

## Klasyfikacja stanów elektronowych (termów) molekuł dwuatomowych

na myśli mamy nieruchomą cząsteczkę – formalnie przechodzimy do układu rotującego wraz z rotacją molekuly

symetrie molekuly AB to:

- niezmienniczość wzgl. obrotów wokół osi wiązania
- odbicie w płaszczyźnie zawierającej oś wiązania
- inwersja (dla cząsteczek homojądrowych AA)

niezmienniczy jest też hamiltonian H, => istnieją operatory związane z tymi przestrzennymi operacjami symetrii (o tym będzie szczegółowo później...),

które komutują z H, zatem mają z H wspólne funkcje własne -

– inaczej, stany własne H będą sygnowane (numerowane) wartościami własnymi tych operatorów;

- za niezmienniczość wzgl. obrotów wokół osi wiązania odpowiedzialny jest rzut całkowitego momentu pędu na oś Z ( $L^2$  – nie jest już stałą ruchu) –  $L_z$
- 

$$\hat{L}_z \psi_e = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_e = \Lambda \hbar \psi_e$$

podobnie jak w atomach – degeneracja ze wzgl. na znak  $\Lambda$

$\Lambda$	0	$\pm 1$	$\pm 2$	$\pm 3$	...
symbol	$\Sigma$	$\Pi$	$\Delta$	$\Phi$	...

- za odbicia – operator

$$\hat{\sigma}_v \psi_e = \pm \psi_e$$

- za inwersję

$$\hat{i} \psi_e = \pm \psi_e$$

znak wartości własnej  $\hat{\sigma}_v$  :  $\Lambda^\pm$

(dla  $\Lambda \neq 0$  stany są podwójnie zdegenerowane - opuszcza się znak wart. własnej  $\hat{\sigma}_v$ )

stany odpowiadające wartości własnej inwersji +1 oznaczamy symbolem „g” (gerade – parzysty)

a te do wartości -1 „u” (ungerade – nieparzysty) :  $\Lambda_{g/u}$

**H** komutuje także z operatorem kwadratu całkowitego spinu (i rzutu)  $S^2$

stany oznaczamy krotnością  $(2S+1)$ :  $^{2S+1}\Lambda$ , spin dotyczy elektronów z niezamkniętych powłok

przykłady

- stan podstawowy cząsteczki  $H_2$   $^1\Sigma_g^+$
- stan wzbudzony cząsteczki  $H_2$   $^1\Sigma_u^+$
- stan podstawowy cząsteczki  $He_2^+$   $^2\Sigma_u^+$
- stan podstawowy cząsteczki  $OH$   $^2\Pi$

pamiętamy, że energie tych stanów są funkcjami  $R$  – odległości między jądrami, (parabolicznymi w pobliżu odległości równowagowej – długości wiązania)

## Symetria w mechanice kwantowej i elementy teorii grup

def. grupy

Zbiór (skończony lub nieskończony) elementów  $\{g\}$  tworzy grupę gdy:

- zdefiniowana operacja mnożenia (złożenia)  $g_1g_2 = g_3 \in G$
- $(g_1g_2)g_3 = g_1(g_2g_3)$
- istnieje tylko jeden element tożsamościowy  $e$ ,  $eg = ge = g$
- każdy  $g$  posiada element odwrotny  $g^{-1}$ ,  $gg^{-1} = e$

