_3	τ_1	τ_2
σ_2	σ_2	1	σ_1	τ_2	τ_3	τ_1
τ_1	τ_1	τ_2	τ_3	1	σ_1	σ_2
τ_2	τ_2	τ_3	τ_1	σ_2	1	σ_1
τ_3	τ_3	τ_1	τ_2	σ_1	σ_2	1

S_3	$\cong$	D_3
1		1
σ_1		R_1
σ_2	$\longleftrightarrow$	R_2
τ_1		r_1
τ_2		r_2
τ_3		r_3

◦例8　$G=\langle a\rangle$　巡回群

一般に　$G\supset S$（部分集合）　$\langle S\rangle=$ Sを含む全ての部分群の共通部分

$=$ Sを含む最小の部分群

$=\{a_1^{n_1}a_2^{n_2}\cdots a_r^{n_r}\mid a_i\in S,\ n_i\in\mathbb{Z},\ r=0,1,2,\cdots\}$

：Sから生成された部分群

$S=\{a_1,\cdots,a_n\}$のとき　$\langle S\rangle=\langle a_1,\cdots,a_n\rangle$とも書く。　有限生成　┘

$\langle a\rangle$　$a^N=e$となる自然数Nが存在する時（$n=\min N$ ← aの位数）　$\langle a\rangle=\{e,a,a^2,\cdots,a^{n-1}\}\cong\mathbb{Z}_n$

〃　　しない時　$\langle a\rangle=\{\cdots,a^{-1},e,a,a^2,\cdots\}\cong\mathbb{Z}$

◎ Def.　集合Sに関係$\sim$があって，「$a,b\in S\Rightarrow a\sim b$ 又は $a\not\sim b$」とする.

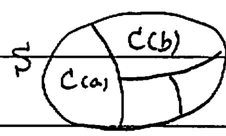
$\sim$：同値関係 $\Longleftrightarrow$
$$\begin{cases}(\text{反射律}) & a\sim a\\ (\text{対称律}) & a\sim b\Rightarrow b\sim a\\ (\text{推移律}) & a\sim b,\ b\sim c\Rightarrow a\sim c\end{cases}$$
〃

ex　三角形の相似

$C(a)=\{x\in S\mid x\sim a\}$　aを含む同値類

Sは同値類で類別できる.

↑共通元を持たない部分集合に分ける.



$S=C(a)+C(b)+\cdots$と書く.

◦　$G\supset H$ 部分群　$G\ni a,b$

Hを法とする左合同「$a\equiv b\Longleftrightarrow{}^{\exists}h\in H,\ b=ah$」は同値関係 ⊙〃

同値類　$aH=\{ah\mid h\in H\}$　左剰余類　その全体を G/H

$G=a_1H+a_2H+\cdots$

右合同　$a\equiv b\Longleftrightarrow{}^{\exists}h\in H,\ b=ha$

$G=Hb_1+Hb_2+\cdots$　右剰余類　その全体を $H\backslash G$

・Prop. $|G/H| = |H\backslash G| \overset{def}{=} [G:H]$ Gにおける Hの指数

$|G| = [G:H]\,|H|$ ⊙ ～～ //

・例

・$\mathbb{Z}_4 = \{1, \omega, \omega^2, \omega^3\}$ $\omega = e^{2\pi i/4} = i$ $\mathbb{Z}_4 \supset \mathbb{Z}_2 = \{1, \omega^2\}$ 部分群

左 $\mathbb{Z}_4 = \mathbb{Z}_2 + \omega\mathbb{Z}_2 = \mathbb{Z}_2 + \omega^3\mathbb{Z}_2$ 表し方は一意ではない

右 $\mathbb{Z}_4 = \mathbb{Z}_2 + \mathbb{Z}_2\omega$ 可換群なので $\omega\mathbb{Z}_2 = \mathbb{Z}_2\omega$

・$S_3 = \{1, \sigma_1, \sigma_2, \tau_1, \tau_2, \tau_3\}$

$S_3 \supset \mathbb{Z}_3 = \{1, \sigma_1, \sigma_2\}$ 部分群

左 $S_3 = \mathbb{Z}_3 + \tau_1\mathbb{Z}_3 = \mathbb{Z}_3 + \tau_2\mathbb{Z}_3 = \mathbb{Z}_3 + \tau_3\mathbb{Z}_3$ 表し方は一意ではない

右 $S_3 = \mathbb{Z}_3 + \mathbb{Z}_3\tau_1$ 運よく $\tau_1\mathbb{Z}_3 = \mathbb{Z}_3\tau_1$

$S_3 \supset \mathbb{Z}_2 = \{1, \tau_1\}$ 部分群

左 $S_3 = \mathbb{Z}_2 + \tau_2\mathbb{Z}_2 + \tau_3\mathbb{Z}_2 = \mathbb{Z}_2 + \sigma_1\mathbb{Z}_2 + \sigma_2\mathbb{Z}_2$ 表し方は一意ではない

右 $S_3 = \mathbb{Z}_2 + \mathbb{Z}_2\tau_2 + \mathbb{Z}_2\tau_3$ $\mathbb{Z}_2\tau_2 \neq \tau_2\mathbb{Z}_2, \tau_3\mathbb{Z}_2, \sigma_1\mathbb{Z}_2, \sigma_2\mathbb{Z}_2$

右と左はいつ一致 → No 2-1-8

・Def $G \ni a, b$ が共役 $\Leftrightarrow$ ${}^{\exists}g \in G$ $b = gag^{-1}$ //

は同値関係なので、同値類 $C(a) = \{gag^{-1} \mid g \in G\}$ 共役類 で類別できる。 $G = C(a_1) + C(a_2) + \cdots$

・例

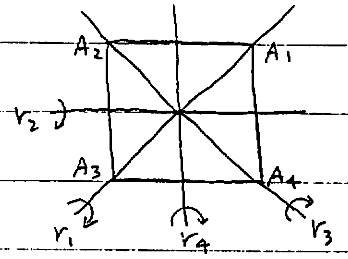
・$\mathbb{Z}_n = \langle a \rangle = \{e, a, \cdots, a^{n-1}\} =$

・$S_3 = \{1, \sigma_1, \sigma_2, \tau_1, \tau_2, \tau_3\} =$

・$D_3 = \{1, R_1, R_2, r_1, r_2, r_3\} =$

・$D_4 = \{$正方形の合同変換$\} = \{1, R_1, R_2, R_3, r_1, r_2, r_3, r_4\}$

180° 回転



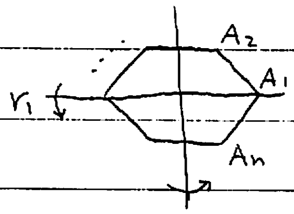
90° R_1　180° R_2　270° R_3

群表をつくれ

$D_4 =$

・$D_n = \{$正n角形の合同変換$\} = \{1, R_1, R_2, \cdots, R_{n-1}, r_1, r_2, \cdots, r_n\}$

π回転



$\frac{2\pi}{n}k$ R_k

$a = R_1 \quad b = r_1$

$a^n = 1, \quad b^2 = 1, \quad bab = a^{-1}$

$D_n =$　　　$a^n = b^2 = 1, \quad bab = a^{-1}$　二面体群

$=$

n奇数　$D_n = \{1\} + \{a, a^{n-1}\} + \cdots + \{a^{\frac{n-1}{2}}, a^{\frac{n+1}{2}}\} + \{b, ba, \cdots, ba^{n-1}\}$

n偶数　$D_n = \{1\} + \{a, a^{n-1}\} + \cdots + \{a^{\frac{n-2}{2}}, a^{\frac{n+2}{2}}\} + \{a^{\frac{n}{2}}\} + \{b, ba^2, \cdots, ba^{n-2}\} + \{ba, ba^3, \cdots, ba^{n-1}\}$

◎ Def　$G \supset H$ 部分群

H: Gの正規部分群 $\Longleftrightarrow$ $aH = Ha \quad (\forall a \in G)$ 〃

不変 〃

$G \triangleright H$ と書く。このHに対して 左剰余類 = 右剰余類

・例

・$G \triangleright \{e\}$, $G \triangleright G$　自明

・$S_3 \triangleright \mathbb{Z}_3 = \{1, \sigma_1, \sigma_2\}$

・$S_n \triangleright A_n = \{$偶置換$\}$ 交代群　$|A_n| = \frac{1}{2}n!$

・$D_n \triangleright \langle a \rangle = \{1, a, \cdots, a^{n-1}\}$

・$GL(n:\mathbb{R}) \triangleright SL(n:\mathbb{R})$

・$G \triangleright H$　G/H に積を入れる。

$A.B$　$A = aH$, $B = bH$　$AB = abH$　代表元の取り方によらない ☺〜〃

$[a]$　$[b]$　$[a][b] = [ab]$

G/H は群になる。 剰余群, 因子群, 商群 ☺〜〃

単位元 H, aH の逆元 $a^{-1}H$

例) ・ $\mathbb{Z} \triangleright n\mathbb{Z}$ 積は加法

$\mathbb{Z}/n\mathbb{Z} = n\mathbb{Z} + 1 \circ n\mathbb{Z} + \cdots + (n-1) \circ n\mathbb{Z}$

$A_i =$ $A_i \circ A_j =$, ,

$\mathbb{Z}/n\mathbb{Z} \cong$

・ $S_3 \triangleright \mathbb{Z}_3 = \{1, \sigma_1, \sigma_2\}$

$S_3/\mathbb{Z}_3 = \mathbb{Z}_3 + \tau_1 \mathbb{Z}_3$ $E = \mathbb{Z}_3 = \sigma_1 \mathbb{Z}_3 = \sigma_2 \mathbb{Z}_3$ $A = \tau_1 \mathbb{Z}_3 = \tau_2 \mathbb{Z}_3 = \tau_3 \mathbb{Z}_3$

$= [1] = [\sigma_1] = [\sigma_2]$ $= [\tau_1] = [\tau_2] = [\tau_3]$

	E	A
E		
A		

$S_3/\mathbb{Z}_3 \cong$

・Def G : 単純 $\Longleftrightarrow$ $\{e\}$, G 以外に正規部分群がない

Thm A_n $(n \geqq 5)$ は単純 ☺〜〃

(注) 5次以上の解の公式が存在しない.

