

Andrzej Raczyński

Mechanika kwantowa cz. 9

1 Symetrie

Istotą symetrii jest istnienie klasy przekształceń, które nie zmieniają wyglądu obiektów lub przebiegu zjawisk. Jeśli istnieje jakiś stan realizowalny, to z symetrii wynika, że istnieje też inny stan realizowalny. Przejście od jednego stanu do drugiego opisane jest ściśle matematycznie. Prawa fizyki są niezmiennicze, równania są współzmiennicze, tzn. mają taką samą postać po dokonaniu transformacji symetrii i dają się zapisać za pomocą obiektów, których własności transformacyjne są dobrze określone (wektorów, tensorów, spinorów,...).

Symetrie mają znaczenie przy poszukiwaniu praw fizyki: próbując zgadnąć równania jakiejś teorii i wiedząc, że ma być zachowana symetria, mamy bardzo ograniczone pole poszukiwań. Z symetriami są ściśle związane prawa zachowania. Symetrie ograniczają klasy rozwiązań, dostarczają ułatwień technicznych. Na przykład często można bez wykonywania obliczeń powiedzieć, że pewne elementy macierzowe są równe zero i jakieś przejście jest niemożliwe. Kierując się symetrią układu kwantowego, a więc jego hamiltonianu, można systematyzować jego wektory własne, w szczególności w podprzestrzeni stanów zdegenerowanych.

Symetrie mogą być ciągle, tzn. dające się sparametryzować jedną lub kilkoma liczbami rzeczywistymi (np. przesunięcia lub obroty), lub dyskretne (np. odbicia, przesunięcia o ustalony wektor, obroty o ustalony kąt lub permutacje cząstek).

Transformacje symetrii tworzą grupę, w ogólności nieprzermienną, o elementach g_α, g_β, \dots . Złożenie dwóch takich transformacji też jest transformacją symetrii $g_\alpha g_\beta = g_\gamma$, składanie transformacji jest łączne $(g_\alpha g_\beta) g_\gamma = g_\alpha (g_\beta g_\gamma)$, istnieje transformacja identycznościowa g_0 , taka, że $g_\alpha g_0 = g_\alpha$, dla każdej transformacji istnieje transformacja odwrotna $g_\alpha g_\alpha^{-1} = g_0$.

W przypadku grup ciągłych przy pewnych dodatkowych założeniach matematycznych grupa nosi nazwę grupy Liego.

Istnieje izomorfizm, który każdemu elementowi g_α grupy przyporządkowuje operator unitarny $U(\alpha)$, działający w przestrzeni Hilberta układu kwantowego.

Dla grup ciągłych można operator $U(\alpha)$ złożyć z operacji nieskończenie małych (nieskończenie małych). Dla tych ostatnich można napisać

$$U(\alpha) = U(0) - i\alpha G \equiv I - i\alpha G, \quad (1)$$

gdzie sparametryzowano transformację tak, że dla wartości $\alpha = 0$ otrzymano operator jednostkowy I . Operator ma być unitarny, a więc

$$U(\alpha)U^\dagger(\alpha) = (I - i\alpha G)(I + i\alpha G^\dagger) = I - i(G - G^\dagger)\alpha = I, \quad (2)$$

skąd wynika, że G jest operatorem samosprzężonym i może reprezentować wielkość fizyczną.

Operator odpowiadający transformacji makroskopowej charakteryzowanej parametrem α można złożyć z N operatorów nieskończenie małych charakteryzowanych parametrem $\frac{\alpha}{N}$

$$U(\alpha) = (I - i\frac{\alpha}{N}G)^N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \exp(-i\alpha G). \quad (3)$$

Jeśli grupa jest wieloparametrowa, tzn. $g = g_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n}$, to transformacja nieskończenie mała ma postać

$$U(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) = I - i \sum_j \alpha_j G_j, \quad (4)$$

a dla dowolnych wartości parametrów można napisać

$$U(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) = \exp[-i \sum_j \alpha_j G_j]. \quad (5)$$

Operatory G_j nazywają się generatorami transformacji symetrii, tworzą zbiór zwany algebrą Liego; w szczególności dla każdej pary określony jest komutator $[G_j, G_k]$.

Dla transformacji dyskretnej istnieje operator $U(\alpha)$, ale oczywiście nie istnieją generatory. Zdarza się, że $U^2 = I$, wtedy $U^\dagger = U^{-1} = U$ i sam operator U reprezentuje wielkość fizyczną.

Niech dany będzie układ opisany hamiltonianem H , który może zależeć od czasu. Operator ewolucji $T(t)$ w obrazie Schrödingera spełnia równanie różniczkowe

$$i\hbar \frac{d}{dt} T(t) = H(t)T(t), \quad (6)$$

lub jego całkowity odpowiednik

$$T(t) = I + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H(t')T(t')dt'. \quad (7)$$

Amplituda przejścia z pewnego stanu i do innego stanu f po czasie t ma postać

$$\langle f|T(t)|i\rangle. \quad (8)$$

Niech dany będzie operator symetrii U , który przekształca stany i oraz f odpowiednio w i' oraz f' . Amplituda przejścia między tymi stanami wynosi

$$\langle f'|T(t)|i'\rangle. \quad (9)$$

Symetria objawia się jest równością prawdopodobieństw przejścia między stanami przetransformowanymi i nieprzetransformowanymi, czyli

$$\langle f'|T(t)|i'\rangle \equiv \langle f|U^\dagger T(t)U|i\rangle, \quad (10)$$

czyli $U^\dagger T(t)U = T(t)$, albo $T(t)U = UT(t)$ (bo $U^\dagger = U^{-1}$). Można dopuścić, że amplituda przejścia zmienia się o czynnik fazowy, ale to nie stanowi istotnego uogólnienia.