ilość elementów,  $m =$  rząd grupy

grupy abelowe (przemienne):  $g_1g_2 = g_2g_1$  lub inaczej  $[g_1, g_2] = 0$

podzbiór  $G$ , będący grupą nazywa się podgrupą

*przykłady podstawowe*

- zbiór elementów  $[0,1]$  z dodawaniem zdefiniowanym jako

$$0+0 \rightarrow 0$$

$$0+1 \rightarrow 1$$

$$1+1 \rightarrow 0$$

tu  $e = 0$  - element tożsamościowy,  $1$  – jest odwrotnością dla siebie

- macierze kwadratowe  $A$  o elementach rzeczywistych, rzędu  $n$  o  $\det|A| \neq 0$ , ze zwykłym mnożeniem macierzy (nieskończona)
- grupa liczb zespolonych  $\{1, -1, i, -i\}$  z działaniem jako zwykłym mnożeniem
- grupa (nieskończona) wektorów w 3D, 2D ( $nD$ ) z dodawaniem
- grupa (nieskończona) wektorów dyskretnych (będących kombinacjami liniowymi nie współliniowych wektorów bazowych  $\vec{R} = m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2 + m_3\vec{a}_3$ ,  $m_i$  – całkowite (podgrupa poprzedniej)

### Własności grup

$g^n = \underbrace{ggg\dots g}_n$  -  $n$  razy

dla grup skończonych, tworząc ciąg  $e, g, g^2, g^3, \dots, g^n, \dots$

gdy pierwszym powtarzającym się elementem grupy będzie  $e = g^m$

to grupę nazywamy grupą cykliczną (definicja)

### definicja

$g_1$  i  $g_2$  nazywają się sprzężonymi (równoważnymi) gdy istnieje taki  $x \in G$ , że

$$xg_1x^{-1} = g_2,$$

sprzężenie (relacja równoważności) jest: a) zwrotne, b) przechodnie

**ważne** (bez dowodu)

relacja równoważności dzieli grupę  $G$  na rozłączne zbiory – tzw. **klasy**, wszystkie elementy wzajemnie sprzężone należą do jednej klasy

- element tożsamościowy stanowi zawsze klasę jednoelementową  
gdyż  $e$  jest z definicji przemienne z każdym elementem grupy...

- w grupach abelowych wszystkie klasy są jednoelementowe

$$\text{gdyż: } xg_1x^{-1} = g_2 \Rightarrow x x^{-1}g_1 = g_2 \Rightarrow e g_1 = g_2 \Rightarrow g_1 = g_2$$

### Izomorfizm

Dwie grupy  $G$  i  $H$  jednakowego rzędu są izomorficzne jeśli pomiędzy elementami tych grup istnieje wzajemnie jednoznaczne przyporządkowanie, takie, że

$$\text{Jeśli } g_1 \leftrightarrow h_1 \text{ i } g_2 \leftrightarrow h_2 \text{ to } g_1g_2 \leftrightarrow h_1h_2$$

elementowi  $e$  odpowiada  $e$ ,  $g^{-1}$  odpowiada  $h^{-1}$

## Homomorfizm

Grupa  $G$  jest homomorficzna do grupy  $H$  gdy każdemu elementowi  $G$  przyporządkowany jest jednoznacznie element grupy  $H$ , ale jednemu elementowi z  $H$  może odpowiadać więcej niż jeden element z  $G$

homomorfizm nie jest zwrotny

## Przekształcenia symetrii ( w 3D )

### *przekształcenia elementarne*

(a) obroty, (b) odbicia w płaszczyźnie, (c) translacje

przekształcenia te tworzą grupy: grupy symetrii danych obiektów (atomów, molekuł, brył, ciał, kryształów,...), lub po prostu operacji symetrii przekształcających przestrzeń

przekształcenia symetrii (elementy grup symetrii) przeprowadzają obiekty w siebie (punkty obiektów w punkty równoważne lub w te same punkty)

obroty i odbicia mogą posiadać punkty nieruchome – **grupy punktowe**

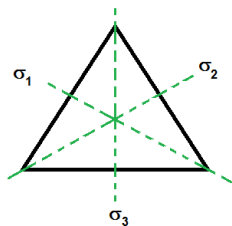
ale ich złożenia (iloczyny) nie muszą takich punktów posiadać

ciała o skończonych rozmiarach mają zawsze jeden punkt nieruchomy - ich grupy symetrii nie mogą zawierać translacji;