Thm 有限単純群は次のいずれかに同型
(1981)

(1) 巡回群 $\mathbb{Z}_p$ (p:素数)

(2) 交代群 A_n $(n \geqq 5)$

(3) Lie 型の単純群

(4) 散在型単純群

(注) (4) は 26個。

一番大きいのは Fisher - Griess の Monster

$|G| = 2^{46} \cdot 3^{20} \cdot 5^{9} \cdot 7^{6} \cdot 11^{2} \cdot 13^{3} \cdot 17 \cdot 19 \cdot 23 \cdot 29 \cdot 31 \cdot 41 \cdot 47 \cdot 59 \cdot 71 = 8.\cdots \times 10^{54}$

◎ 群の演算を保つ対応

Def. 群 G, G'

$f: G \to G'$ が GからG'への準同型写像 $\Leftrightarrow$ $\vdots$ $(\forall a, b \in G)$

homomorphism

上への写像のとき G'はGに準同型 $G \sim G'$

上への1対1写像のとき GとG'は同型 $G \cong G'$ //

- G'の単位元 $e' = f(e)$, $f(a)$の逆元 $f(a)^{-1} = f(a^{-1})$, $f(G)$は群 ☺~//

Prop. $f: G \to G'$ 上への準同型

$G \supset H$ (正規)部分群 $\Rightarrow$ $G' \supset f(H)$ (正規)部分群

$G' \supset H'$ 〃 $\Rightarrow$ $G \supset f^{-1}(H')$ 〃 ☺~//

ここで $f(H) = \{f(a) \mid a \in H\}$ 像 $f^{-1}(H') = \{a \in G \mid f(a) \in H'\}$ 原像

fの核 $\mathrm{Ker} f = f^{-1}(e') = \{a \in G \mid f(a) = e'\}$ $G \triangleright \mathrm{Ker} f$ ☺~//

- $G \triangleright H$ $f: G \to G/H$ は上への準同型 ☺~//

$a \mapsto aH$ 自然写像, 標準写像 $\mathrm{Ker} f = H$

Thm (準同型定理)

$f: G \to G'$ 上への準同型 $K = \mathrm{Ker} f$ $(\Rightarrow G \triangleright K)$

$\Rightarrow$ $\bar{f}: G/K \to G'$ は同型写像 つまり

$aK \to f(a)$ ☺~//

例) • $f: S_3 \to \mathbb{Z}_2$

$S_3 = \{1, \sigma_1, \sigma_2, \tau_1, \tau_2, \tau_3\}$, $\mathbb{Z}_2 = \{1, P\}$

a	1	σ_1	σ_2	τ_1	τ_2	τ_3
$f(a)$						

$\mathrm{Ker} f = \{1, \sigma_1, \sigma_2\} = \mathbb{Z}_3$ $S_3 \triangleright \mathbb{Z}_3$ $S_3/\mathbb{Z}_3 = \mathbb{Z}_3 + \tau_1\mathbb{Z}_3 = [1] + [\tau_1]$

A	$[1]$	$[\tau_1]$
$\bar{f}(A)$		

$S_3/\mathbb{Z}_3 \cong$

- $f: \mathbb{Z} \to \mathbb{Z}_n = \{0, 1, \cdots, n-1\}$ 積は加法 $f(a) =$

$\mathrm{Ker} f = \{n$の倍数$\} = n\mathbb{Z}$, $\mathbb{Z} \triangleright n\mathbb{Z}$ $\mathbb{Z}/n\mathbb{Z} = A_0 + \cdots + A_{n-1}$ $A_i = \{n$で割ってi余る$\}$

$\bar{f}(A_i) =$ $\mathbb{Z}/n\mathbb{Z} \cong$

Thm (第1同型定理)

$f: G \to G'$ 上への準同型, $G' \triangleright N'$, $N = f^{-1}(N')$ $(\Rightarrow G \triangleright N)$

$\Rightarrow G/N \cong G'/N'$ ☺ ～～ //

Thm (第2同型定理)

$G > H$ 部分群, $G \triangleright N$ $(\Rightarrow H \triangleright H \cap N,\ G > HN$ 部分群$)$

$HN = \{hn \mid h \in H, n \in N\}$

$\Rightarrow HN/N \cong H/H \cap N$ ☺ ～～ //

◎ 可換群

Thm (Abel群の基本定理)

G: 有限生成Abel群 $\Rightarrow G \cong \mathbb{Z} \oplus \cdots \oplus \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z}_{n_1} \oplus \cdots \oplus \mathbb{Z}_{n_e}$

§2-2 表現

群 抽象的である。具体的にしたい。

$\rightsquigarrow$ 行列に対応させる：表現。　物理には群は表現として現れる。

◎ Def 群 G の表現 (ρ, V)

$\rho : G \to GL(V)$ 準同型　　V：$\mathbb{C}$ 上の線型空間　表現空間という

$a \mapsto A = \rho(a)$　　$GL(V) = \{V$ の正則線型変換$\}$：一般線型群

$\dim V$ を表現の次元という。ρ が1対1のとき忠実な表現という。//

◦ 基底を決めて成分で書こう。

・V の基底 $|i\rangle$ $(i = 1, \cdots, n)$

$|x\rangle = \qquad = \qquad = (|1\rangle \cdots |n\rangle)\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \longleftrightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^n$　$\therefore V \cong \mathbb{C}^n$

ベクトル空間の同型

・$GL(V) \ni \underset{\mathrm{End}(V)}{A}$　　$A|j\rangle = \qquad$　$\therefore A \longleftrightarrow A = (A_{ij})$

$A|x\rangle = \qquad =$

$= |y\rangle = \sum_i |i\rangle y_i$　　$\therefore y_i = \sum_j A_{ij} x_j$　　$\vec{y} = A\vec{x}$

$AB|j\rangle = A\sum_k |k\rangle B_{kj} = \sum_{ik} |i\rangle A_{ik} B_{kj} = \sum_i |i\rangle (AB)_{ij}$　$\therefore AB \leftrightarrow AB$

$\therefore GL(V) \cong GL(n : \mathbb{C}) = \{n$ 次複素正則行列$\}$

・よって

G の表現 $\rho : G \to GL(n : \mathbb{C})$　　n 次元表現

$a \mapsto \rho(a)$　　$\rho(ab) =$

◦ 基底を取り換えると $\{|i\rangle\} \to \{|i\rangle'\}$

$|j\rangle' =$

$|x\rangle = \sum_j |j\rangle x_j = \sum_{ij} |i\rangle' (P^{-1})_{ij} x_j$　　$\therefore x'_i = \sum_j (P^{-1})_{ij} x_j$　　$\vec{x}' = P^{-1}\vec{x}$

$= \sum_i |i\rangle' x'_i$

$A|j\rangle' = A\sum_l |l\rangle P_{lj} = \sum_{kl} |k\rangle A_{kl} P_{lj} = \sum_{ikl} |i\rangle' (P^{-1})_{ik} A_{kl} P_{lj}$

$= \sum_i |i\rangle' (P^{-1}AP)_{ij}$

$= \sum_i |i\rangle' A'_{ij}$　　$\therefore A' =$

2つの表現 ρ_1, ρ_2 は, $\exists P \quad \rho_1(a) = P^{-1}\rho_2(a)P \quad (\forall a \in G)$ となっているとき同値という。

抽象的に Def. G の表現 $(\rho_1, V_1), (\rho_2, V_2)$ が同値 ($\rho_1 \sim \rho_2$ と書く)

$\Longleftrightarrow \exists f : V_1 \to V_2$ (線型空間として) 同型

$$f \circ \rho_1(a) = \rho_2(a) \circ f \quad (\forall a \in G) \quad //$$

$$\begin{array}{ccc} V_1 & \longrightarrow & V_2 \\ \downarrow & & \downarrow \\ V_1 & \longrightarrow & V_2 \end{array}$$

f を (ρ_1, V_1) から (ρ_2, V_2) への intertwiner という.

