Własności reprezentacji nieredukowalnych

I Lemat Schura

$\hat{B}: U \to U$ jest operatorem liniowym w niezmienniczej podprzestrzeni $U \subset V$ oraz $\forall g \in G \ \hat{B}\, T(g) = T(g)\, \hat{B} \Rightarrow \hat{B} = \lambda \underline{E}$, gdzie $\underline{E}$ jest operatorem identycznościowym

Dowód:

Niech $\vec{b}$ będzie wektorem własnym $\hat{B}$ do wartości własnej λ

$$\hat{B}\vec{b} = \lambda \vec{b}$$

$$\hat{B}\left(T(g)\vec{b}\right) = T(g)\hat{B}\vec{b} = \lambda\left(T(g)\vec{b}\right),$$

czyli $T(g)\vec{b}$ jest też wektorem własnym $\hat{B}$ do tej samej wartości własnej. Wektory własne rozpinają przestrzeń wektorową, która jest podprzestrzenią U. Jest ona zamknięta ze względu na działanie grupy w postaci operatorów $T(g)$, a więc jest G-modułem.

Teraz przywołujemy nieredukowalność, co oznacza, że U nie może mieć właściwego podmodułu.

Jedyne dopuszczalne podmoduły to albo cały U, albo wektor $\vec{0}$.

Przypadek drugi (tylko $\vec{0}$) nie jest możliwy, bo każdy operator liniowy posiada przynajmniej jeden właściwy (niezerowy) wektor własny

w reprezentacji macierzowej

$$B b = \lambda b$$

$$\det(B - \lambda E) = 0$$

To ostatnie równanie ma przynajmniej jeden pierwiastek λ z odpowiadającym mu wektorem własnym $\vec{b}$

Dlatego pozostaje przypadek pierwszy, w którym wektory własne $\hat{B}$ do wartości własnej λ rozpinają cały U

$$\vec{u} \in U \Rightarrow \vec{u} = \sum_i u_i \vec{b_i}$$

$$\hat{B}\vec{u} = \sum_i u_i \hat{B} \vec{b_i} = \sum_i u_i \lambda \vec{b_i} =$$

$$= \lambda \sum_i u_i \vec{b_i} = \lambda \vec{u}, \quad \forall \vec{u} \in U$$

II Lemat Schura

w tym przypadku operator liniowy $\hat{B}$ jest odwzorowaniem

$$\hat{B} : U \to U'$$ między dwoma przestrzeniami wektorowymi U i U', w których działają odpowiednie reprezentacje nieredukowalne $T(g)$ i $T'(g)$

$$\forall g \in G \quad \hat{B}\, T(g) = T'(g)\, \hat{B} \Rightarrow \hat{B} = \hat{O},$$

gdzie $\hat{O}$ jest operatorem liniowym, który odwzorowuje każdy wektor z U na wektor zerowy w U'