Z równania całkowego na operator ewolucji $T(t)$ wynikają relacje

$$\begin{aligned} UT(t) &= U + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t UH(t')T(t')dt', \\ T(t)U &= U + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H(t')T(t')Udt'. \end{aligned} \quad (11)$$

Jeśli zachodzi symetria, tzn. $UT = TU$, to

$$0 = UT(t) - T(t)U = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t [UH(t') - HU(t')]T(t')dt', \quad (12)$$

z czego można wnosić, że $UH = HU$ w w każdej chwili. Jeśli U jest wielkością fizyczną, to jest ona zachowana. Jeśli w przypadku ciągłej symetrii $U =$

$\exp(-i\alpha G)$, oznacza to, że generator G komutuje z hamiltonianem, czyli jest wielkością zachowaną. Symetria implikuje więc zachowanie wielkości fizycznej.

Odwrotnie, jeśli wielkość fizyczna G jest zachowana, czyli komutuje z hamiltonianem, to $U = \exp(-i\alpha G)$ też z nim komutuje; w przypadku dyskretnym z założenia U komutuje z hamiltonianem. Wtedy

$$UT(t) - T(t)U = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H(t') [UT(t') - T(t')U] dt'. \quad (13)$$

Powyższe równanie na operator $UT - TU$ ma rozwiązanie zerowe, czyli $UT = TU$. Zachowanie wielkości fizycznej implikuje więc symetrię.

Można też mówić o transformacji wielkości fizycznych. Wartość średnia operatora A w stanie przetransformowanym daje się zapisać jako

$$\langle n' | A | n' \rangle = \langle n | U^\dagger A U | n \rangle, \quad (14)$$

co oznacza, wartość średnią przetransformowanego operatora A' w stanie nieprzetransformowanym, jeśli $A' = U^\dagger A U$.

Jeśli U jest transformacją symetrii i możliwy jest stan układu opisany funkcją ψ , tzn. spełnione jest równanie Schrödingera

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi = H\psi, \quad (15)$$

to możliwy jest też stan układu $\psi' = U\psi$, gdyż spełnione jest równanie

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi' = i\hbar \frac{d}{dt} U\psi = U i\hbar \frac{d}{dt} \psi = UH\psi = HU\psi = H\psi'. \quad (16)$$

Wartość średnia wielkości komutującej z hamiltonianem, w szczególności generatora transformacji symetrii, jest zachowana: biorąc średnią obu stron równania Heisenberga $i\hbar \frac{d}{dt} G = [G, H] = 0$, otrzymuje się $\frac{d}{dt} \bar{G} = 0$, czyli $\bar{G} = \text{const.}$.

Jeśli w chwili $t = 0$ układ był w stanie własnym operatora komutującego z hamiltonianem (a więc z operatorem ewolucji T), w szczególności generatora transformacji symetrii G , to w trakcie ewolucji pozostanie w jego stanie własnym

$$\begin{aligned} G\psi(0) &= \gamma\psi(0), \\ G\psi(t) &= GT(t)\psi(0) = T(t)G\psi(0) = T(t)\gamma\psi(0) = \gamma\psi(t). \end{aligned} \quad (17)$$

Wektory własne hamiltonianu do tej samej wartości własnej tworzą podprzestrzeń przestrzeni Hilberta. Spełnione jest równanie Schrödingera niezależne od czasu

$$H\psi_{ns} = E_n\psi_{ns}, \quad (18)$$

gdzie $s = 1, 2, \dots, k_n$, a k_n jest krotnością degeneracji. Superpozycja wektorów z ustaloną liczbą kwantową n w postaci $\sum_s c_s \psi_{ns}$ też jest wektorem własnym hamiltonianu do wartości własnej E_n .

$$H \sum_s c_s \psi_{ns} = \sum_s c_s H \psi_{ns} = \sum_s c_s E_n \psi_{ns} = E_n \sum_s c_s \psi_{ns}. \quad (19)$$

Niech U będzie operatorem symetrii. Wtedy

$$HU\psi_{ns} = UH\psi_{ns} = UE_n\psi_{ns} = E_nU\psi_{ns}, \quad (20)$$

czyli $U\psi_{ns}$ też jest wektorem własnym hamiltonianu do wartości własnej E_n . Na ogół nie jest jednym z wektorów bazowych ψ_{ns} , ale na pewno jest ich superpozycją

$$U\psi_{ns} = \sum_j D_{sj} \psi_{nj}. \quad (21)$$

Współczynniki zespolone D_{js} tworzą macierz zespoloną zwaną reprezentacją operatora symetrii. Jeśli dokonać zmiany bazy w podprzestrzeni własnej hamiltonianu

$$\phi_{nj} = \sum_k O_{jk} \psi_{nk}, \quad (22)$$

to

$$\begin{aligned} U\phi_{nj} &= U \sum_k O_{jk} \psi_{nk} = \sum_k O_{jk} U\psi_{nk} = \sum_k O_{jk} \sum_m D_{km} \psi_{nm} = \\ &= \sum_k O_{jk} \sum_m D_{km} \sum_i O_{mi}^\dagger \phi_{ni} = \sum_i D'_{ji} \phi_{ni}, \end{aligned} \quad (23)$$

gdzie macierz $D' = ODO^\dagger$ stanowi inną reprezentację operatora U ; reprezentacje te nazywamy równoważnymi.