◎例 $\rho(e) = E \quad \rho(a^{-1}) = \rho(a)^{-1}$ ☺〜 //

・例1 恒等表現 $\rho : G \to GL(1 : \mathbb{C}) = \mathbb{C}^{\times}$

$$a \mapsto 1$$

・例2

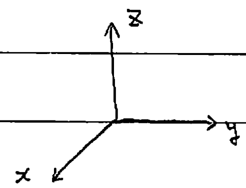
・$\mathbb{Z}_n = \langle a \rangle = \{e, a, \cdots, a^{n-1}\} \quad a^n = e$

$\rho_k : \mathbb{Z}_n \to GL(1 : \mathbb{C}) \quad (k = 0, 1, \cdots, n-1)$

$\rho_k(a) = \qquad \omega = e^{2\pi i/n} \qquad \therefore \rho_k(a^m) =$

・{z軸のまわりの角 $\phi = \frac{2\pi}{n}k$ $(k = 0, 1, \cdots, n-1)$ の回転 A_ϕ} $\cong \mathbb{Z}_n$

(1)



$$\rho_1(A_\phi) = \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = R(-\phi)$$

(2) 水素原子の 2p 状態

$$\begin{cases} u_{210}(\vec{r}) = \left(\frac{1}{2a_B}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{\sqrt{3}a_B} e^{-\frac{r}{2a_B}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \\ u_{21\pm1}(\vec{r}) = \qquad 〃 \qquad \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \, e^{\pm i\varphi} \end{cases} \qquad a_B = \frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2}\frac{\hbar^2}{m}$$

$\psi'(\vec{r}) = (A_\phi \psi)(\vec{r}) = \psi(R(-\phi)^{-1}\vec{r})$

$u_m = u_{21m}, \quad u_0 = f(r)z, \quad u_{\pm1} = f(r)\frac{1}{\sqrt{2}}(x \pm iy)$

$A_\phi u_0 = f(r)z = u_0$

$A_\phi u_{\pm1} = f(r)\frac{1}{\sqrt{2}}(x\cos\phi - y\sin\phi \pm i(x\sin\phi + y\cos\phi)) = e^{\pm i\phi}u_{\pm1}$

$A_\phi(u_1 \, u_0 \, u_{-1}) = (u_1 \, u_0 \, u_{-1})\rho_2(A_\phi) \qquad \rho_2(A_\phi) =$

(注) ・ $\rho_2(A\phi) = P^{-1}\rho_1(A\phi)P$ $\quad P = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ i & 0 & -i \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$

$\therefore \rho_2 \sim \rho_1$

・ϕ 連続でもよい

◦例3

$S_3 = \{1, \sigma_1, \sigma_2, \tau_1, \tau_2, \tau_3\}$

$\cong D_3 = \{1, R_1, R_2, r_1, r_2, r_3\}$

ρ_1

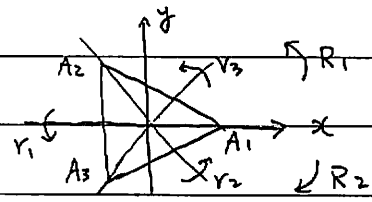
・$\sigma \mapsto \mathrm{sgn}\,\sigma$ 交代表現

ρ_2

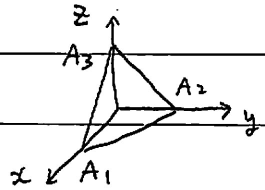
・三角形が表か裏か

ρ_3

$c = \cos\frac{2\pi}{3} = -\frac{1}{2}$, $s = \sin\frac{2\pi}{3} = \frac{\sqrt{3}}{2}$



ρ_4



(注) ・ $P^{-1}\rho_4(a)P = \left(\begin{array}{c|cc} 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & \multicolumn{2}{c}{\multirow{2}{*}{$\rho_3(a)$}} \\ 0 & & \end{array}\right)$ $\quad P = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} \sqrt{2} & -2 & 0 \\ \sqrt{2} & 1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{2} & 1 & \sqrt{3} \end{pmatrix}$

・$D_3 = \langle a, b \rangle = \{1, a, a^2, b, ba, ba^2\}$ なので $\rho(a), \rho(b)$ を与えれば全て決まる
$\quad\quad (a = R_1,\ b = r_1)$

◦例4 S_n

交代表現 $\rho : S_n \to GL(1;\mathbb{C})$ $\quad$ ex. 例3の ρ_2

$\quad\quad \sigma \mapsto$ $\quad\quad \rho(S_n) = \{1, -1\} = \mathbb{Z}_2$

置換表現 $\rho : S_n \to GL(n;\mathbb{C})$ $\quad$ ex. 例3の ρ_4

$\quad\quad \sigma \quad \rho(\sigma)|j\rangle =$ $\quad\quad \therefore \rho(\sigma)_{ij} = \Big\{$

$\quad\quad = \sum_i |i\rangle \rho(\sigma)_{ij}$

◦例5 左正則表現

$G = \{a_1, a_2, \cdots\}$ $\quad |a_i\rangle$ 達を基底とする線型空間 V $\quad \dim V = |G|$

a の作用を $a|a_j\rangle =$ $\quad\quad \therefore \rho(a)_{ij} = \Big\{1$

$\quad\quad = \sum_i |a_i\rangle \rho(a)_{ij}$

忠実 ☺～

右正則表現 ρ_R　$a|a_j\rangle = |a_j a^{-1}\rangle$　$\therefore \rho_R(a)_{ij} = \begin{cases} 1 & a_i = a_j a^{-1} \\ 0 & \neq \end{cases}$

$= \sum_i |a_i\rangle \rho_R(a)_{ij}$

$\rho \sim \rho_R$　㊟ ～〃

(注) 群環　$\mathbb{C}[G] = \{ \sum_i c_i a_i \mid c_i \in \mathbb{C},\ a_i \in G \}$

$$\left\{ \begin{array}{lll} \text{和} & \sum_i c_i a_i + \sum_i c'_i a_i = \sum_i (c_i + c'_i) a_i & \\ \text{スカラー倍} & c \sum_i c_i a_i = \sum_i c c_i a_i & \end{array} \right\} a_i \text{を基底とする線型空間}$$

$$\text{積} \quad \sum_i c_i a_i \cdot \sum_j c'_j a_j = \sum_{i,j} c_i c''_j a_i a_j = \sum_k c_k a_k, \quad c_k = \sum_{\substack{i,j \\ a_i a_j = a_k}} c'_i c''_i$$

上の例では強調するために $\sum_i c_i a_i$ を $\sum_i c_i |a_i\rangle$ と書いた。　$V = \mathbb{C}[G]$

$|x\rangle = \sum_i x_i |a_i\rangle$　$\langle x| = \sum_i \langle a_i | \bar{x}_i$

$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}$

$|y\rangle = \sum_i y_i |a_i\rangle$　$\langle x|y\rangle = \sum_i \bar{x}_i y_i = (\sum_i \bar{x}_i a_i^{-1} \cdot \sum_j y_j a_j$ の e の係数$)$

◎ Def　G の表現 (ρ, V)　$V \supset W$ 部分空間

W が ρ-不変 $\Longleftrightarrow$ $\rho(a) W \subset W$ $(\forall a \in G)$

つまり $\begin{pmatrix} * \\ * \end{pmatrix} \}W$ にとると $\rho(a) =$

Def　G の表現 (ρ, V) が既約 $\Longleftrightarrow$ V の ρ-不変部分空間は V と $\{0\}$ のみ

〃　可約 $\Longleftrightarrow$ 既約でない。

つまり　$P^{-1} \rho(a) P = \begin{pmatrix} * & * \\ 0 & * \end{pmatrix}$ $(\forall a \in G)$ となる P が存在するとき可約

例 ・ 例2 の $\rho_1 \sim \rho_2 = \begin{pmatrix} * & \\ & * \end{pmatrix}$

・ 例3 の $\rho_4 \sim \begin{pmatrix} * & \\ & * * \\ & * * \end{pmatrix}$

◦ G の表現 (ρ_1, V_1), (ρ_2, V_2)

直和表現 (, , ...)

