

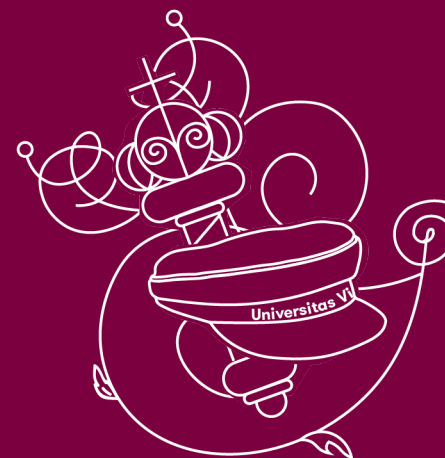
Grupių teorijos pritaikymas kvantinėje mechanikoje

Viktor Novičenko

2025 gegužė, Vilnius



**Vilnius
University**



Prisimenant Audrių Alkauską



Audrius Alkauskas gimė 1978-02-08, mirė 2023-05-14.

Grupės apibrėžimas ir keleta pavyzdžių

Grupę sudaro bet kokia aibė $G = \{g_1, g_2, g_3, \dots\}$, kurioje yra apibrėžta binarinė operacija turinti sekančias savybes:

(i) pilnumas $g_i \cdot g_j = g_k \in G$

(ii) asociatyvumas $(g_i \cdot g_j) \cdot g_k = g_i \cdot (g_j \cdot g_k)$

(iii) vienetinis elementas $e \cdot g_i = g_i \cdot e = g_i$

(iv) atvirkštinis elementas $g_i \cdot g_i^{-1} = g_i^{-1} \cdot g_i = e$

Pavyzdys 1: $G = \{0, 1, 2, \dots, n-1\}$
 $g_i \cdot g_j = (g_i + g_j) \bmod n$

Pavyzdys 2: $G = \{1, 2, \dots, p-1\}$
 $g_i \cdot g_j = (g_i g_j) \bmod p$

Pavyzdys 3: $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \in S_3$
 $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}$

Group-like structures					
	Totality ^a	Associativity	Identity	Inverse	Commutativity
Partial magma	Unneeded	Unneeded	Unneeded	Unneeded	Unneeded
Semigroupoid	Unneeded	Required	Unneeded	Unneeded	Unneeded
Small category	Unneeded	Required	Required	Unneeded	Unneeded
Groupoid	Unneeded	Required	Required	Required	Unneeded
Magma	Required	Unneeded	Unneeded	Unneeded	Unneeded
Quasigroup	Required	Unneeded	Unneeded	Required	Unneeded
Unital magma	Required	Unneeded	Required	Unneeded	Unneeded
Semigroup	Required	Required	Unneeded	Unneeded	Unneeded
Loop	Required	Unneeded	Required	Required	Unneeded
Monoid	Required	Required	Required	Unneeded	Unneeded
Group	Required	Required	Required	Required	Unneeded
Commutative monoid	Required	Required	Required	Unneeded	Required
Abelian group	Required	Required	Required	Required	Required

^a The closure axiom, used by many sources and defined differently, is equivalent.

Tam, kad įrodyti atvirkštinio elemento egzistavimą, galima pasinaudoti mažąją Ferma teorema [Alkauskas, G. The American Mathematical Monthly, 116(4), 362–364 (2009)]

Pavyzdys 4: $\mathbf{A} \in GL_n(\mathbb{C}) \quad \det(\mathbf{A}) \neq 0$
 $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{AB}$

Grupės įvaizdžiai, indukuotas įvaizdis

Grupės įvaizdis yra funkcija veikianti grupės elementą ir gražinanti tiesinį operatorių.

$$\begin{aligned} \hat{T} : G &\rightarrow \text{Aut}(\mathbb{C}^n) & \text{ arba } & \hat{T} : G \rightarrow GL_n(\mathbb{C}) \\ \hat{T}(g_i) &\in GL_n(\mathbb{C}) & & \hat{T}(g_i) \hat{T}(g_j) = \hat{T}(g_i \cdot g_j) \quad \hat{T}(e) = \mathbf{1}_n \end{aligned}$$