$$\forall \vec{u} \in U \quad \hat{O}\vec{u} = \vec{0}' \in U'$$

W dowodzie rozpatrujemy trzy przypadki

(1) $n < n'$

(2) $n > n'$

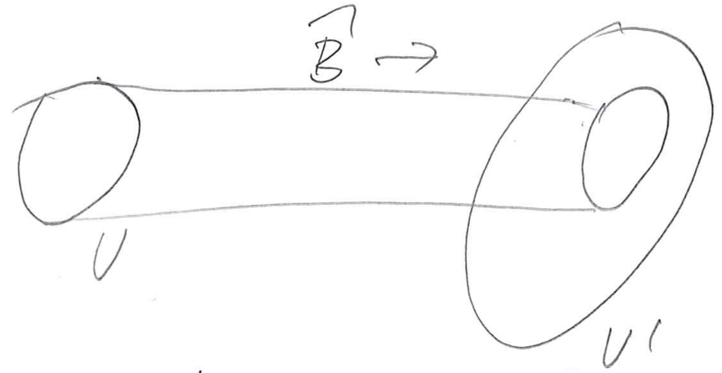
(3) $n = n'$

(1) $n < n'$

$\vec{u} \in U$

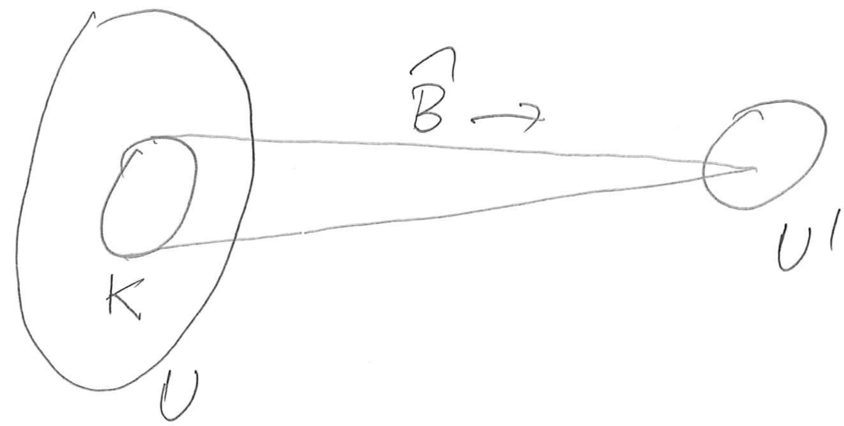
$T'(g)\hat{B}\vec{u} = \hat{B}\underbrace{T(g)\vec{u}}_{\vec{u}' \in U} \in \hat{B}U = \mathrm{Im}\,\hat{B}$

$\mathrm{Im}\,\hat{B}$ jest podmodułem U'



Ponieważ U' jest nieredukowalny, więc $\hat{B}U$ może być albo całym U' albo wektorem zerowym $\vec{O}'$. Nie może być całym U', bo $n < n'$ i dlatego wymiar $\hat{B}U$, m, nie może być większy niż n. Oznacza to, że $m \leq n < n'$ i jedyną możliwością jest $\hat{B} = \hat{O}$

(2) $n > n'$



Skupmy się na jądrze przekształcenia

$K := \{\vec{k} \in U : \hat{B}\vec{k} = \vec{0}'\}$

K jest podmodułem U, bo

$\hat{B}(T(g)\vec{k}) = T'(g)\hat{B}\vec{k} = T'(g)\vec{0}' = \vec{0}'$,

co oznacza, że działanie dowolnego operatora $T(g)$ na dowolny wektor z K daje wektor z K.

U jest nieredukowalny, więc K jest albo całym U albo jedynym elementem K jest $\vec{0} \in U$.

K nie może być jednoelementowe: wymiar U' jest mniejszy niż wymiar U, więc nie wszystkie z wektorów $\hat{B}\vec{e}_i$, $i = 1, 2, \ldots, n$, mogą być liniowo niezależne

$$\sum_i \alpha_i \hat{B}\vec{e}_i = \vec{0}', \text{ gdzie nie wszystkie}$$

α_i są jednocześnie równe zero.

Wynika stąd, że nietrywialna kombinacja liniowa, będąca niezerowym wektorem w U, $\sum_i \alpha_i \vec{e}_i$ należy do K

$$\sum_i \alpha_i \hat{B}\vec{e}_i = \hat{B}\left(\sum_i \alpha_i \vec{e}_i\right) = \vec{0}'$$

Dlatego $K = U$ i zachodzi
$\forall \vec{u} \in U \quad B\vec{u} = \vec{0}'$

(3) $n = n'$

K jest także w tym przypadku podmodułem U, ale i tym razem K nie może być jednoelementowe ($\vec{0}$). Gdyby tak było, to $\hat{B}$ byłby odwzorowaniem bijektywnym:

$$B\vec{u} = B\vec{u}'$$

$$\underbrace{B(\vec{u} - \vec{u}')}_{} = \vec{0}'$$

to może być tylko wektorem zerowym

$$\vec{u} - \vec{u}' = \vec{0} \iff \vec{u} = \vec{u}'$$

Wtedy istniałby operator odwrotny $\hat{B}^{-1}$ i równanie

$$\hat{B}\,T(g) = T'(g)\hat{B}$$

można zapisać w postaci

$$T'(g) = \hat{B}\,T(g)\hat{B}^{-1},$$

co oznaczałoby wbrew założeniu równoważność reprezentacji T' i T.

Dlatego $K = U$ i zachodzi
$\forall \vec{u} \in U \quad \hat{B}\vec{u} = \vec{0}'$

Fundamentalne twierdzenie o ortogonalności

V_ν, V_μ — dwa G-moduły wyposażone w nierównoważne reprezentacje nieredukowalne

$\hat{A}$ - dowolny operator liniowy

$$A : V_\nu \to V_\mu$$

Budujemy operator

$$\hat{B} := \sum_g{}' \, T^{(\mu)}(g)\, \hat{A}\, T^{(\nu)}(g^{-1})$$

(Dla grup zwartych $\sum_g{}' \to \int d\mu(g)$)