Ważna jest sytuacja, gdy w podprzestrzeni własnej hamiltonianu istnieje podpodprzestrzeń niezmiennicza względem U , tzn. operator U działając na wektory z tej podpodprzestrzeni przekształca je w wektory tylko z tej podpodprzestrzeni, a działając na wektory z ortogonalnego dopełnienia tej podpodprzestrzeni (cały czas wewnątrz podprzestrzeni własnej) daje wektory z

tego dopełnienia. Wtedy macierz reprezentacji D ma strukturę klatkową, a reprezentacja nazywa się przywiedlną. Jeśli nie istnieje podprzestrzeń niezmiennicza, reprezentacja jest nieprzywiedlna.

Jeśli reprezentacja jest nieprzywiedlna, degenerację nazywa się istotną, w przeciwnym wypadku jest przypadkowa. Na przykład dla przypadku atomu wodoru, ze stanami charakteryzowanymi liczbami kwantowymi nlm , degeneracja ze względu na l jest przypadkowa, a ze względu na m - istotna.

1.1 Przesunięcie w przestrzeni

Niech dana będzie transformacja zmiennych przestrzennych w jednym wymiarze

$$x' = x + a. \quad (24)$$

gdzie a jest dowolne. Odpowiednia transformacja dla funkcji falowej ma postać

$$\psi'(x') = \psi(x) = \psi(x' - a) = U(a)\psi(x'). \quad (25)$$

Nową funkcję $\psi'(x)$ (opuszczamy znak "prim" przy argumencie) można obliczyć korzystając z rozwinięcia w szereg Taylora

$$\begin{aligned} U(a)\psi(x) &= \psi(x - a) = \psi(x) + \frac{d}{dx}\psi(x)(-a) + \frac{1}{2!}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)(-a)^2 + \dots = \\ &= I + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\psi(x)(-a)^n = \exp(-a\frac{d}{dx})\psi(x) = \exp[-\frac{i}{\hbar}ap]\psi(x), \end{aligned} \quad (26)$$

gdzie $p = -i\hbar\frac{d}{dx}$ jest operatorem pędu. Pęd jest więc generatorem grupy przesunięć. Niezmienniczość względem przesunięcia oznacza zachowanie pędu.

Dla operatora x prawdziwa jest relacja

$$U^\dagger x U = \exp(\frac{i}{\hbar}ap)x \exp(-\frac{i}{\hbar}ap) = x + a, \quad (27)$$

gdzie skorzystano z tożsamości Bakera-Hausdorffa

$$\exp(A)B \exp(-A) = A + \frac{1}{1!}[A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \dots \quad (28)$$

Dowód tej tożsamości jest następujący, Rozważmy operator $C(\lambda) = \exp(\lambda A)B \exp(-\lambda A)$. Różniczkując ten operator względem λ otrzymujemy

$$\frac{d}{d\lambda}C(\lambda) = AC(\lambda) - C(\lambda)A. \quad (29)$$

Poszukując rozwiązania w postaci szeregu $C(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n C_n$, otrzymujemy relację rekurencyjną dla operatorowych współczynników C_n

$$C_{n+1} = \frac{1}{n+1} [A, C_n]. \quad (30)$$

Ponieważ dla $\lambda = 0$ otrzymujemy $C_0 = B$, dalsze wyrazy szeregu są $C_1 = [A, B]$, $C_2 = \frac{1}{2}[A, [A, B]]$, itd. Dla $\lambda = 1$ otrzymujemy tożsamość Bakera Hausdorffa.

Uogólnienie dla trzech wymiarów jest proste. Przesunięcie o wektor \mathbf{a} oznacza $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{a}$ i zachodzi

$$\psi'(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}' - \mathbf{a}). \quad (31)$$

Przetransformowaną funkcję $\psi'(\mathbf{r})$ można znaleźć

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \mathbf{p}\right] \psi(\mathbf{r}), \quad (32)$$

gdzie $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ jest operatorem pędu i jednocześnie trójką generatorów grupy przesunięć (z dokładnością do czynnika-stałej Plancka). W tym przypadku generatory grupy komutują. Można znaleźć wspólne funkcje własne hamiltonianu i generatorów. Hamiltonian jest po prostu energią kinetyczną jednej cząstki $H = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2$, a jego funkcje własne $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = C \exp(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r})$. Po transformacji $\psi'_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}') = \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}' - \mathbf{a})$. Reprezentacja nieprzywiedlna jest więc jednowymiarowa $U \psi_{\mathbf{p}} = \exp(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{a}) \psi_{\mathbf{p}}$ (tu \mathbf{p} jest już liczbą).