・$V_1 \oplus V_2$　V_1 の基底 $|i\rangle_1$ $(i = 1, \cdots, n)$　$\dim V_1 = n$

V_2 〃 $|k\rangle_2$ $(k = 1, \cdots, m)$　$\dim V_2 = m$

$V_1 \oplus V_2$ 〃 $|I\rangle = \begin{cases} |I\rangle_1 & I = 1, \cdots, n \\ |I-n\rangle_2 & I = n+1, \cdots, n+m \end{cases}$　$\dim V_1 \oplus V_2 = n+m$

・ $\mathrm{End}(V) = \{V$の線型変換$\}$

$\mathrm{End}(V_1) \ni A$, $\mathrm{End}(V_2) \ni B$ に対して $A \oplus B \in \mathrm{End}(V_1 \oplus V_2)$ は

$$(A\oplus B)|J\rangle \overset{def}{=} \begin{cases} A|j\rangle_1 & J=j\leq n \\ B|l\rangle_2 & J=n+l>n \end{cases} = \begin{cases} \sum_{i=1}^{n} |i\rangle_1 A_{ij} \\ \sum_{k=1}^{m} |k\rangle_2 B_{kl} \end{cases}$$

$$= \sum_{I=1}^{n+m} |I\rangle (A\oplus B)_{IJ} \qquad \therefore A\oplus B = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix}$$

・ $\rho_1 \oplus \rho_2 : G \to GL(V_1 \oplus V_2) \cong GL(n+m; \mathbb{C})$

$$a \mapsto (\rho_1\oplus\rho_2)(a) = \rho_1(a)\oplus\rho_2(a) = \begin{pmatrix} \rho_1(a) & 0 \\ 0 & \rho_2(a) \end{pmatrix}$$

表現になる ☺ ~~//

・ Def Gの表現(ρ, V)がいくつかの既約表現と同値のとき，ρは完全可約という。

つまり $\rho \sim \rho_1 \oplus \cdots \oplus \rho_r$ 　つまり $^\exists P^{-1}\rho(a)P = \begin{pmatrix} \rho_1(a) & & O \\ & \ddots & \\ O & & \rho_r(a) \end{pmatrix} \quad (^\forall a \in G)$

・ Def Gの表現(ρ, V)が ユニタリ表現

$\Leftrightarrow$ V：計量線型空間，$\rho(a)$ $(^\forall a\in G)$ が ユニタリ変換

つまり $\rho(a)$ が ユニタリ行列

・ Prop. ユニタリ表現は完全可約 ☺ ~~//

・ Thm 有限群の表現はユニタリ表現に同値 ($\rightsquigarrow$ よって完全可約) ☺ ~~//

よって既約表現がわかればよい

・ Thm (Schur の補題 1)

Gの既約表現 (ρ_1, V_1), (ρ_2, V_2), $f: V_1 \to V_2$ 線型

$f\circ\rho_1(a) = \rho_2(a)\circ f \quad (^\forall a\in G)$

$\Rightarrow$ $f=0$ 又は fは全単射 (よって $V_1 \cong V_2$, $\rho_1 \sim \rho_2$) ☺ ~~//

つまり fの行列Pは正方で $|P| \neq 0$

・ Cor (Schurの補題2)

既約表現の全ての表現行列と可換な行列はスカラー行列

つまり Gの既約表現 (ρ, V)

$\rho(a)X = X\rho(a) \quad (^\forall a\in G) \Rightarrow X = cE \quad (c\in\mathbb{C})$ ☺ ~~//

・Cor　Abel 群の既約表現は一次元　☺ 〜〜//

◎ 群 G がハミルトニアンの対称性　$[H, a] = 0$ ($\forall a \in G$)

・ $Hu = Eu$ とする。　$G \ni a$ が作用する. au

$Hau = aHu = Eau$　au もエネルギー E で縮退

$Hu_i = Eu_i$　($i = 1, \cdots, d$)

u_i 達は G の作用で一次変換を受ける。　d 次元表現

一般には既約が期待される。　可約な事もある.(偶然縮退)

☺ 既約でないとする。例えば2つのグループに分かれたとする。それぞれは同じエネルギー。

偶然縮退でなければその2つのエネルギーは違うはず。//　もっと大きな群 $G' \supset G$ で見ると既約

・ H_0　対称性 G_0　既約表現 ρ_0

(対称性を破る) 摂動を加える

$H = H_0 + H_1$　対称性 $G \subset G_0$　部分群

ρ_0 を G の表現とみると可約 : $\rho_0 \sim \rho_1 \oplus \rho_2 \oplus \cdots$　縮退が(部分的に)解ける.

・例)

・水素原子

$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$　$n = 1, 2, \cdots$　$l = 0, 1, \cdots, n-1$,

$E_{nlm} = E_n = -\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{1}{n^2}$　$m = -l, -l+1, \cdots, l$

E　n による　m によらない　空間回転 $SO(3)$　Y_{lm} が混じり合う

l にも 〃　隠れた対称性　→ §4-2

z 軸方向に磁場をかける.　E　n, m による　$SO(3) \to U(1)$

l によらない

・ $H_0 = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{1}{2}m_1\omega_1^2 x_1^2 + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{1}{2}m_2\omega_2^2 x_2^2$　$\omega_i > 0$　$x_1 \to -x_1$ で不変
$x_2 \to -x_2$ 〃

$E_0 = \hbar\omega_1(n_1 + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_2(n_2 + \frac{1}{2})$　($n_i = 0, 1, 2, \cdots$)

$\frac{\omega_2}{\omega_1}$: 無理数のとき　縮退なし

$\frac{\omega_2}{\omega_1}$: 有 〃　〃 あり

ex $\frac{\omega_2}{\omega_1} = 2$ のとき　$E_0 = \hbar\omega_1(n + \frac{3}{2})$　$[\frac{n}{2}+1]$ 重　偶然縮退

$X_i = \sqrt{\frac{m_i}{m}} x_i \quad (\Rightarrow P_i = \sqrt{\frac{m}{m_i}} p_i) \qquad \begin{cases} X = \frac{1}{2}(X_1 + X_2) \\ x = X_1 - X_2 \end{cases} \quad \left(\Rightarrow \begin{cases} P = P_1 + P_2 \\ p = \frac{1}{2}(P_1 - P_2) \end{cases} \right)$

$H_0 = \frac{1}{2m}P_1^2 + \frac{1}{2}m\omega_1^2 X_1^2 + \frac{1}{2m}P_2^2 + \frac{1}{2}m\omega_2^2 X_2^2$

$= \frac{1}{2\cdot 2m}P^2 + \frac{1}{2}2m\frac{\omega_1^2+\omega_2^2}{2}X^2 + \frac{1}{2\cdot\frac{m}{2}}p^2 + \frac{1}{2}\frac{m}{2}\frac{\omega_1^2+\omega_2^2}{2}x^2 + \frac{1}{2}m(\omega_1^2-\omega_2^2)xX$

$\omega_1 = \omega_2 = \omega$ のとき

$E = \hbar\omega(n+1)$ $n+1$ 重 $\rightsquigarrow$ $SU(2)$ のスピン $\frac{n}{2}$ 表現

$H_0 = \frac{1}{2m}(P_1^2 + P_2^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(X_1^2 + X_2^2)$ $X_1 \leftrightarrow X_2$ でも不変 $\mathbb{Z}_2$

$= \frac{1}{2m}(P_1\ P_2)\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}P_1\\P_2\end{pmatrix} + \frac{1}{2}m(X_1\ X_2)\begin{pmatrix}\omega^2&0\\0&\omega^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}X_1\\X_2\end{pmatrix}$

$\begin{pmatrix}X_1'\\X_2'\end{pmatrix} = A\begin{pmatrix}X_1\\X_2\end{pmatrix} \quad \left(\Rightarrow \begin{pmatrix}P_1'\\P_2'\end{pmatrix} = {}^tA^{-1}\begin{pmatrix}P_1\\P_2\end{pmatrix}\right)$ $A \in O(2)$ でも不変 $O(2)$

$[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$
$X_1 X_2 P_1 P_2$ で変換

$= \hbar\omega(a_1^\dagger a_1 + \frac{1}{2}) + \hbar\omega(a_2^\dagger a_2 + \frac{1}{2}) = \hbar\omega(a_1^\dagger\ a_2^\dagger)\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix} + \hbar\omega$

$a_j = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(P_j - im\omega X_j)$

$\begin{pmatrix}a_1'\\a_2'\end{pmatrix} = U\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix} \quad (\Rightarrow (a_1'^\dagger\ a_2'^\dagger) = (a_1^\dagger\ a_2^\dagger)U^\dagger)$ $U \in U(2)$ で不変 $U(2)$

$H = H_0 - \lambda m\omega^2 X_1 X_2 \quad (-1<\lambda<1)$ $U(2) \rightsquigarrow \mathbb{Z}_2$

$= \frac{1}{2\cdot 2m}P^2 + \frac{1}{2}2m(1-\lambda)\omega^2 X^2 + \frac{1}{2\cdot\frac{m}{2}}p^2 + \frac{1}{2}\frac{m}{2}(1+\lambda)\omega^2 x^2$

$E = \hbar\omega\sqrt{1-\lambda}(N+\frac{1}{2}) + \hbar\omega\sqrt{1+\lambda}(n+\frac{1}{2}) \quad (N, n = 0, 1, 2, \cdots)$

◎ Def G の表現 (ρ, V) の指標、character

$$\chi : G \to \mathbb{C}, \quad a \mapsto \chi(a) = \mathrm{tr}\,\rho(a)$$

既約表現の指標を既約指標という //

◦ 例)

・ $S_3 = \{1, \sigma_1, \sigma_2, \tau_1, \tau_2, \tau_3\}$ No 2-2-3 例3

χ_1

χ_2

χ_3

χ_4

・ 左正則表現 $\rho(a)_{ij} = \begin{cases} 1 & a_i = aa_j \\ 0 & \neq \end{cases}$ $\chi(a) = \begin{cases} \end{cases}$