*translacje dotyczą obiektów nieskończonych i periodycznych;*

przykłady

1. grupa złożona z obrotów o wielokrotności kątów  $2\pi/4$  ( $90^\circ$ ), skończona, cykliczna, posiada 4 elementy  $C_4 = \{ e, C_4, C_4^2, C_4^3 \}$
2. grupa złożona z obrotów o wielokrotności kątów  $2\pi/n$ , skończona, cykliczna posiada  $n$ -elementów
3. grupa symetrii trójkąta równobocznego  $C_{3v} = \{ e, C_3, C_3^2, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3 \}$



albo molekuly  $BH_3$

4. grupa (nieskończona) złożona z wszystkich obrotów układu współrzędnych w kartezyjskiej przestrzeni euklidesowej (3D) – SO(3)

odbicia w płaszczyźnie zawierającej oś symetrii oznaczamy  $\sigma_v$

odbicia w płaszczyźnie prostopadłej do osi symetrii oznaczamy  $\sigma_h$

przekształcenia w przestrzeni (płaszczyźnie) można reprezentować przez macierze, np. obrót wektora  $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$  o kąt  $\alpha$  wokół osi prostopadłej do płaszczyzny (XY)

$$v'_x = v_x \cos \alpha - v_y \sin \alpha$$

$$v'_y = v_x \sin \alpha + v_y \cos \alpha$$

można reprezentować

$$R(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix}$$

a obrót układu współrzędnych o kąt  $\alpha$  - jeden z możliwych elementów grupy SO(3) - odpowiadać będzie obrotowi wektora o kąt  $-\alpha$  odpowiednia macierz

$$R^{-1}(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix}$$

a obrót wokół osi Z w 3D [element z grupy SO(3)]

$$\begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

natomiast przekształcenie będące złożeniem (w 3D) obrotu o kąt  $\pi$  wokół osi i odbicia w płaszczyźnie prostopadłej do osi :  $g = \sigma_h \cdot C_2$

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

to po prostu *inwersja* ;

$g$  - działa na wektory w 3D, a  $R(g)$  na „funkcje” będące współrzędnymi tych wektorów  $f_1(\underline{\mathbf{x}}) = x$ ,  $f_2(\underline{\mathbf{x}}) = y$ ,  $f_3(\underline{\mathbf{x}}) = z$ ,

ogólnie:

**przekształcenie współrzędnych w przestrzeni ma konsekwencje na postać funkcji tych współrzędnych – funkcje ulegną zmianie tak, jakby działały na nie jakieś operatory**

przykład – translacja - przesunięcie początku układu współrzędnych (np. w jednym wymiarze) o „-a” skutkuje tym, że punkt  $x$  ma teraz współrzędne  $x' = x+a$ , tzn. tak jakbyśmy przesunęli go operacją  $t_a$  o wektor „a”,

natomiast funkcja  $f(x)$  ma teraz postać  $g(x) = f(x-a)$  tzn. tak jakbyśmy podziałali na  $f(x)$  pewnym operatorem  $Af(x) = g(x) = f(x-a) = f(f^{-1}(x))$

**w mechanice kwantowej:**

**przestrzennym operacjom symetrii na układzie fizycznym odpowiadają operatory działające na funkcje własne, np. hamiltonianu tego układu fizycznego**

w ogólności,

operacji symetrii przestrzennej  $R$  odpowiada zmiana funkcji  $f(\mathbf{r}) = f(x,y,z)$

$$\hat{D}f(\mathbf{r}) = f(R^{-1}\mathbf{r})$$

jeśli dokonujemy obrotu w 3D, czyli operacji  $\hat{R}\mathbf{r}$  (z grupy  $SO(3)$ ), to operacji tej odpowiada macierz  $[3 \times 3]$  – ortogonalna (gwarancja zachowania iloczynu skalarnego)

...

obrotom o dowolny kąt wokół pewnej osi odpowiada pewien operator związany z operatorem momentu pędu ...