Dodanie potencjału oddziaływania $V(\mathbf{r})$ psuje niezmienniczość względem przesunięć i równocześnie niszczy zachowanie pędu. Jeśli rozważyć dwie cząstki z hamiltonianem

$$H = \frac{1}{2m_1} \mathbf{p}_1^2 + \frac{1}{2m_2} \mathbf{p}_2^2 + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (33)$$

to otrzymamy pędy \mathbf{p}_1 i \mathbf{p}_2 jako w sumie 6 generatorów grupy przesunięć. Nie ma zachowania każdego pędu z osobna i niezmienniczości względem przesunięć we współrzędnych poszczególnych cząstek z osobna. Mamy natomiast niezmienniczość względem równoczesnego przesunięcia obu cząstek o ten sam wektor, a więc zachowanie wypadkowego pędu $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$.

Rozważmy teraz symetrię względem przesunięcia o ustalony wektor (np. o stałą sieci w kryształach). W jednym wymiarze symetria potencjału jest

$V(x) = V(x + a)$. Funkcja powinna spełniać relację $\psi'(x) = \psi(x - a) = U\psi(x) = \exp(-\frac{i}{\hbar}ap)\psi(x)$. Jeśli funkcja ma być funkcją własną operatora $U = \exp(-\frac{i}{\hbar}ap)$ musi, spełniać relację

$$\exp(-\frac{i}{\hbar}ap)\psi(x) = \exp[i\lambda(a)]\psi(x), \quad (34)$$

gdzie wartość własną, mającą wartość bezwzględną 1 zapisano w postaci wykładniczej. Przesunięcie o wielokrotność ma stałej a rozważane jako całość da stałą $\lambda(ma)$, a rozważane jako przesunięcie wykonane na raty - stałą $m\lambda(a)$. Równość tych stałych oznacza, że $\lambda(ma) = m\lambda(a)$, czyli jest funkcją liniową $-ka$, gdzie k jest stałą. Podstawmy teraz $\psi(x) = \exp(ikx)u(x)$. Oznacza to, że

$$\begin{aligned} \psi'(x) &= \psi(x - a) = \exp(-ika)\psi(x), \\ \exp[ik(x - a)]u(x - a) &= \exp(-ika) \exp(ikx)u(x), \\ u(x - a) &= u(x), \end{aligned} \quad (35)$$

a więc u jest funkcją okresową o okresie a . Wspólne funkcje własne hamiltonianu i operatora symetrii U mają więc postać iloczynu funkcji $\exp(ikx)$ oraz funkcji okresowej (tzw. funkcje Blocha). Twierdzenie to ma natychmiastowe uogólnienie dla trzech wymiarów.

1.2 Przesunięcie w czasie

Niech dana będzie transformacja

$$t' = t + \tau. \quad (36)$$

Funkcja transformuje się według zasady

$$\psi'(t') = \psi(x) = \psi(t' - \tau) = U(\tau)\psi(t'). \quad (37)$$

Stosując rozwinięcie w szereg Taylora można napisać (opuszczono "prim" przy zmiennej t)

$$\begin{aligned} U(\tau)\psi(t) &= \psi(t - \tau) = \psi(t) + \frac{d}{dt}\psi(t)(-\tau) + \frac{1}{2!}\frac{d^2}{dt^2}\psi(t)(-\tau)^2 + \dots = \\ &= I + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}\frac{d^n}{dt^n}\psi(t)(-\tau)^n = \exp(-\tau\frac{d}{dt})\psi(t). \end{aligned} \quad (38)$$

Ponieważ funkcja spełnia równanie Schrödingera $i\hbar \frac{d}{dt}\psi = H\psi$, dla hamiltonianu niezależnego od czasu można napisać

$$\psi'(t) = U(t)\psi(t) = \exp(-\tau \frac{d}{dt})\psi(x) = \exp(\frac{i}{\hbar}H\tau)\psi(t). \quad (39)$$

Spełnione jest więc równanie

$$i\hbar \frac{d}{dt}\psi'(t) = i\hbar \exp(\frac{i}{\hbar}H\tau) \frac{d}{dt}\psi(t) = \exp(\frac{i}{\hbar}H\tau)H\psi = H\psi'(t), \quad (40)$$

czyli jeśli ψ jest możliwym rozwiązaniem, to ψ' też jest możliwym rozwiązaniem.

Hamiltonian jest więc generatorem grupy przesunięć w czasie (z dokładnością do stałego czynnika \hbar). Niezmienniczość względem przesunięcia w czasie jest związana z zachowaniem energii (jeśli hamiltonian jest operatorem energii).

1.3 Obroty

Rozważmy obrót o kąt ϕ wokół osi z . Transformacja współrzędnych ma postać

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad (41)$$

co symbolicznie napiszemy jako $\mathbf{r}' = R\mathbf{r}$. Transformacja infinitezymalna ma postać

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\phi & 0 \\ \phi & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \quad (42)$$

Przy transformacji odwrotnej ulega zmienia znak ϕ .