- $\chi(e)$ = 表現の次元 ☺~//

  $\rho_1 \sim \rho_2 \Rightarrow \chi_1 = \chi_2$ ☺~//

  指標は類関数 ☺~//

  共役類だけで値が決まる. つまり $\chi(gag^{-1}) = \chi(a)$ $({}^\forall g \in G)$

- Thm (表現行列の直交性)

  有限群 G の既約表現 (ρ_α, V_α), $d_\alpha = \dim V_\alpha$ $\rho_\alpha \not\sim \rho_\beta$ $(\alpha \neq \beta)$

  $$\Rightarrow \sum_{a \in G} \left(\rho_\alpha(a^{-1})\right)_{ij} \left(\rho_\beta(a)\right)_{kl} = \frac{|G|}{d_\alpha} \delta_{\alpha\beta}\delta_{il}\delta_{jk}$$ ☺~//

  Cor (指標の第1直交関係) 上で ρ_α の指標を χ_α

  $$\Rightarrow \sum_{a \in G} \chi_\alpha(a^{-1}) \chi_\beta(a) = |G| \delta_{\alpha\beta}$$ ☺~//

注)

- $\chi(a^{-1}) = \overline{\chi(a)}$ ☺~//
- G 上の関数 f, g に対し内積 $(f, g) = \frac{1}{|G|} \sum_{a \in G} \overline{f(a)} g(a)$ を定義すると

  $(\chi_\alpha, \chi_\beta) = \delta_{\alpha\beta}$
- G の共役類を $C_1, \cdots, C_{n_c}$ とし, $|C_i| = h_i$ とすると

  $$\sum_{i=1}^{n_c} h_i \overline{\chi_\alpha(C_i)} \chi_\beta(C_i) = |G| \delta_{\alpha\beta} \qquad \chi_\alpha(C_i) = \chi_\alpha(\overset{C_i}{\overset{\psi}{a}})$$
- 完全可約なので $\rho(a) \sim$
  $$\begin{pmatrix} \overbrace{\rho_1(a) \cdots \rho_1(a)}^{m_1} & & & \\ & \overbrace{\rho_2(a) \cdots \rho_2(a)}^{m_2} & & \\ & & \cdots & \\ & & & \overbrace{\rho_{n_r}(a) \cdots \rho_{n_r}(a)}^{m_{n_r}} \end{pmatrix}$$

  $\rho \sim m_1 \rho_1 \oplus \cdots \oplus m_{n_r} \rho_{n_r}$ $m_\alpha \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ 重複度

  $\chi = m_1 \chi_1 + \cdots + m_{n_r} \chi_{n_r}$ $m_\alpha = (\chi_\alpha, \chi) = \frac{1}{|G|} \sum_{i=1}^{n_c} h_i \overline{\chi_\alpha(C_i)} \chi(C_i)$ //

Thm 2つの表現が同値 $\Leftrightarrow$ 指標が一致 ☺~//

Thm ρ が既約 $\Leftrightarrow$ $(\chi, \chi) = 1$ ☺~//

Thm χ : 正則表現の指標 $\Rightarrow$ $\chi = \sum_\alpha d_\alpha \chi_\alpha$ よって $|G| = \sum_\alpha d_\alpha^2$ ☺~//

- 共役類の積 $C_i = \sum_{a \in C_i} a$, $C_i C_j = \sum_{a \in C_i, b \in C_j} ab$

  $C_i C_j = C_j C_i$, $C_i C_j = \sum_{k=1}^{n_c} t_{ij}{}^k C_k$ $t_{ij}{}^k \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ ☺~//

例 $S_3 = \{e\} + \{\sigma_1, \sigma_2\} + \{\tau_1, \tau_2, \tau_3\}$
$\qquad\quad \| \qquad\quad \| \qquad\quad \|$
$\qquad\ C_1 \qquad C_2 \qquad C_3$

	C_1	C_2	C_3
C_1	C_1	C_2	C_3
C_2	C_2	$2C_1+C_2$	$2C_3$
C_3	C_3	$2C_3$	$3C_1+3C_2$

Thm (指標の第2直交関係)

$$\sum_{\alpha=1}^{n_r} \overline{\chi_\alpha(C_i)}\,\chi_\alpha(C_j) = \frac{|G|}{h_i}\delta_{ij}$$ ☺ ~~//

Thm 有限群の異なる既約表現(ρ_α)の個数 n_r = 共役類(C_i)の個数 n_c ☺ ~~//

Thm d_α は $|G|$ の約数 ☺ ~~//

◦ まとめると 有限群 G

共役類 $C_1, \cdots, C_{n_c}$ $\quad |C_i| = h_i$

既約表現 $\rho_1, \cdots, \rho_{n_r}$ $\quad \rho_\alpha$ の次元 d_α

既約指標 $\chi_1, \cdots, \chi_{n_r}$

指標表

	C_1	C_2	$\cdots$
χ_1			
χ_2			
$\vdots$			

$n_c = n_r$

$$\sum_{\alpha=1}^{n_r} d_\alpha^2 = |G|, \quad \sum_{\alpha=1}^{n_r} d_\alpha \chi_\alpha(a) = 0 \ (a \neq e)$$

第1 $$\sum_{i=1}^{n_c} h_i \overline{\chi_\alpha(C_i)}\,\chi_\beta(C_i) = |G|\,\delta_{\alpha\beta}$$

第2 $$\sum_{\alpha=1}^{n_r} \overline{\chi_\alpha(C_i)}\,\chi_\alpha(C_j) = \frac{|G|}{h_i}\delta_{ij}$$

勝手な表現 $\rho \sim \bigoplus_{\alpha=1}^{n_r} m_\alpha \rho_\alpha \qquad m_\alpha \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$

$$\chi = \sum_{\alpha=1}^{n_r} m_\alpha \chi_\alpha \qquad m_\alpha = (\chi_\alpha, \chi) = \frac{1}{|G|}\sum_{i=1}^{n_c} h_i \overline{\chi_\alpha(C_i)}\,\chi(C_i)$$

$\rho \sim \rho' \iff \chi = \chi'$

◦ 例

• S_3

h_i	1	2	3
	$\{e\}$	$\{\sigma_1, \sigma_2\}$	$\{\tau_1, \tau_2, \tau_3\}$
χ_1			
χ_2			
χ_3			
置換表現 χ			

直交関係をcheckせよ.

$\chi =$ $\qquad \therefore \rho \sim$

• $D_4 = \{e, a, a^2, a^3, b, ba, ba^2, ba^3\} = \langle a, b\rangle \quad a^4 = b^2 = e, \quad bab = a^{-1}$

$= \{e\} + \{a, a^3\} + \{a^2\} + \{b, ba^2\} + \{ba, ba^3\}$

$n_c = 5 \qquad |G| = 8 = \quad .\quad .\quad .$

$h_i \quad \overset{1}{\{e\}} \quad \overset{2}{\{a, a^3\}} \quad \overset{1}{\{a^2\}} \quad \overset{2}{\{b, ba^2\}} \quad \overset{2}{\{ba, ba^3\}}$

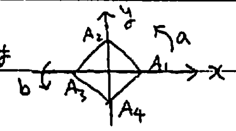
χ_1 ← 1次元表現では

χ_2 $\quad \chi(a)^4 = \chi(b)^2 = (\chi(a)\chi(b))^2 = 1$

χ_3 $\quad \therefore \chi(b) = \pm 1, \quad \chi(a) = \pm 1$

χ_4

χ_5 ← 第2より

ρ_5 は  として $\rho_5(a) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \rho_5(b) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

◎ Gの表現(ρ_1, V_1), (ρ_2, V_2)

テンソル積表現 (, , ,)

・$V_1 \otimes V_2$ $\quad V_1$の基底 $|i\rangle_1 \quad (i = 1, \cdots, n) \qquad \dim V_1 = n$

V_2 〃 $|k\rangle_2 \quad (k = 1, \cdots, m) \qquad \dim V_2 = m$

$V_1 \otimes V_2$ 〃 $|I\rangle = |ik\rangle = |i\rangle_1 \otimes |k\rangle_2 \quad \begin{pmatrix} i = 1, \cdots, n \\ k = 1, \cdots, m \end{pmatrix} \quad \dim V_1 \otimes V_2 = nm$

$|11\rangle, \cdots, |1m\rangle, |21\rangle, \cdots, |2m\rangle, \cdots, |n1\rangle, \cdots, |nm\rangle$ の順に並べる

$(c_1|i\rangle + c_2|j\rangle) \otimes |k\rangle = c_1|i\rangle \otimes |k\rangle + c_2|j\rangle \otimes |k\rangle, \quad |i\rangle \otimes (c_1|k\rangle + c_2|l\rangle) = c_1|i\rangle \otimes |k\rangle + c_2|i\rangle \otimes |l\rangle$

・$\mathrm{End}(V_1) \ni A$, $\mathrm{End}(V_2) \ni B$ に対して $A \otimes B \in \mathrm{End}(V_1 \otimes V_2)$ は

$$(A \otimes B)|jl\rangle \overset{\mathrm{def}}{=} A|j\rangle_1 \otimes B|l\rangle_2 = \sum_i |i\rangle_1 A_{ij} \otimes \sum_k |k\rangle_2 B_{kl}$$

$$= \sum_{ik} |ik\rangle (A \otimes B)_{ik,jl} \qquad = \sum_{ik} |i\rangle_1 \otimes |k\rangle_2 A_{ij} B_{kl}$$

$$\therefore (A \otimes B)_{ik,jl} = A_{ij} B_{kl} \qquad A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & & \vdots \\ \vdots & & & \\ a_{n1}B & & & a_{nn}B \end{pmatrix}$$