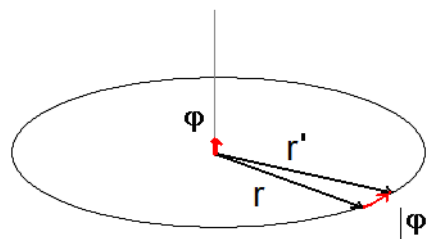
Rozważmy obrót o nieskończenie mały kąt

(obróć o dowolny kąt - to ciąg obrotów o dowolnie małe kąty)

obróć o kąt  $\varphi$  wokół osi można zdefiniować poprzez wektor  $\boldsymbol{\varphi}$  leżący na osi, którego długość odpowiada kątowi obrotu (w radianach);

obróć przekształca płaszczyznę prostopadłą do osi; wektor  $\mathbf{r}$  leżący w tej płaszczyźnie przechodzi w (\*)

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{r} \times \boldsymbol{\varphi}$$



gdzie  $\boldsymbol{\varphi}$  można złożyć z 3 obrotów o kąty  $\varphi_x$ ,  $\varphi_y$ ,  $\varphi_z$ , wokół osi – odpowiednio –  $x$ ,  $y$ ,  $z$

zobaczmy jak zmienia się funkcja  $F(x,y,z)$  (różniczkowalna) przy „nieskończenie małym obrocie” o  $\varphi$  [zobaczmy jak wygląda operator zmieniający funkcję]

$$D(\varphi)F(x, y, z) = F(\mathbf{r}') = F(x + z\varphi_y - y\varphi_z, y - z\varphi_x + x\varphi_z, z + y\varphi_x - x\varphi_y)$$

rozkładając w szereg Taylora i zachowując tylko wyrazy liniowe (\*\*)

$$\begin{aligned} D(\varphi)F(x, y, z) &= F(x, y, z) + \\ &+ (z\varphi_y - y\varphi_z) \frac{\partial F}{\partial x} + (x\varphi_z - z\varphi_x) \frac{\partial F}{\partial y} + (y\varphi_x - x\varphi_y) \frac{\partial F}{\partial z} + \dots \\ &= (1 + i\mathbf{L}\varphi)F(x, y, z) \end{aligned}$$

gdzie

$$\mathbf{L} = -i\mathbf{r} \times \nabla$$

jest (z dokładnością do stałej Plancka) operatorem momentu pędu – tu nazywa się operatorem nieskończenie małego obrotu

pełne rozwinięcie (\*\*) daje

$$D(\varphi) = 1 + i(\mathbf{L}\varphi) + \frac{(i(\mathbf{L}\varphi))^2}{2} + \dots + \frac{(i(\mathbf{L}\varphi))^n}{n!} + \dots = e^{i(\mathbf{L}\varphi)} \quad (***)$$

$$D(\varphi) = e^{i/\hbar(\hat{\mathbf{L}}\varphi)}, \text{ gdzie } \hat{\mathbf{L}} \text{ – operator momentu pędu;}$$

wielkość fizyczna  $F$  – a tym samym reprezentujący ją operator  $\hat{F}$  – jeśli nie zależy jawnie od czasu (nie zmienia się w czasie) i jeśli  $[\hat{H}, \hat{F}] = 0$  nazywa się **stałą ruchu**

to się wiąże z twierdzeniem Noether

... każda ciągła symetria generuje pewne prawo zachowania...

w tym przypadku: zasada zachowania momentu pędu odzwierciedla niezmienniczość układu względem obrotów (o dowolne kąty wokół dowolnych osi)

## Elementarna wiedza z zakresu teorii reprezentacji

operacje symetrii  $g$  reprezentowaliśmy już za pomocą macierzy ortogonalnych (unitarnych)  $R(g)$

jeśli operacje symetrii tworzą grupę  $G$ , to – przez izomorfizm – macierze  $R(g)$  reprezentujące  $g$ , też tworzą grupę;

możemy jednak pomyśleć o funkcjach, które są transformowane poprzez operatory  $\hat{R}(g)$  odpowiadające operacjom symetrii  $g$ .