Funkcja skalarna f ulega transformacji i przechodzi w funkcję f' według zasady

$$f'(\mathbf{r}') = f(\mathbf{r}) = f(R^{-1}\mathbf{r}'). \quad (43)$$

Dla transformacji infinitezymalnej oznacza to (opuszczono "primy" przy zmiennej)

$$\begin{aligned} f'(x, y, z) &= f(x + \phi y, y - \phi x, z) = f(x, y, z) + \frac{\partial f}{\partial x}\phi y + \frac{\partial f}{\partial y}(-\phi x) \\ &= (1 + \phi(y \frac{\partial}{\partial x}) - x \frac{\partial}{\partial y})f(x, y, z) = [1 - \frac{i}{\hbar}L_z\phi]f(x, y, z), \end{aligned} \quad (44)$$

gdzie $L_z = (xp_y - yp_x) = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})$ jest składową z orbitalnego momentu pędu.

Obrót o kąt makroskopowy $p\phi$ można traktować jako złożenie N obrotów o kąt $\frac{\phi}{N}$. Transformacja daje nową funkcję

$$f'(\mathbf{r}) = [1 - \frac{i}{\hbar}L_z\frac{\phi}{N}]^N f(\mathbf{r}) \rightarrow_{N \rightarrow \infty} \exp(-\frac{i}{\hbar}L_z\phi)f(\mathbf{r}). \quad (45)$$

Dla obrotu o kąt ϕ wokół dowolnej osi wyznaczonej przez wektor jednostkowy \mathbf{n} otrzymuje się

$$f'(\mathbf{r}) = \exp(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{n}\mathbf{L}\phi)\psi(\mathbf{r}). \quad (46)$$

Składowe orbitalnego momentu pędu są więc generatorami grupy obrotów. W tym przypadku generatory nie są przemienne, a reprezentacje nieprzywiedlne nie są jednowymiarowe.

Funkcje skalarne to tylko najprostszy przykład. Weźmy teraz funkcje wektorowe $\mathbf{f}(\mathbf{r})$. Transformacji ulega nie tylko argument funkcji, lecz także jej składowe. Dla obrotu wokół osi z zachodzi

$$\begin{aligned} f'_x(\mathbf{r}') &= \cos\phi f_x(R^{-1}\mathbf{r}') - \sin\phi f_y(R^{-1}\mathbf{r}'), \\ f'_y(\mathbf{r}') &= \sin\phi f_x(R^{-1}\mathbf{r}') + \cos\phi f_y(R^{-1}\mathbf{r}'), \\ f'_z(\mathbf{r}') &= f_z(R^{-1}\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (47)$$

Dla infinitezymalnej transformacji otrzymujemy (opuszczono "primy" przy zmiennych)

$$\begin{pmatrix} f'_x(\mathbf{r}) \\ f'_y(\mathbf{r}) \\ f'_z(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - i\phi \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] [1 - \frac{i}{\hbar}L_z\phi] \begin{pmatrix} f_x(\mathbf{r}) \\ f_y(\mathbf{r}) \\ f_z(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (48)$$

Dla obrotu o makroskopowy kąt ϕ należy w ostatniej relacji zastąpić ϕ przez $\frac{\phi}{N}$ i podnieść do potęgi N . Otrzymuje się przy $N \rightarrow \infty$

$$\mathbf{f}'(\mathbf{r}) = \exp[-\frac{i}{\hbar}(L_z + S_z)\phi]\mathbf{f}(\mathbf{r}), \quad (49)$$

gdzie

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (50)$$

jest składową z operatora spinu o wartości 1. Dla obrotu wokół osi o wektorze jednostkowym \mathbf{n} otrzymuje się analogicznie

$$\mathbf{f}'(\mathbf{r}) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{n}(\mathbf{L} + \mathbf{S})\phi\right]\mathbf{f}(\mathbf{r}), \quad (51)$$

gdzie pozostałe składowe spinu są

$$S_x = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (52)$$

Macierze te spełniają reguły komutacji typowe dla momentu pędu $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$ z cykliczną permutacją indeksów. Generatorami grupy obrotów są teraz składowe wypadkowego momentu pędu. Niezmienniczość względem obrotów jest związana z zachowaniem wypadkowego momentu pędu.

W ogólności własności transformacyjne różnych obiektów przy obrotach (spinorów, tensorów ...) charakteryzuje się w oparciu o nieprzywiedlnie reprezentacje grupy obrotów, o czym niżej.

Sparametryzujemy teraz dowolny obrót, zamiast przez wektor \mathbf{n} orientacji osi, przez kąty Eulera α , β i γ : sprowadzamy układ pierwotny do układu obróconego (1) przez obrót o kąt α wokół osi z tak, aby oś y leżała równocześnie w płaszczyźnie xy i $x'y'$ (linia węzłów), (2) przez obrót o kąt β wokół nowej osi y i (3) o kąt γ wokół nowej osi z czyli z' (w niektórych podręcznikach po pierwszym obrocie linia węzłów jest osią x). Obrót zapisać można jako

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\beta J_y\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\gamma J_z\right), \quad (53)$$

gdzie \mathbf{J} jest momentem pędu.