$(A \otimes B)(C \otimes D) = AC \otimes BD$ ☺ ~ //

$\mathrm{tr}\, A \otimes B = \mathrm{tr}\, A \cdot \mathrm{tr}\, B$ ☺ ~ //

・$\rho_1 \otimes \rho_2 : G \to GL(V_1 \otimes V_2) \cong GL(nm; \mathbb{C})$

$\quad\; \overset{\psi}{a} \mapsto \overset{\psi}{\rho_1(a)} \otimes \rho_2(a)$ 表現になる ☺ ~ //

$\chi_{\rho_1 \otimes \rho_2}(a) = \chi_{\rho_1}(a) \chi_{\rho_2}(a)$

・(ρ_α, V_α) : 有限群 G の既約表現

完全可約なので $\rho_\alpha \otimes \rho_\beta \sim \bigoplus_\gamma c_{\alpha\beta}{}^\gamma \rho_\gamma$ $\quad c_{\alpha\beta}{}^\gamma \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$

$$\chi_\alpha \chi_\beta = \sum_\gamma c_{\alpha\beta}{}^\gamma \chi_\gamma$$

V_α の基底 $\quad |i\rangle_\alpha \quad (i=1,\cdots,d_\alpha)$

V_β 〃 $\quad |k\rangle_\beta \quad (k=1,\cdots,d_\beta)$

$V_\alpha \otimes V_\beta$ 〃 $\quad |ik\rangle_{\alpha\beta} = |i\rangle_\alpha \otimes |k\rangle_\beta$

この中で V_γ の基底 $\quad |m\rangle_\gamma^p = \sum_{ik} |ik\rangle_{\alpha\beta}\ {}_{\alpha\beta}\langle ik|m\rangle_\gamma^p$ $\quad m=1,\cdots,d_\gamma$, $\; p=1,\cdots,c_{\alpha\beta}{}^\gamma$

Clebsch-Gordan 係数

・例 ・ $1 \otimes \rho_\alpha = \rho_\alpha$ ☺~〃

・スピンの合成 → §4-2

・S_3

	$\{e\}$	$\{\sigma_1, \sigma_2\}$	$\{\tau_1, \tau_2, \tau_3\}$
χ_1	1	1	1
χ_2	1	1	-1
χ_3	2	-1	0

$\chi_2 \chi_2 =$ $\qquad \therefore\ \rho_2 \otimes \rho_2 \sim$

$\chi_2 \chi_3 =$ $\qquad \therefore\ \rho_2 \otimes \rho_3 \sim$

$\chi_3 \chi_3 =$ $\qquad \therefore\ \rho_3 \otimes \rho_3 \sim !$

次元 $= !$

$$P^{-1} (\rho_3 \otimes \rho_3)(a)\, P = \begin{pmatrix} \rho_1(a) & & \\ & \rho_2(a) & \\ & & \rho_3(a) \end{pmatrix} \qquad P = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$ No 2-2-3

・Thm $\quad G = G_1 \times G_2 \quad (\rho_i, V_i)$: G_i の既約表現

$\Rightarrow\ \rho = \rho_1 \otimes \rho_2 \quad G$ の既約表現 $\quad$ 更に G の既約表現は全てこの形

$\chi = \chi_1 \chi_2 \quad$ 〃 指標 $\quad$ 〃 指標 $\quad$ 〃 ☺~〃

◎ Def. ρ : G の表現 $\quad \tilde{\rho} : a \mapsto \tilde{\rho}(a) = {}^t\rho(a^{-1})$ 共役な表現 $\quad$ 表現になる ☺~〃

$\quad\ \ a \in G$ $\quad \bar{\rho} : a \mapsto \bar{\rho}(a) = \overline{\rho(a)}$ 複素共役な表現 $\quad$ 〃

ρ 既約 $\Rightarrow \tilde{\rho}, \bar{\rho}$ 既約 ☺~〃

ρ ユニタリ $\Rightarrow \tilde{\rho} = \bar{\rho}$ ☺~〃

Def $\rho \sim \bar{\rho}$ のとき $\begin{cases} \rho(a)\ (\forall a \in G) \text{が実行列にとれるとき} & \rho \text{は実 (real)} \\ \quad " \quad \text{とれないとき} & \rho \text{は擬実 (pseudoreal)} \end{cases}$

$\rho \nsim \bar{\rho}$ のとき ρ は複素 (complex)

Thm. ρ 既約ユニタリ表現

$$\frac{1}{|G|}\sum_{a\in G} \chi(a^2) = \begin{cases} 1 & \Leftrightarrow \rho \text{ 実} \\ -1 & \Leftrightarrow \rho \text{ 擬実} \\ 0 & \Leftrightarrow \rho \text{ 複素} \end{cases}$$ ☺ ～～//

◎ 群 G 既約(ユニタリ)表現 ρ_α

$G \ni a$ の作用で、表現 ρ_α で変換される状態(の基底) $|i\rangle_\alpha$, $a|j\rangle_\alpha = \sum_i |i\rangle_\alpha \rho_\alpha(a)_{ij}$

${}_\beta\langle k|i\rangle_\alpha = \delta_{\alpha\beta}\delta_{ik}N_\alpha$ ☺ ～～//

$G \ni a$ の作用で、表現 ρ_γ で変換される演算子 A^γ_m, $a A^\gamma_n a^{-1} = \sum_m A^\gamma_m \rho_\gamma(a)_{mn}$

${}_\beta\langle k|A^\gamma_m|i\rangle_\alpha \neq 0 \Rightarrow c_{\gamma\alpha}{}^\beta \neq 0$ ☺ ～～//

対偶 $c_{\gamma\alpha}{}^\beta = 0 \Rightarrow {}_\beta\langle k|A^\gamma_m|i\rangle_\alpha = 0$ 選択則

$\alpha = \beta$ のとき もう少し強い事が言える.

・勝手な状態 $|\psi\rangle$ ($|\psi\rangle = \sum_\alpha\sum_i c_{\alpha i}|i\rangle_\alpha$) 一般には表現 α を複数個含む.

から特定の成分を取り出す.

$$P^\alpha_{ij} = \frac{d_\alpha}{|G|}\sum_{a\in G} \rho_\alpha(a^{-1})_{ji}\, a$$

$$P^\alpha_{ij}|\psi\rangle = c_{\alpha j}|i\rangle_\alpha$$ ☺ ～～//

$$P^\alpha = \sum_i P^\alpha_{ii} = \frac{d_\alpha}{|G|}\sum_{a\in G}\overline{\chi_\alpha(a)}\, a$$

$$P^\alpha|\psi\rangle = \sum_i c_{\alpha i}|i\rangle_\alpha$$ ρ_α 成分への射影

例) $\mathfrak{S}_3$ ρ_1, ρ_2, ρ_3 置換表現 $|i\rangle$ $i=1,2,3$

$P^1 = \frac{1}{6}(1 + \sigma_1 + \sigma_2 + \tau_1 + \tau_2 + \tau_3)$ $P^1\mathbb{C}^3 = \mathbb{C}\frac{1}{\sqrt{3}}(|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle)$

$P^2 = \frac{1}{6}(1 + \sigma_1 + \sigma_2 - \tau_1 - \tau_2 - \tau_3)$ $P^2\mathbb{C}^3 = \{0\}$

$P^3 = \frac{1}{3}(2 - \sigma_1 - \sigma_2)$ $P^3\mathbb{C}^3$ ここ2元

◎ 誘導表現 ～～//

§2-3 点群

◎ 空間群 = {結晶を不変に保つ対称操作}

↑基本格子があり格子点 $n_1\vec{t}_1 + n_2\vec{t}_2 + n_3\vec{t}_3$ $(n_i \in \mathbb{Z})$

= (回転・鏡映・反転) + (並進)

↑点群

作用 $(R, \vec{a})\vec{r} = R\vec{r} + \vec{a}$

積 $(R, \vec{a})(R', \vec{a}') = (RR', R\vec{a}' + \vec{a})$　　群 ☺ 〜〃

◦ 対称操作

E : id.

C_n : $\frac{2\pi}{n}$ 回転　　回転軸をn回軸という.