Weźmy dowolną funkcję  $\varphi = \varphi(\mathbf{r})$ , po wykonaniu operacji  $g$  na  $\mathbf{r}$ , funkcja  $\varphi(\mathbf{r})$  staje się inną funkcją [tych samych współrzędnych-argumentów] tzn.  $\varphi_s(\mathbf{r})$

$$\hat{D}\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(g^{-1}\mathbf{r}) = \varphi_s(\mathbf{r})$$

tę nową funkcję  $\varphi_s$  można traktować jako otrzymaną z  $\varphi$  po działaniu na  $\varphi$  pewnym operatorem  $D$  (zależnym od  $g$ ), UWAGA:

$$\varphi_s(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}') = \varphi(g_s^{-1}\mathbf{r}) = D(g_s)\varphi(\mathbf{r})$$

stosując kolejno wszystkie operacje  $g$  grupy  $G$ , do funkcji  $\varphi$  otrzymamy  $h$  (rzęd  $G$ ) funkcji  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots, \varphi_h$ ,

z których  $n$  niech będzie liniowo niezależnych,

tworzą one przestrzeń funkcyjną  $n$ -wymiarową z wybraną bazą  $\varphi_j(\mathbf{r})$

działanie  $D(g)$  na  $\varphi_j(\mathbf{r})$  daje

$$D(g)\varphi_i(\mathbf{r}) = \sum_j c_{ji}\varphi_j(\mathbf{r}) = \sum_j D_{ji}(g)\varphi_j(\mathbf{r})$$

otrzymujemy macierzowe reprezentacje  $D$ , a tym samym macierzowe reprezentacje operacji symetrii  $g$

postać macierzy  $D$  i ich wymiar,  $n$ , zależy od wyboru funkcji  $\varphi$

[komentarz ...

$D$  może działać też na funkcje wektorowe  $x, y, z$ , (3 funkcje, przyjmujące wartości współrzędnych punktu  $\mathbf{r}$ ,  $F_1(\mathbf{r}) = x$ ,  $F_2(\mathbf{r}) = y$ ,  $F_3(\mathbf{r}) = z$ ); przy takim wyborze  $\varphi$ ,  $D(g) = R(g)$  ]



dla macierzy reprezentacji  $D$ , zachodzi

$$\begin{aligned} D(g_p)D(g_q)\varphi_i &= D(g_p)\sum_j D_{ji}\varphi_j = \sum_j D_{ji}\sum_k D_{kj}\varphi_k = \\ &= \sum_k \sum_j D_{kj}D_{ji}\varphi_k = \sum_k D_{ki}(g_s)\varphi_k = D(g_s)\varphi_i \end{aligned}$$

- zgodnie z prawem mnożenia macierzy i pamiętając, że  $g_s = g_p g_q$

### definicja

**Jeśli każdemu elementowi  $g$  z grupy  $G$  przyporządkowana jest macierz kwadratowa  $D$  (rzędu  $n$ ), z wyżej zdefiniowanym iloczynem, to zbiór macierzy  $D(g)$  tworzy  $n$ -wymiarową reprezentację grupy  $G$ . Oznaczamy ją  $D$ .**

zbiór operatorów tworzy reprezentację operatorową

zbiór liniowo niezależnych funkcji tworzy **bazę reprezentacji**

(dalej przyjmujemy, że zawsze mówimy o bazie ortonormalnej)

elementy macierzy reprezentacji są:

$$D_{ji}(g) = \int \varphi_j^* D(g)\varphi_i d\mathbf{r} = \langle \varphi_j | D(g)\varphi_i \rangle$$

transformacja unitarna (ortogonalna dla  $\varphi$  rzeczywistych)

$$S^+ = (S^*)^T = S^{-1}$$

pozwała "przejsć" z bazy do bazy...