Wprowadźmy teraz macierze $K_{x,y,z}$ reprezentujące moment pędu, tzn. są to macierze samosprężone, spełniające reguły komutacji $[K_x, K_y] = iK_z$ (z cyklicznym przestawieniem). Wprowadźmy macierze $K^2 = K_x^2 + K_y^2 + K_z^2$ $K_{\pm} = K_x \pm iK_y$. Łatwo można pokazać, że $[K^2, K_j] = 0$ dla $j = x, y, z$, $[K^2, K_{\pm}] = 0$, a także $[K_z, K_{\pm}] = \pm K_{\pm}$. Istnieją wspólne wektory własne macierzy K_z i K^2

$$\begin{aligned} K_z u_{\mu}^{\lambda} &= \mu u_{\mu}^{\lambda}, \\ K^2 u_{\mu}^{\lambda} &= \lambda^2 u_{\mu}^{\lambda}. \end{aligned} \quad (54)$$

Badając elementy macierzowe operatorów K_{\pm} z wektorami u_{μ}^{λ} otrzymujemy

$$\begin{aligned} 0 &= \langle u_{\mu'}^{\lambda'} | [K_{\pm}, K^2] | u_{\mu}^{\lambda} \rangle = (\lambda^2 - \lambda'^2) \langle u_{\mu'}^{\lambda'} | K_{\pm} | u_{\mu}^{\lambda} \rangle, \\ &\langle u_{\mu'}^{\lambda'} | [K_{\pm}, K_z] | u_{\mu}^{\lambda} \rangle = -\langle u_{\mu'}^{\lambda'} | K_{\pm} | u_{\mu}^{\lambda} \rangle \\ &\langle u_{\mu'}^{\lambda'} | [K_{\pm}, K_z] | u_{\mu}^{\lambda} \rangle = (\mu - \mu') \langle u_{\mu'}^{\lambda'} | K_{\pm} | u_{\mu}^{\lambda} \rangle. \end{aligned} \quad (55)$$

Oznacza to, że element macierzowy $\langle u_{\mu'}^{\lambda'} | K_{\pm} | u_{\mu}^{\lambda} \rangle$ jest równy zero, chyba że $\lambda = \lambda'$ i $\mu' = \mu \pm 1$. Ponieważ wektory u_{μ}^{λ} tworzą bazę, musi zachodzić

$$K_{\pm} u_{\mu}^{\lambda} = C_{\pm} u_{\mu \pm 1}^{\lambda}. \quad (56)$$

Stałe C_{\pm} można obliczyć badając elementy macierzowe

$$\langle u_{\mu}^{\lambda} | K_{\mp} K_{\pm} | u_{\mu}^{\lambda} \rangle. \quad (57)$$

Z jednej strony mają one wartość $\langle u_{\mu}^{\lambda} | K_{\mp} | u_{\mu}^{\lambda} \rangle K_{\pm} | u_{\mu}^{\lambda} \rangle = |C_{\pm}|^2$, z drugiej strony są równe

$$\langle u_{\mu}^{\lambda} | K^2 - K_z^2 \mp K_z | u_{\mu}^{\lambda} \rangle = \lambda^2 - \mu^2 \mp \mu. \quad (58)$$

Zachodzi więc relacja

$$K_{\pm} u_{\mu}^{\lambda} = \sqrt{\lambda^2 - \mu(\mu \pm 1)} u_{\mu \pm 1}^{\lambda}. \quad (59)$$

Operatory K_{\pm} mogą służyć do generacji wektorów własnych o wartościach własnych rosnących lub malejących nieograniczenie skokami o 1. Ponieważ rzut momentu pędu nie może być nieograniczony przy ustalonym kwadracie momentu pędu, rekurencja musi być przerwana. Istnieją więc μ_1 i μ_2 jako minimalna i maksymalna wartość μ

$$\begin{aligned} \lambda^2 - \mu_1(\mu_1 - 1) &= 0, \\ \lambda^2 - \mu_2(\mu_2 + 1) &= 0, \end{aligned} \quad (60)$$

a dodatkowo $\mu_2 = \mu_1 + k$, gdzie k jest liczbą kroków, po której z minimalnej wartości μ dojdziemy do maksymalnej. Z powyższych zależności otrzymuje się, że $\mu_1 = -\frac{k}{2}$, $\mu_2 = \frac{k}{2}$, a $\lambda^2 = \frac{k}{2}(\frac{k}{2} + 1)$. Zmieniając parametryzację: $\mu \rightarrow m$, $j = \frac{k}{2}$, $u_{\mu}^{\lambda} \rightarrow u_m^j$ otrzymujemy relacje

$$\begin{aligned} K_z u_m^j &= m u_m^j, \\ K^2 u_m^j &= j(j+1) u_m^j, \end{aligned} \quad (61)$$

gdzie $m = -j, -j + 1, \dots, j, j = 0, \frac{1}{2}, 2, \frac{3}{2}, \dots$

W reprezentacji operatora K_z , czyli w bazie, w której jest on diagonalny elementy macierzy mają postać

$$\begin{aligned}
(K_z)_{m'm} &= m\delta_{m'm}, & (62) \\
(K_x)_{m'm} &= \frac{1}{2}[(K_+)_{m'm} + (K_-)_{m'm}] = \\
&= \frac{1}{2}[\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\delta_{m',m+1} + \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\delta_{m',m-1}], \\
(K_y)_{m'm} &= \frac{1}{2i}[(K_+)_{m'm} - (K_-)_{m'm}] = \\
&= \frac{1}{2i}[\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\delta_{m',m+1} - \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\delta_{m',m-1}],
\end{aligned}$$

gdzie uogólniono deltę Kroneckera, dopuszczając połówkowe wartości indeksów.