C_2' : n回軸に直交する2回軸　　主たる回転軸

σ : 鏡映 { σ_h　水平面で.　(n回軸 に垂直な面で)
σ_v　垂直面で.　(〃 (と C_2'軸)を含む面で)
σ_d　対角面で.　(〃 と, 2つの C_2'軸の2等分線を含む面で)

I : 空間反転

IC_n : 回反

S_n : 回映　　$S_n = \sigma_h C_n$

◎ 点群　32個 (←空間群)

C_n : $C_n = \langle C_n \rangle = \{E, C_n, \cdots, C_n^{n-1}\}$　$(n=1,2,3,4,6)$

C_i : $C_i = \langle I \rangle = \{E, I\}$

C_{nv} : C_n と n個の σ_v　$(n=2,3,4,6)$

C_{nh} : C_n と σ_h　$(n=1,2,3,4,6)$　($n=2,4,6$ では I が含まれ, $C_{nh} = C_n \times C_i$)

S_n : S_n　$(n=4,6)$

D_n : C_n と n個の C_2'　$(n=2,3,4,6)$

D_{nd} : D_n に σ_d　$(n=2,3)$

D_{nh} : D_n に σ_h　$(n=2,3,4,6)$　($n=2,4,6$ では I が含まれ, $D_{nh} = D_n \times C_i$)

(三号罫紙)

O：立方体（正八面体）を保つ回転　　$|O| = 24$

O_h：　〃　対称操作　$O_h = O \times C_i$

T：正四面体を保つ回転　　$|T| = 12$

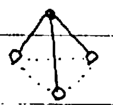
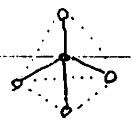
T_d：　〃　対称操作　$|T_d| = 24$

T_h：$T_h = T \times C_i$

注)・C_n は $n = 1, 2, 3, 4, 6$ ☺ ~~

・Y：正二十面体（正十二面体）を保つ回転　$|Y| = 60$　5回軸を持つ.

$Y_h = Y \times C_i$

・例)　NH_3 　　CH_4 

H_2O 　　C_6H_6 

◎ 指標　1次元表現 $\begin{cases} A & C_n \text{の値が } 1 \\ B & \quad〃 \quad -1 \end{cases}$

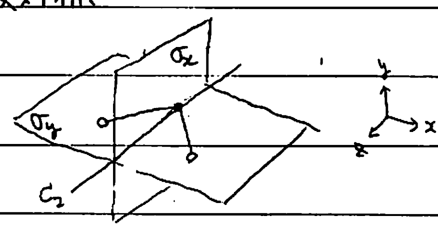
2　〃　E

3　〃　T

I を含むとき $\begin{cases} g & I \text{に対して対称} \\ u & \quad〃 \quad \text{反対称} \end{cases}$

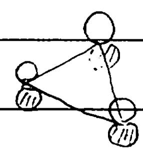
・例)・C_{2v}

	E	C_2	σ_y	$\sigma_x = C_2\sigma_y$
A_1				
A_2				
B_1				
B_2				



・C_{3v}

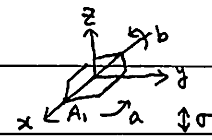
	$\{1\}$ 〃 E	$\{R_1, R_2\}$ 〃 $2C_3$	$\{r_1, r_2, r_3\}$ 〃 $3\sigma_v$
A_1			
A_2			
E			



・D_6

	$\{e\}$ 〃 E	$\{a, a^5\}$ 〃 $2C_6$	$\{a^2, a^4\}$ 〃 $2C_3$	$\{a_3\}$ 〃 C_2	$\{b, ba^2, ba^4\}$ 〃 $3C_2'$	$\{ba, ba^3, ba^5\}$ 〃 $3C_2''$
A_1						
A_2						
B_1						
B_2						
E_1						
E_2						

・D_{6h}　D_6 に σ_h を加える．　$\sigma = \sigma_h$ として　$\sigma^2 = 1$, $\sigma a = a\sigma$, $\sigma b = b\sigma$



$I = \sigma a^3$ とおくと　I は空間反転

$I^2 = 1$, $Ia = aI$, $Ib = bI$　（$I\sigma = \sigma I = a^3$）

$D_{6h} = D_6 \times C_i$

C_i は

	E	I
χ_1	1	1
χ_2	1	−1

なので

	D_6	ID_6
χ_g	☆	☆
χ_u	☆	−☆

つまり

					$2S_3$ =	$2S_6$ =	σ_h =	$3\sigma_d$ =	$3\sigma_v$ =
	E	⋯	$3C_2'$	I	$2IC_6$	$2IC_3$	IC_2	$3IC_2'$	$3IC_2''$
A_{1g}	1	⋯	1	1	1	1	1	1	1
⋮	⋮		⋮	⋮	⋮				⋮
E_{2g}	2	⋯	0	2	−1	−1	2	0	0
A_{1u}	1	⋯	1	−1	−1	−1	−1	−1	−1
⋮	⋮		⋮	⋮					⋮
E_{2u}	2	⋯	0	−2	1	1	−2	0	0

◎応用例

・例1．分子振動

安定点の近辺で微小振動．

安定点からのずれ u_i　$(i = 1, \cdots, 3N)$　　全体の並進・回転 を含む（3　3）

$$H = \frac{1}{2}\sum_{ij} m_{ij}\dot{u}_i\dot{u}_j + \frac{1}{2}\sum_{ij} k_{ij} u_i u_j$$

↓ 対角化

$$= \sum_{\alpha}\sum_{i=1}^{f_\alpha}\left(\frac{1}{2}\dot{Q}_{\alpha i}^2 + \frac{1}{2}\omega_\alpha^2 Q_{\alpha i}^2\right) + (\text{全体の並進・回転})$$　　規準振動

点群 G の操作で分子の原子配置不変．

$Q_{\alpha i}$ $(i = 1, \cdots, f_\alpha)$ は既約表現の基底　（と期待される）

$Q_{\alpha i}$ 全体を基底とする表現を全体表現

・ある回転軸のまわりの θ 回転 $c(\theta)$

z 軸にえらんで
$$\begin{pmatrix} u_x' \\ u_y' \\ u_z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{pmatrix}, \quad \mathrm{tr} = 1 + 2\cos\theta$$

ある原子が別の位置に移れば　$3N \times 3N$ 行列の非対角要素

$c(\theta)$ で不動な原子の個数を N_c とすると　$\chi(c(\theta)) = N_c(1 + 2\cos\theta)$

全体の並進・回転を引いて　$\chi_T(c(\theta)) = (N_c - 2)(1 + 2\cos\theta)$

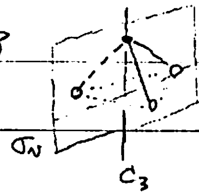
・回映 $S(\theta) = \sigma_h C(\theta)$ $\begin{pmatrix} u_x'' \\ u_y'' \\ u_z'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_x' \\ u_y' \\ -u_z' \end{pmatrix}$ $tr = -1 + 2\cos\theta$

$S(\theta)$で不動な原子の個数をN_Sとすると $\chi(S(\theta)) = N_S(-1+2\cos\theta)$

・$\chi(e) = 3N$, $\chi_T(e) = 3N-6$, $\chi(\overset{S(0)}{\overset{\shortparallel}{\sigma}}) = N_\sigma$, $\chi(\overset{S(\pi)}{\overset{\shortparallel}{I}}) = -3N_I$

・アンモニア

NH_3



C_{3v}

C_3 $\theta = \frac{2\pi}{3}$ $N_c = 1$

σ_v $\theta = 0$, $N_\sigma = 2$

	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	−1
E	2	−1	0

$\chi_T =$

$\chi = \chi_T + \underset{並進}{(A_1+E)} + \underset{回転}{(A_2+E)}$

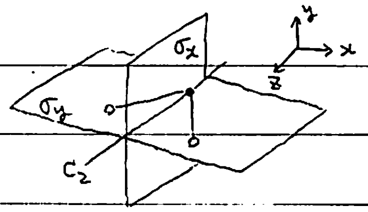
$$H = \sum_{i=1}^{2}\left(\frac{1}{2}\dot{q}_i^2 + \frac{1}{2}\omega_i^2 q_i^2\right) + \sum_{i=1}^{2}\left(\frac{1}{2}\dot{\vec{Q}}_i^2 + \frac{1}{2}\Omega_i \vec{Q}_i^2\right)$$

$\omega_1, \omega_2, \Omega_1, \Omega_2$ 固有振動数

分子の形だけで振動の形が決まった！ (ω_i, Ω_iは決まらない)

・水

H_2O



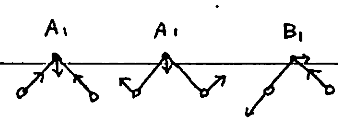
C_{2v}

C_2 $\theta = \pi$ $N_c = 1$

σ_y $\theta = 0$ $N_s = 3$

σ_x $\theta = 0$ $N_s = 1$

	E	C_2	σ_y	σ_x
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	−1	−1
B_1	1	−1	1	−1
B_2	1	−1	−1	1



$\chi_T =$

$\chi = \chi_T + \underset{並進}{(A_1+B_1+B_2)} + \underset{回転}{(A_2+B_1+B_2)}$

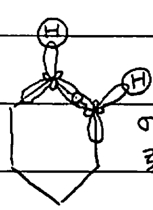
◦例2 LCAO法 linear combination of atomic orbitals

