

§ 2. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ СИСТЕМЕ

Рассмотрим систему, характеризуемую не зависящим от времени гамильтонианом $H(r)$ с произвольной волновой функцией $\psi(r)$, не обязательно являющейся его собственной функцией. Как и в предыдущем параграфе, вектор r в пространстве координат описывает n степеней свободы системы. Любая группа \mathcal{G} преобразований координат $G_a r = r'$ будет задавать соответствующий набор индуцированных преобразований $T(G_a)$ в пространстве волновых функций в соответствии с определением (3.37):

$$T(G_a) \psi(r) = \psi'(r) = \psi(G_a^{-1}r).$$

Согласно формуле (3.24), ею определяется также трансформированный оператор Гамильтона $T(G_a)HT^{-1}(G_a) = H'$. Если гамильтониан инвариантен при этих преобразованиях, т. е. если

$$T(G_a) HT^{-1}(G_a) = H \quad (5.10)$$

для всех элементов G_a группы \mathcal{G} , то группу \mathcal{G} называют группой симметрии гамильтониана. Вскоре мы увидим, что существование группы симметрии приводит ко многим важным следствиям. При умножении справа на T условие (5.10) приобретает эквивалентную форму $T(G_a)H - H T(G_a) = 0$, или $[T(G_a), H] = 0$, т. е. гамильтониан коммутирует со всеми индуцированными преобразованиями группы.

Элементы G_a группы симметрии называют элементами симметрии. Практически, определив один-два элемента симметрии гамильтониана, обычно можно построить всю группу симметрии, перемножая эти элементы и возводя их в степень до тех пор, пока не перестанут появляться новые элементы симметрии. [Из равенства (5.10) сразу же следует, что произведение двух элементов симметрии дает новый элемент симметрии.] Однако довольно трудно удостовериться в том, что найдены именно все элементы симметрии данного гамильтониана, а не просто элементы подгруппы полной группы симметрии.

При многих преобразованиях, таких, как повороты, отражения и трансляции, оператор кинетической энергии инвариантен, так что условие инвариантности гамильтониана сводится здесь к следующему условию, налагаемо-

му на функцию потенциальной энергии V :

$$V(\mathbf{r}) = V(G_a \mathbf{r}). \quad (5.11)$$

Выше мы дали достаточно строгое определение индуцированного преобразования, но можно представить себе и более абстрактный набор преобразований $T(G_a)$ в функциональном пространстве, которые не связаны с преобразованиями координат, но тем не менее удовлетворяют групповым аксиомам и, следовательно, определяют некоторую группу симметрии.

§ 3. ВЫРОЖДЕНИЕ И КЛАССИФИКАЦИЯ ПО СИММЕТРИИ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ И СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ

Первые два следствия существования группы симметрии \mathcal{G} гамильтониана тесно взаимосвязаны, и мы рассмотрим их вместе. Сначала мы их сформулируем, а затем покажем, как их можно вывести.

1. Собственные функции ψ и собственные значения E гамильтониана H можно классифицировать по не-приводимым представлениям $T^{(\alpha)}$ группы симметрии \mathcal{G} и обозначать через $\psi^{(\alpha)}$ и $E^{(\alpha)}$.
2. Энергетический уровень $E^{(\alpha)}$ должен быть по меньшей мере s_α -кратно вырожден, если s_α — размерность соответствующего представления $T^{(\alpha)}$.

Для вывода этих следствий вначале отметим, что набор всех вырожденных собственных функций, соответствующих некоторому данному собственному значению E , образует векторное пространство V . (Если функции ϕ и ψ обе соответствуют энергии E , то любая их линейная комбинация тоже соответствует энергии E .) Далее докажем, что пространство V должно быть инвариантным по отношению к преобразованиям $T(G_a)$, индуцированным группой \mathcal{G} . Чтобы продемонстрировать инвариантность, достаточно определить обычным образом трансформированную функцию $\psi' = T(G_a)\psi$, и тогда получим, что если ψ есть собственная функция оператора H с энергией E , то ψ' — тоже собственная функция оператора H с энергией E , так как

$$H\psi' = H T(G_a) \psi \Rightarrow T(G_a) H\psi = E T(G_a) \psi \Rightarrow E\psi'. \quad (5.12)$$

[Здесь мы использовали формулу (5.10).] Таким образом, представление группы симметрии осуществляется в векторном пространстве V через преобразования $T(G_a)$.