Jei turime įvaizdį $\mathbf{A}_i$ veikiantį vektorinėje erdvėje $\mathbb{R}^n$, tai galime perkelti grupės veikimą į vektorinę erdvę $\mathbb{V} = \{\varphi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}\}$, t.y. į erdvę sudarytą iš visų funkcijų nuo vektoriaus $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^n$

Indukuotas įvaizdis gaunamas, kai veikimas apibrėžiamas taip:

$$\hat{T}(g_i) \varphi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{A}_i^{-1} \mathbf{r})$$

Aibė visų tiesinių operatorių veikiančių erdvėje $\mathbb{V}$ taip pat yra vektorinė erdvė $\text{End}(\mathbb{V}) = \mathbb{V} \otimes \mathbb{V}^\dagger$

$$\hat{H} \in \text{End}(\mathbb{V}) \Rightarrow H : \mathbb{V} \times \mathbb{V}^\dagger \rightarrow \mathbb{C} \quad \text{ir tiesiškumas}$$

$$H(a\varphi, \psi^\dagger) = aH(\varphi, \psi^\dagger)$$

Analogija tarp operatorinio užrašymo
ir funkcinio užrašymo

$$H(\varphi_1 + \varphi_2, \psi^\dagger) = H(\varphi_1, \psi^\dagger) + H(\varphi_2, \psi^\dagger)$$

$$H(\varphi, b\psi^\dagger) = bH(\varphi, \psi^\dagger)$$

$$H(\varphi, \psi^\dagger) \iff \psi^\dagger(\hat{H}\varphi)$$

$$H(\varphi, \psi_1^\dagger + \psi_2^\dagger) = H(\varphi, \psi_1^\dagger) + H(\varphi, \psi_2^\dagger)$$

Į erdvę $\mathbb{V} \otimes \mathbb{V}^\dagger$ indukuojamas įvaizdis pagal jau naudotą taisyklę

$$\hat{T}^{(1,1)}(g_i) H(\varphi, \psi^\dagger) = H(\hat{T}(g_i^{-1})\varphi, \hat{T}^*(g_i^{-1})\psi^\dagger)$$

$$\hat{T}(g_i) \hat{H} \hat{T}^{-1}(g_i) \iff \hat{T}^{(1,1)}(g_i) \text{vec} [\hat{H}] = \hat{T}(g_i) \otimes \hat{T}^*(g_i) \text{vec} [\hat{H}]$$

matricom vektorizuotom matricom

Hamiltoniano tikrinių vektorių klasifikavimas pagal neredukuojamus grupės įvaizdžius

Turime Hamiltonianą $\hat{H}$ kuris transformuojasi kaip grupės trivialaus įvaizdžio vektorius.

$$\hat{T}(g_i) \hat{H} \hat{T}^{-1}(g_i) = \hat{H}$$

Vektorinę erdvę $\mathbb{V}$ galim supjaustyti pagal operatoriaus $\hat{H}$ tikrinius poerdvius arba pagal grupės neredukuojamų įvaizdžių invariantinius poerdvius.

$$\mathbb{V} = \bigoplus_{i=1, \dots, m} \mathbb{V}_{\lambda_i}$$

$$\mathbb{V} = \bigoplus_{\gamma \in \Gamma, t} \mathbb{V}^{(\gamma)t}$$

Pagrindinis teiginys: fiksuotas $\mathbb{V}_{\lambda_i}$ susideda iš “sveikų” invariantinių poerdvių $\mathbb{V}^{(\gamma)t}$ sumos.