W szczególności dla $j = \frac{1}{2}$ otrzymujemy macierze Pauliego (z czynnikiem $\frac{1}{2}$, wiersze i kolumny numerujemy malejąco od $m = \frac{1}{2}$ do $m = -\frac{1}{2}$)

$$K_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad K_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad K_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (63)$$

a dla $j = 1$

$$K_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad K_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad K_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (64)$$

Dla $j = 1$ macierze są unitarnie równoważne macierzom podanym wcześniej jako generatory obrotów dla funkcji wektorowej.

Reprezentacje grupy obrotów otrzymamy zastępując operatory momentu pędu przez ich macierzowe reprezentacje $\hbar\mathbf{K}$ dla poszczególnych wartości liczby j , tzn.

$$D(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-i\alpha K_z) \exp(-i\beta K_y) \exp(-i\gamma K_z), \quad (65)$$

Można udowodnić, że są to reprezentacje nieprzywiedlne.

W szczególności dla $j = \frac{1}{2}$ łatwo otrzymać postać macierzy. Macierze związane z obrotem wokół osi z są diagonalne. Macierz $\exp(-i\frac{\beta}{2}\sigma_y)$ można

obliczyć rozwijając eksponent na szereg i korzystając z tego, że $\sigma_y^2 = I$

$$\begin{aligned} \exp(-i\frac{\beta}{2}\sigma_y) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i\frac{\beta}{2})^n \sigma_y^n = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} (-i\frac{\beta}{2})^{2n} I + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} (-i\frac{\beta}{2})^{2n+1} \sigma_y = \cos \frac{\beta}{2} I - i \sin \frac{\beta}{2} \sigma_y. \end{aligned} \quad (66)$$

Ostatecznie dla $j = \frac{1}{2}$ otrzymuje się

$$D^{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \exp(-i\frac{\alpha}{2}) & 0 \\ 0 & \exp(i\frac{\alpha}{2}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp(-i\frac{\gamma}{2}) & 0 \\ 0 & \exp(i\frac{\gamma}{2}) \end{pmatrix} \quad (67)$$

Dla przypadku $j = \frac{1}{2}$ i ogólnie dla j o wartościach połowowych obrót o kąt 2π daje macierz reprezentacji o zmienionym znaku; dopiero obrót o 4π daje ten sam wynik co obrót o kąt zerowy. Funkcje spinowe elektronu i innych cząstek o spinie $\frac{1}{2}$ transformują się właśnie według reprezentacji $D^{\frac{1}{2}}$.

Podobnie można otrzymać macierze D^1 i następne. Istnieją ogólne wzory na elementy macierzy D^j , ale nie będą tu omawiane.

Warto dodać, że dla obrotu danego we współrzędnych kartezjańskich

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad (68)$$

macierz D^1 opisuje obrót nie bezpośrednio wektora (x, y, z) , lecz wektora x_1, x_0, x_{-1} , gdzie $x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy)$, $x_0 = z$, $x_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-x + iy)$.

Bardziej skomplikowane obiekty, np. tensory wyższych rzędów, iloczyny zewnętrzne wektorów lub tensorów, dają się przedstawić jako sumy obiektów transformujących się według nierprzywiedlnych reprezentacji D^j .

Dla całkowitych j bazą reprezentacji są funkcje kuliste $Y_{jm}(\beta, \alpha) = \sqrt{\frac{2+1}{4\pi}} D_{m0}^j(\alpha, \beta, \gamma)$.

1.4 Odbicie przestrzenne

Odbicie przestrzenne jest operacją

$$\mathbf{r}' = -\mathbf{r}. \quad (69)$$

Operacja zmienia układ z prawoskrętnego na lewoskrętny. Wykonana dwukrotnie daje powrót do sytuacji wyjściowej. Związany z nią operator U ma

własność $U = U^\dagger = U^{-1}$, czyli $U^2 = I$, a jego wartości własne są ± 1 , co znaczy, że funkcje własne są parzyste lub nieparzyste. Nie ma on odpowiednika klasycznego. Operator U musi zmieniać znak położenia i pędu, a nie zmieniać znaku momentu pędu ani spinu.

$$\begin{aligned} U\mathbf{r}U &= -\mathbf{r}, \\ U\mathbf{p}U &= -\mathbf{p}, \\ U\mathbf{L}U &= \mathbf{L}, \end{aligned} \tag{70}$$

$$\begin{aligned} UsU &= \mathbf{s}, \\ & . \end{aligned} \tag{71}$$

(skorzystano z tego, że $U^\dagger = U$). Oprócz zależności od współrzędnych przestrzennych cząstkom przypisuje się parzystość wewnętrzną $\xi = \pm 1$; jest to istotne w kwantowej teorii pola, gdzie opisane są procesy ginięcia i powstawania cząstek. Dla jednej cząstki o spinie s operator U musi transformować funkcję

$$\psi'(\mathbf{r}, m_s) = U\psi(\mathbf{r}, m_s) = \xi\psi(-\mathbf{r}, m_s). \tag{72}$$

Można pokazać, że taką własność ma operator

$$U = \xi \sum_{m_s} \int d^3r |\mathbf{r}, m_s\rangle \langle -\mathbf{r} m_s|. \tag{73}$$

Cząstki o określonym orbitalnym momencie pędu, opisane funkcjami kulistymi $Y_{lm}(\theta, \phi)$ mają określoną parzystość $(-1)^l$. Ostatecznie parzystość takiego stanu wynosi $\xi(-1)^l$. Dla n cząstek parzystość jest iloczynem parzystości poszczególnych cząstek $\xi_1 \dots \xi_n (-1)^L$, gdzie L jest liczbą kwantową długości wypadkowego orbitalnego momentu pędu.