$h \in G$

Policzmy $T^{(\mu)}(h)\hat{B} =$

$$= \sum_g{}' \, T^{(\mu)}(h) T^{(\mu)}(g)\, \hat{A}\, T^{(\nu)}(g^{-1}) =$$

$$= \sum_g{}' \, T^{(\mu)}(hg)\, \hat{A}\, T^{(\nu)}(g^{-1})$$

$$hg = g', \quad g = h^{-1}g', \quad g^{-1} = g'^{-1}h$$

$$= \sum_{g'}{}' \, T^{(\mu)}(g')\, \hat{A}\, T^{(\nu)}(g'^{-1}h) =$$

$$= \sum_{g'}{}' \, T^{(\mu)}(g')\, \hat{A}\, T^{(\nu)}(g'^{-1})\, T^{(\nu)}(h)$$

$$= \hat{B}\, T^{(\nu)}(h)$$

W takim razie $\hat{B}$ spełnia warunki II lematu Schura, więc $\hat{B} = \hat{O}$, chyba że $\mu = \nu$ i wtedy $\hat{B} = \lambda \hat{E}$.

W postaci macierzowej

$$B := \sum_g D^{(\mu)}(g) \, A \, D^{(\nu)}(g^{-1}) = \lambda_A^{(\mu)} \delta^{\mu\nu} \mathbb{1}$$

Wartość $\lambda_A^{(\mu)}$ zależy od macierzy A i reprezentacji nieredukowalnej.

Do tej pory A była zupełnie dowolna.

Teraz weźmy A, której wszystkie elementy macierzowe są równe zero z wyjątkiem $A_{rs} = 1 \therefore A_{lm} = \delta_{lr} \delta_{ms}$

$$\lambda_A^{(\mu)} \longrightarrow \lambda_{rs}^{(\mu)}$$

$$\sum_{l,m} \sum_g D_{il}^{(\mu)}(g) \, A_{lm} \, D_{mj}^{(\nu)}(g^{-1}) = \lambda_A^{(\mu)} \delta^{\mu\nu} \delta_{ij}$$

$$\sum_g \sum_{l,m} D_{il}^{(\mu)}(g) \, \delta_{lr} \delta_{ms} \, D_{mj}^{(\nu)}(g^{-1}) =$$

$$= \sum_g D_{ir}^{(\mu)}(g) \, D_{sj}^{(\nu)}(g^{-1}) = \lambda_{rs}^{(\mu)} \delta^{\mu\nu} \delta_{ij}$$

Bierzemy $\mu=\nu$ i liczymy ślad obu stron

$$\sum_i \sum_g D^{(\mu)}_{ir}(g)\, D^{(\mu)}_{si}(g^{-1}) = \lambda^{(\mu)}_{rs} \underbrace{\sum_i \delta_{ii}}_{n_\mu}$$

$$\sum_g \underbrace{\sum_i D^{(\mu)}_{si}(g^{-1})\, D^{(\mu)}_{ir}(g)}_{\text{mnożenie macierzowe}} = n_\mu \lambda^{(\mu)}_{rs}$$

$$\sum_g \underbrace{\left(D^{(\mu)}(g^{-1})\, D^{(\mu)}(g) \right)}_{}{}_{sr} = n_\mu \lambda^{(\mu)}_{rs}$$

$$D^{(\mu)}(g^{-1}g) = D^{(\mu)}(e) = \mathbb{1}_{n_\mu \times n_\mu}$$

$$\sum_g \delta_{sr} = n_\mu \lambda^{(\mu)}_{rs}$$

$$|G|\, \delta_{sr} = n_\mu \lambda^{(\mu)}_{rs}$$

$$\lambda^{(\mu)}_{rs} = \frac{|G|}{n_\mu} \delta_{rs}$$

Mieliśmy $$\sum_g D^{(\mu)}_{ir}(g)\, D^{(\nu)}_{sj}(g^{-1}) = \lambda^{(\mu)}_{rs}\, \delta^{\mu\nu} \delta_{ij}$$

więc
$$\sum_g D^{(\mu)}_{ir}(g)\, D^{(\nu)}_{sj}(g^{-1}) = \frac{|G|}{n_\mu} \delta^{\mu\nu} \delta_{ij} \delta_{rs}$$

$|G|$ to liczba elementów w grupie G

$$\sum_g D_{ir}^{(\mu)}(g)\, D_{sj}^{(\nu)}(g^{-1}) = \frac{|G|}{n_\mu}\delta^{\mu\nu}\delta_{ij}\delta_{rs}$$

ze względu na poprzednio uzyskane wyniki można rozważać reprezentacje unitarne bez żadnej straty ogólności.