Vido pasiūlytas įrodymas:

$$\mathbb{V}_{\lambda}^{(\gamma)t} = \mathbb{V}_{\lambda} \cap \mathbb{V}^{(\gamma)t} \quad \text{norime parodyti, kad} \quad = \begin{cases} \{0\} \\ \mathbb{V}^{(\gamma)t} \end{cases}$$

Konstruojame ortogonalų komplementą $\mathbb{V}^{(\Delta)} = \mathbb{V}^{(\gamma)t} / \mathbb{V}_{\lambda}^{(\gamma)t} = \mathbb{V}^{(\gamma)t} \ominus \mathbb{V}_{\lambda}^{(\gamma)t}$

Jei $\mathbb{V}_{\lambda}^{(\gamma)t} \neq \{0\}$, tai $0 \neq \mathbf{v} \in \mathbb{V}_{\lambda}^{(\gamma)t}$ paveiktas visais įvaizdžio operatoriais apgaubs visą erdvę:

$$\text{span}_{\mathbb{C}} \left\{ \hat{T}(g_i) \mathbf{v} : g_i \in G \right\} = \mathbb{V}^{(\gamma)t}$$

O tuomet bet kokiam nenuliniam vektoriui iš $\mathbb{V}^{(\Delta)}$ galime parašyti $\mathbf{v}^{(\Delta)} = \sum_{j=1}^n c_j \hat{T}(g_j) \mathbf{v}$

$$\hat{H} \mathbf{v}^{(\Delta)} = \sum_{j=1}^n c_j \hat{H} \hat{T}(g_j) \mathbf{v} = \sum_{j=1}^n c_j \hat{T}(g_j) \hat{H} \mathbf{v} = \lambda \sum_{j=1}^n c_j \hat{T}(g_j) \mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}^{(\Delta)}$$

vektorius yra tikrinis su ta pačia tikrine verte!
(gavome prieštarą)

Pavizdys: 1-matė kvantinė sistema

1-matėje erdvėje $\mathbb{R}$ turime užduotą grupės $C_2 = \{e, \sigma\}$ veikimą

$$e\mathbf{r} = \mathbf{r}, \quad \sigma\mathbf{r} = -\mathbf{r}, \quad \forall \mathbf{r} \in \mathbb{R}$$

Į funkcijų erdvę $\mathbb{V} = \{\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}\}$ indukuojamas įvaizdis pagal taisyklę $\hat{T}(g_i)\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(g_i^{-1}\mathbf{r})$

Tokia erdvė lengvai skaidoma į neredukuojamus įvaizdžius $\mathbb{V}_{\text{sym}} \ni \varphi_{\text{sym}}(-\mathbf{r}) = \varphi_{\text{sym}}(\mathbf{r})$

$$\mathbb{V}_{\text{a}} \ni \varphi_{\text{a}}(-\mathbf{r}) = -\varphi_{\text{a}}(\mathbf{r})$$

Hamiltonianas su simetriniu potencialu: $\hat{H} = -\frac{d^2}{dr^2} + \hat{V}(\mathbf{r}), \quad \hat{V}(-\mathbf{r}) = \hat{V}(\mathbf{r})$

Ar Hamiltonianas transformuojasi kaip trivialaus įvaizdžio vektorius erdvėje $\mathbb{V} \otimes \mathbb{V}^\dagger$?

$$\hat{T}(\sigma)\hat{V}(\mathbf{r})\hat{T}^{-1}(\sigma)\varphi(\mathbf{r}) = \hat{T}(\sigma)V(\mathbf{r})\varphi(-\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) \Rightarrow \hat{T}(\sigma)\hat{V}(\mathbf{r})\hat{T}^{-1}(\sigma) = \hat{V}(\mathbf{r})$$

$$\hat{T}(\sigma)\left(\frac{d}{dr}\right)\hat{T}^{-1}(\sigma)\varphi(\mathbf{r}) = \hat{T}(\sigma)\left(\frac{d}{dr}\right)\varphi(-\mathbf{r}) = -\hat{T}(\sigma)\varphi'(-\mathbf{r}) = -\varphi'(\mathbf{r}) \Rightarrow \hat{T}(\sigma)\left(\frac{d}{dr}\right)\hat{T}^{-1}(\sigma) = -\left(\frac{d}{dr}\right)$$

Tai gi visos tikriės būsenos yra arba $\varphi_{\text{sym}}(\mathbf{r})$ arba $\varphi_{\text{a}}(\mathbf{r})$.