・ベンゼン C_6H_6

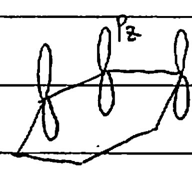
$C: (1s)^2 \underbrace{(2s)^2(2p)^2}$

↓

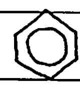
sp^2混成とp_z



σ電子
強い結合で局在



π電子
弱い結合で
非局在

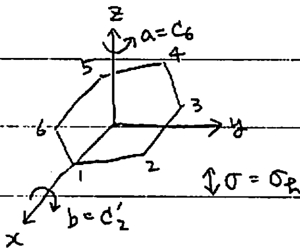


6個のπ電子はどうふるまうか？

(1s)²により遮蔽され 6-2

$$H=\sum_{i=1}^{6}\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i+\sum_{I=1}^{6}\Big(-\underbrace{\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{4e^2}{r_{Ii}}}_{C\text{ と }\pi}+\underbrace{V_\sigma(r_{Ii})}_{\sigma\text{ と }\pi}\Big)\Big)+\underbrace{\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r_{ij}}}_{\pi\text{ と }\pi}$$

・対称性は $G=D_{6h}$



3次元表現 ρ'

$$\rho'(a)=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & \\ & & 1\end{pmatrix}\qquad \rho'(b)=\begin{pmatrix}1 & & \\ & -1 & \\ & & -1\end{pmatrix}\qquad \rho'(\sigma)=\begin{pmatrix}1 & & \\ & 1 & \\ & & -1\end{pmatrix}$$

$$I=\sigma a^3\qquad \rho'(I)=\begin{pmatrix}-1 & & \\ & -1 & \\ & & -1\end{pmatrix}$$

	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3C_2'$	$3C_2''$	I	$2S_3$	$2S_6$	σ_h	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$	
χ'													=

$\therefore\ \rho'\sim$

・Hの最後の項を捨てる近似で $H=\sum_{i=1}^{6}H_i$

Hの固有関数は、H_iの固有関数の積を反対称化（Slater行列式）。

$H_i=\tilde{H}$ の固有関数 $\tilde{H}\psi(\vec{r})=\varepsilon\psi(\vec{r})$ を、各Cに局在した波動関数 ϕ_j の線型結合 $\psi(\vec{r})=\sum_{i=1}^{6}c_j\phi_j(\vec{r})$ と近似して、（εが極値となるように）変分法で c_j を定めよう。LCAO法。

$\phi_j(\vec{r})=\psi_{2p_z}(\vec{r}-\vec{a}_j)$　　$\vec{a}_j$: j番目のCの位置

ψ_{2p_z} 水素型原子の $2p_z$ 波動関数。実にとっておく。　$\psi_{2p_z}\sim z\,e^{-cr}$

(1)　$G\ni g$　　$g\phi_j(\vec{r})=\phi_j(\rho'(g)^{-1}\vec{r})=\psi_{2p_z}(\rho'(g)^{-1}\vec{r}-\vec{a}_j)=\psi_{2p_z}(\rho'(g)^{-1}(\vec{r}-\rho'(g)\vec{a}_j))$

$$a\phi_j(\vec{r})=\psi_{2p_z}(\underset{z\to z,\ r\to r}{\rho'(a)^{-1}}(\vec{r}-\underbrace{\rho'(a)\vec{a}_j}_{\vec{a}_{j+1}\ \leftarrow \text{mod } 6}))=\psi_{2p_z}(\vec{r}-\vec{a}_{j+1})=$$

$$b\phi_j(\vec{r})=\psi_{2p_z}(\underset{z\to -z,\ r\to r}{\rho'(b)^{-1}}(\vec{r}-\underbrace{\rho'(b)\vec{a}_j}_{\vec{a}_{8-j}}))=-\psi_{2p_z}(\vec{r}-\vec{a}_{8-j})=$$

$$\sigma\phi_j(\vec{r})=\psi_{2p_z}(\underset{z\to -z,\ r\to r}{\rho'(\sigma)^{-1}}(\vec{r}-\underbrace{\rho'(\sigma)\vec{a}_j}_{\vec{a}_j}))=-\psi_{2p_z}(\vec{r}-\vec{a}_j)=$$

$I=\sigma a^3$　　$I\phi_j(\vec{r})=$

$\phi_i(\vec{r})$は6次元表現ρの基底

$\rho(a)_{ij}=$　　　← mod 6,　$\rho(b)_{ij}=$　　　,　$\rho(\sigma)_{ij}=$

$\rho(I)_{ij}=$

	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3C_2'$	$3C_2''$	I	$2S_3$	$2S_6$	σ_h	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$	
χ													$=$

$\therefore\ \rho \sim$

$P^{\alpha} = \frac{d_\alpha}{|G|}\sum_{a\in G}\overline{\chi_\alpha(a)}\,a$ を用いて　　規格化は $\langle\phi_i|\phi_j\rangle=\delta_{ij}$ とした

$P(A_{2u})\phi_1 = \frac{1}{6}(\phi_1+\phi_2+\phi_3+\phi_4+\phi_5+\phi_6) \rightsquigarrow \psi_{a_{2u}} = \frac{1}{\sqrt{6}}(\phi_1+\phi_2+\phi_3+\phi_4+\phi_5+\phi_6)$

$P(B_{2g})\phi_1 = \frac{1}{6}(\phi_1-\phi_2+\phi_3-\phi_4+\phi_5-\phi_6) \rightsquigarrow \psi_{b_{2g}} = \frac{1}{\sqrt{6}}(\phi_1-\phi_2+\phi_3-\phi_4+\phi_5-\phi_6)$

$$\left.\begin{aligned} P(E_{1g})\phi_1 &= \tfrac{1}{6}(2\phi_1+\phi_2-\phi_3-2\phi_4-\phi_5+\phi_6)\\ P(E_{1g})\phi_2 &= \tfrac{1}{6}(\phi_1+2\phi_2+\phi_3-\phi_4-2\phi_5-\phi_6)\end{aligned}\right\} \rightsquigarrow \left\{\begin{aligned}\psi_{e_{1g},1} &= \tfrac{1}{2}(-\phi_2-\phi_3+\phi_5+\phi_6)\\ \psi_{e_{1g},2} &= \tfrac{1}{\sqrt{12}}(2\phi_1+\phi_2-\phi_3-2\phi_4-\phi_5+\phi_6)\end{aligned}\right.$$

$$\left.\begin{aligned} P(E_{2u})\phi_1 &= \tfrac{1}{6}(2\phi_1-\phi_2-\phi_3+2\phi_4-\phi_5-\phi_6)\\ P(E_{2u})\phi_2 &= \tfrac{1}{6}(-\phi_1+2\phi_2-\phi_3-\phi_4+2\phi_5-\phi_6)\end{aligned}\right\} \rightsquigarrow \left\{\begin{aligned}\psi_{e_{2u},1} &= \tfrac{1}{2}(-\phi_2+\phi_3-\phi_5+\phi_6)\\ \psi_{e_{2u},2} &= \tfrac{1}{\sqrt{12}}(-2\phi_1+\phi_2+\phi_3-2\phi_4+\phi_5+\phi_6)\end{aligned}\right.$$

Schrödinger 方程式を解かずに波動関数がわかった！ (εはわからない。∵ $[G,H]=0$)

ψ_i 6種. Hの波動関数は ψ_i の Slater 行列式. $E=\varepsilon_1+\cdots+\varepsilon_6$

(2) 変分法をまじめにやってみる.

$\tilde{H}\psi = \varepsilon\psi$, $\psi = \sum_{j=1}^{6} c_j\phi_j$ として ε を極小にする.

c_j 実にとっておく

$$\langle\varepsilon\rangle = \frac{\langle\psi|\tilde{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\sum_{ij} c_i c_j \tilde{H}_{ij}}{\sum_{ij} c_i c_j S_{ij}}$$

$\tilde{H}_{ij} = \tilde{H}_{ji} = \int \phi_i \tilde{H} \phi_j$　　$i=j$ Coulomb 積分, $i\neq j$ 共鳴積分

$S_{ij} = S_{ji} = \int \phi_i \phi_j$　　重なり積分

$S_{ii}=1$ としておく.

$\frac{\partial\langle\varepsilon\rangle}{\partial c_j} = 0$ より, $\langle\varepsilon\rangle = \varepsilon$ と書いて, $\sum_j(\tilde{H}_{ij}-\varepsilon S_{ij})c_j = 0$

$\therefore\ \det(\tilde{H}_{ij}-\varepsilon S_{ij}) = 0$　永年方程式 $\rightsquigarrow \varepsilon_r,\ c_{rj},\ \psi_r$

・ $S_{ij} = \delta_{ij}$, $\tilde{H}_{ij} = \begin{cases}\alpha & j=i\\ \beta & j=i\pm 1\\ 0 & その他\end{cases}$ と近似 (Hückel 近似) して解くと

$$\begin{cases}\varepsilon=\alpha-2\beta & c_j=-c_{j+1}\ \ \mathrm{mod}\ 6 & \leftrightarrow B_{2g}\\ \varepsilon=\alpha-\beta & c_j=-c_{j+1}-c_{j-1} & \leftrightarrow E_{2u}\\ \varepsilon=\alpha+\beta & c_j=c_{j+1}+c_{j-1} & \leftrightarrow E_{1g}\\ \varepsilon=\alpha+2\beta & c_j=c_{j+1} & \leftrightarrow A_{2u}\end{cases}$$

$\beta<0$ なので