Wówczas
$$D_{sj}^{(\nu)}(g^{-1}) = \left(D_{sj}^{(\nu)}(g)\right)^{-1} = D_{js}^{(\nu)*}(g)$$

$$\sum_g D_{ir}^{(\mu)}(g)\, D_{js}^{(\nu)*}(g) = \frac{|G|}{n_\mu}\delta^{\mu\nu}\delta_{ij}\delta_{rs}$$

Skupmy się na jednej reprezentacji nieredukowalnej, biorąc $\mu=\nu$.
Dla ustalonych i, r możemy traktować $D_{ir}^{(\mu)}(g)$ jako $|G|$-wymiarowy wektor, a sumę po elementach grupy jako iloczyn skalarny!
Każdy z "wektorów" $D_{\underbrace{ir}}^{(\mu)}(g)$ indeksowany jest parą (i,r), jest ich więc n_μ^2.
To było dla reprezentacji (μ).
To samo zachodzi dla każdej innej reprezentacji nieredukowalnej.
Co więcej "wektory" z jednej reprezentacji nieredukowalnej są ortogonalne do "wektorów" z innej reprezentacji nieredukowalnej.

Jakich wektorów dla ustalonej grupy G nie może być dowolnie wiele; ich liczba jest ograniczona od góry przez liczbę elementów w grupie

$$\sum_{\mu} n_{\mu}^{2} \leq |G|$$

Ponieważ $n_\mu \geq 1$ wynika stąd, że liczba nieredukowalnych reprezentacji skończonej grupy jest ściśle ograniczona.

Charaktery

$$\chi(g) = Tr(D(g))$$

Własności
(1) Charakter jest ten sam dla wszystkich reprezentacji równoważnych

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

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

$$= Tr(\underbrace{S^{-1} S}_{1} D(g)) = Tr(D(g))$$

(2) χ jest taki sam dla sprzężonych elementów

$$D(hgh^{-1}) = D(h)\,D(g)\,D(h^{-1}) =$$
$$= D(h)\,D(g)\,(D(h))^{-1}$$
$$\mathrm{Tr}(D(hgh^{-1})) = \mathrm{Tr}(D(h)\,D(g)\,D^{-1}(h))$$
$$= \mathrm{Tr}(\underbrace{D^{-1}(h)\,D(h)}_{\mathbb{1}}\,D(g)) = \mathrm{Tr}(D(g))$$

(3) Jeśli D jest unitarna, to $D^{-1} = D^{+}$

$$\chi(g^{-1}) = \mathrm{Tr}(D(g^{-1})) = \mathrm{Tr}((D(g))^{-1})$$
$$= \mathrm{Tr}((D(g))^{+}) = \chi^{*}(g)$$

$$\sum_g D_{ir}^{(\mu)}(g)\, D_{js}^{(\nu)*}(g) = \frac{|G|}{n_\mu}\delta^{\mu\nu}\delta_{ij}\,\delta_{rs} \Big/ \begin{matrix}\delta_{ir}\\ \delta_{js}\end{matrix}$$

50

$$\sum_g \sum_{i,\underline{r}} \sum_{j,\underline{s}} \underbrace{D_{ir}^{(\mu)}(g) D_{js}^{(\nu)*}(g)}_{\delta_{ir}\,\delta_{js}} = \frac{|G|}{n_\mu}\delta^{\mu\nu} \sum_{i,\underline{r}} \sum_{j,\underline{s}} \delta_{ij}\underbrace{\delta_{rs}}_{\delta_{ir}\,\delta_{js}}$$

$$\sum_g \sum_i \sum_j D_{ii}^{(\mu)}(g)\, D_{jj}^{(\nu)*}(g) = \frac{|G|}{n_\mu}\delta^{\mu\nu}\, n_\mu = |G|\,\delta^{\mu\nu}$$

$$\sum_{i,\underline{r}} \sum_{j,s} \delta_{ij}\,\underline{\delta_{rs}\,\delta_{ir}}\,\delta_{js} =$$

$$= \sum_i \sum_{j,\underline{s}} \delta_{ij}\,\underline{\delta_{is}\delta_{js}} = \sum_{i,j} \delta_{ij}\,\delta_{ij} = \sum_i \delta_{ii} = n_\mu$$

$$\sum_g \underbrace{\sum_i D_{ii}^{(\mu)}(g)}_{\chi^{(\mu)}(g)} \underbrace{\sum_j D_{jj}^{(\nu)*}(g)}_{\chi^{(\nu)*}(g)} = |G|\,\delta^{\mu\nu}$$

$$\underbrace{\frac{1}{|G|}\sum_g \chi^{(\mu)}(g)\,\chi^{(\nu)*}(g)}\ = \delta^{\mu\nu}$$