Parzystość jest zachowana w oddziaływaniach elektromagnetycznych i silnych. Nie jest zachowana w oddziaływaniach słabych.

Jednym z ważnych historycznych doświadczeń było doświadczenie Lee i Yanga z 1955 roku; wykazano w nim niezachowanie parzystości w oddziaływaniach słabych. Badano rozpad β kobaltu ^{27}Co na nikiel ^{28}Ni z emisją elektronu i antyneutrino. Dwie ostatnie cząstki emitowane są w przeciwnych kierunkach z uwagi na zachowanie pędu. Stan spinowy jądra kobaltu został ustalony za pomocą silnego pola magnetycznego w niskiej temperaturze. Okazało się, że preferowany kierunek emisji elektronu był w kierunku przeciwnym, niż rzut spinu jądra kobaltu. Gdyby parzystość była zachowana,

prawdopodobieństwa emisji elektronu w kierunku \mathbf{p}_1 , a antyneutrino w kierunku \mathbf{p}_2 , powinny być takie same jak prawdopodobieństwo emisji elektronu w kierunku $-\mathbf{p}_1$, antyneutrino w kierunku $-\mathbf{p}_2$.

1.5 Odbicie czasowe

Przy odbiciu czasowym czas zmienia znak

$$t' = -t. \quad (74)$$

Transformacji tej odpowiada operator U taki, że $U^2 = UU^\dagger = I$ ($U = U^\dagger$) oraz

$$\psi'(t) = U\psi(t) = \psi(-t) \quad (75)$$

Jeśli funkcja ψ spełnia równanie Schrödingera

$$i\hbar \frac{d}{dt}\psi = H\psi, \quad (76)$$

czyli

$$Ui\hbar \frac{d}{dt}UU\psi = UHUU\psi, \quad (77)$$

lub

$$Ui\hbar \frac{d}{dt}U\psi' = UHUU\psi'. \quad (78)$$

Równanie powinno mieć postać

$$-i\hbar \frac{d}{dt}\psi' = UHUU\psi'. \quad (79)$$

Będzie ono spełnione, jeśli U jest operatorem antyunitarnym, tzn. jest antyliniowy ($U\lambda\psi = \lambda^*U\psi$), $|\langle U\psi|U\phi\rangle| = |\langle\psi|\phi\rangle|$.

Niezmienniczość względem odbicia czasu oznacza, że dla danego procesu możliwy jest analogiczny proces biegnący wstecz w czasie.

Dla cząstek bezspinowych w nieobecności pola elektromagnetycznego w reprezentacji położeniowej za operator U można przyjąć sprzężenie zespolone K . Hamiltonian jest rzeczywisty i niezmienniczość zachodzi bo $[K, H] = 0$. Zachodzi $U\mathbf{r}U = \mathbf{r}$, $U\mathbf{p}U = -\mathbf{p}$.

W obecności pola elektromagnetycznego niezmienniczość hamiltonianu względem odbicia czasu wymaga, aby operator $(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2$ był niezmienniczy;

ponieważ pęd zmienia znak, to operator U powinien być iloczynem sprzężenia zespolonego K i operatora zmieniającego znak \mathbf{A} .

Dla elektronów (i innych cząstek o spinie $\frac{1}{2}$) trzeba zagwarantować, aby operator U odwracał spin, tzn., aby $U\sigma_j U = -\sigma_j$. Ma tę własność operator $Ki\sigma_y$; dla składowej y spinu (urojonej) zmianę znaku gwarantuje sprzężenie zespolone K , dla składowych x i z - reguły antykomutacji macierzy Pauliego.

Dla n elektronów operator U jest iloczynem operatorów $Ki\sigma_y$ dla wszystkich elektronów. Operator $U^2 = (-1)^n$.

Gdy nie ma pola magnetycznego, funkcje ψ i $U\psi$ odpowiadają tej samej energii, bo hamiltonian jest niezmienniczy względem odwrócenia czasu. Pojawia się pytanie, w jakich okolicznościach może być degeneracja, tzn. funkcje ψ i $U\psi$ różnią się tylko o stały czynnik. Niech $U\psi = \lambda\psi$. Wtedy $U^2\psi = U\lambda\psi = \lambda^*U\psi = \lambda^*\lambda\psi$. Dla nieparzystej liczby elektronów $U^2 = -1$ i mamy sprzeczność. Tak więc w układach o nieparzystej liczbie elektronów krotność degeneracji wynosi przynajmniej 2 (tw. Kramersa).