Elektrinio dipolio operatorius $\mathbf{d} = e\mathbf{r}$ transformuojasi taip:

$$\hat{T}(\sigma)\mathbf{d}\hat{T}^{-1}(\sigma)\varphi(\mathbf{r}) = e\hat{T}(\sigma)\mathbf{r}\varphi(-\mathbf{r}) = -e\mathbf{r}\varphi(\mathbf{r}) \Rightarrow \hat{T}(\sigma)\mathbf{d}\hat{T}^{-1}(\sigma) = -\mathbf{d}$$

Todėl pagal Wigner-Eckart'o teoremą: $(\varphi_{\text{sym}2}, \mathbf{d}\varphi_{\text{sym}1}) = (\varphi_{\text{a}2}, \mathbf{d}\varphi_{\text{a}1}) = 0$

Pavizdys: 3-matėje erdvėje Hamiltonianas su sukimo simetrija D_3

Turime plokščio trikampio 3-matėje erdvėje posūkių grupę $D_3 = \{E, R_1, R_2, R_3, R_4, R_5\}$, kuri suskyla į tris klases $C_0 = \{E\}$, $C_1 = \{R_1, R_2\}$, $C_2 = \{R_3, R_4, R_5\}$

Naturalus įvaizdis $\mathbb{R}^3$ erdvėje: $E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, $R_1 = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, $R_2 = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
 $R_3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$, $R_4 = \begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$, $R_5 = \begin{pmatrix} 1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

Erdvėje $\mathbb{V} \otimes \mathbb{V}^\dagger$ išvestinės vektorius transformuojasi taip $\hat{T}(R_i) \left(\frac{d}{dq} \right) \hat{T}^{-1}(R_i) = \sum_{p=1}^3 (R_i)_{pq} \left(\frac{d}{dp} \right)$
 Tuomet kinetinės energijos vektorius transformuojasi taip

$$\begin{aligned} \hat{T}(R_i) \left(\sum_{q=1}^3 \frac{d^2}{dq^2} \right) \hat{T}^{-1}(R_i) &= \left[\sum_{q,p=1}^3 (R_i)_{pq} \left(\frac{d}{dp} \right) \right] \left[\sum_{q,s=1}^3 (R_i)_{sq} \left(\frac{d}{ds} \right) \right] \\ &= \sum_{q,p,s=1}^3 (R_i)_{pq} (R_i)_{sq} \left(\frac{d^2}{dpds} \right) = \sum_{q,p,s=1}^3 (R_i)_{pq} (R_i^T)_{qs} \left(\frac{d^2}{dpds} \right) = \sum_{p,s=1}^3 \delta_{ps} \left(\frac{d^2}{dpds} \right) = \sum_{s=1}^3 \frac{d^2}{ds^2} \end{aligned}$$

$$\hat{T}(R_i) (\hat{\mathbf{r}})_q \hat{T}^{-1}(R_i) \varphi(\mathbf{r}) = \hat{T}(R_i) (\mathbf{r})_q \varphi(R_i \mathbf{r}) = (R_i^{-1} \mathbf{r})_q \varphi(\mathbf{r}) \Rightarrow \hat{T}(R_i) (\hat{\mathbf{r}})_q \hat{T}^{-1}(R_i) = \sum_{p=1}^3 (R_i)_{pq} (\hat{\mathbf{r}})_p$$

Atrankos taisyklės elektrinio dipolio operatoriui gaunamos iš Wigner-Eckart'o teoremos:

$$\left(\varphi^{(\text{tr})}, \hat{d}_z \phi^{(\text{tr})} \right) = \left(\varphi^{(2d)}, \hat{d}_z \phi^{(\text{tr})} \right) = \left(\varphi^{(\text{alt})}, \hat{d}_z \phi^{(\text{alt})} \right) = \left(\varphi^{(2d)}, \hat{d}_z \phi^{(\text{alt})} \right) = 0$$

$$\left(\varphi^{(\text{tr})}, \hat{d}_{x,y} \phi^{(\text{tr})} \right) = \left(\varphi^{(\text{alt})}, \hat{d}_{x,y} \phi^{(\text{tr})} \right) = \left(\varphi^{(\text{alt})}, \hat{d}_{x,y} \phi^{(\text{alt})} \right) = 0$$

Pabaiga



**Vilnius
University**