Potraktujmy to wyrażenie jako iloczyn skalarny charakterów $\langle \chi^{(\nu)} | \chi^{(\mu)} \rangle$

$$\langle \varphi, \chi \rangle := \frac{1}{|G|}\sum_g \varphi(g)\,\chi(g^{-1})$$

Wyrażenie

$$\frac{1}{|G|}\sum_{g} \chi^{(\mu)}(g)\,\chi^{(\nu)*}(g) = \delta^{\mu\nu}$$

oznacza, że charaktery nierównoważnych nieredukowalnych reprezentacji są ortonormalne.

Ponieważ charaktery elementów sprzężonych grupy są równe, wszystkie elementy klasy sprzężenia K_i mają taki sam charakter

$$\frac{1}{|G|}\sum_{i}^{\overset{\text{liczba klas}}{k}} k_i\, \chi_i^{(\mu)}\,\chi_i^{(\nu)*} = \delta^{\mu\nu}$$

suma po klasach

liczba elementów w klasie i

$\chi_i^{(\mu)}$ – charakter dla całej klasy i reprezentacji (μ)

Ten wzór oznacza relację ortogonalności wektorów $\chi_i^{(\mu)}$ w przestrzeni k-wymiarowej! Tych wektorów nie może być więcej niż k. Mamy kolejne ograniczenie na liczbę nierównoważnych reprezentacji r:

$$r \le k$$

Można pokazać (zobacz książka M. Hamermesh, Group Theory and its Applications to Physical Problems, Addison-Wesley (§3-7), że charaktery spełniają jeszcze jedną relację ortogonalności

$$\frac{1}{|G|}\sum_{\mu} k_i \chi_i^{(\mu)} \chi_j^{(\nu)*} = \delta_{ij}$$

To daje nierówność w drugim kierunku $r \geq k$, więc ostatecznie

$$\boxed{r = k}$$

Degeneracja

Rozważamy wartości własne i wektory własne hamiltonianu H_0, który jest niezmienniczy względem grupy transformacji G

$$H_0 |E^{(0)}\rangle = E^{(0)} |E^{(0)}\rangle$$

$U(g)$ - operator unitarny indukowany w przestrzeni stanów przez fizyczną transformację g

$$[H_0, U(g)] = 0$$

$$H_0 U(g) |E^{(0)}\rangle = U(g) H_0 |E^{(0)}\rangle =$$

$$= E^{(0)} U(g) |E^{(0)}\rangle$$

Oznacza to, że $U(g)|E^{(0)}\rangle$ jest także stanem własnym H_0 do wartości własnej $E^{(0)}$. Dlatego wektory własne należące do danej wartości własnej $E^{(0)}$ transformują się między sobą przy działaniu grupy, stanowiąc podmoduł w pełnej przestrzeni wektorów własnych i tworząc bazę reprezentacji G.

Może istnieć tylko jeden wektor własny do wartości własnej $E^{(0)}$; w tym przypadku mówimy o braku degeneracji. Reprezentacja jest wtedy reprezentacją trywialną.

W wielu przypadkach mamy więcej takich stanów własnych i taki poziom energetyczny nazywamy zdegenerowanym; W tym przypadku działanie grupy na przestrzeni zdegenerowanych stanów indukuje r-wymiarową reprezentację, gdzie r to liczba zdegenerowanych wektorów własnych.

Jeśli nie ma dodatkowych symetrii (brak tzw. przypadkowej degeneracji), taka reprezentacja jest nieredukowalna.

Dany poziom energetyczny odpowiada reprezentacji nieredukowalnej $D^{(\mu)}$ grupy G oraz r jest wymiarem $D^{(\mu)}$: $r = n_\mu$. Poziom oznaczamy

$E^{(0)} \to E^{(0)}_{\alpha\mu}$, α - informacja niezwiązana z grupą G

Znoszenie degeneracji

Dodatkowe oddziaływanie

$$H_0 \to H_I = H_0 + V$$

powoduje, że H_I jest niezmienniczy względem podgrupy H grupy G

Nowe poziomy energetyczne są teraz klasyfikowane przez nieredukowalne reprezentacje H!

Jeśli elementy macierzowe V są małe w porównaniu z różnicami między początkowymi energiami poziomów, możemy dostrzec pochodzenie nowych poziomów