przypomnijmy, że dla macierzy unitarnej zachodzi: (A)

$$\sum_k S_{ki}^* S_{kj} = \delta_{ij}$$

(ortogonalność ze względu na kolumny i wiersze) gdyż

$$S^+ S = S S^+ = I$$

### Twierdzenie

dla bazy ortonormalnej, macierze  $D$  są unitarne

dowód: (pamiętamy, że  $g$  zachowuje długości wektorów a zatem też element obj.)

$$\begin{aligned}\delta_{ij} &= \int \varphi_i^*(\mathbf{r})\varphi_j(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \int \varphi_i^*(\mathbf{r}')\varphi_j(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' = \\ &= \int \varphi_i^*(g^{-1}\mathbf{r})\varphi_j(g^{-1}\mathbf{r})d\mathbf{r} = \sum_{kl} D_{ki}^* D_{lj} \int \varphi_k^*(\mathbf{r})\varphi_l(\mathbf{x})d\mathbf{r} \quad \text{bo to jest warunek (A).} \\ &= \sum_{kl} D_{ki}^* D_{lj} \delta_{kl} = \sum_k D_{ki}^* D_{kj} = \delta_{ij}\end{aligned}$$

(skorzystałem z faktu, że jacobian transformacji =1, bo objętość [długości zachowane]  $dx dy dz$  nie ulega zmianie);

łatwo pokazać (co jest oczywiste), że przy przejściu z bazy do bazy (B)

$$S^{-1}DS = D'$$

takie reprezentacje nazywają się równoważnymi.

Ponadto:

ślad macierzy oraz wyznacznik nie ulegają zmianie przy przekształceniach unitarnych (B)

- jeśli wszystkie macierze reprezentacji są różne to reprezentacja jest **wierna**

jeśli nie, to mamy homomorfizm grupy  $G$  i grupy macierzy  $F$

### Reprezentacje przywiedlne (redukowalne)

jeśli transformacja unitarna (zmiana bazy) przeprowadzi **wszystkie** macierze reprezentacji do postaci

$$D(g) = \left\| \begin{array}{cccc} D_1(g) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D_2(g) & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & D_k(g) \end{array} \right\|$$

z ustalonymi wymiarami  $D_i$

to reprezentacja  $D$  jest **redukowalna, (przywiedlna)**;

jeśli nie można już dokonać dalszej redukcji za pomocą transformacji unitarnej, to  $D_i$  - nazywają się reprezentacjami nieprzywiedlnymi (nieredukowalnymi)

**redukowalność reprezentacji oznacza , że można tak przetransformować jej bazę, że „podbazy” transformują się tylko w siebie pod wpływem operacji grupy G**

w ogólności, niektóre  $D_i$  mogą być wzajemnie równoważne

### Podstawowe twierdzenia z teorii reprezentacji

- Twierdzenie Burnside'a (dla grup skończonych)  
 $n_a$  – wymiar nieredukowalnej reprezentacji grupy  
 $N$  - liczba wszystkich nieredukowalnych reprezentacji grupy  
 $h$  - rząd (wymiar) grupy

$$\sum_{a=1}^N n_a^2 = h$$

- liczba reprezentacji nieprzywiedlnych  $N$  równa jest liczbie klas  $N_r$   
$$N = N_r$$
- wymiary nieredukowalnych reprezentacji są dzielnikami rzędu grupy,
- zawsze istnieje jedna reprezentacja „jednostkowa” - (funkcja stała nie zmienia się pod wpływem żadnej operacji grupy);

twierdzenia te pozwalają jednoznacznie wyznaczyć wymiary wszystkich nieredukowalnych reprezentacji danej grupy

poza tym:

- wszystkie nieredukowalne reprezentacje grup abelowych są jednowymiarowe
- dla skończonych grup punktowych, reprezentacje mogą być co najwyżej 3-wymiarowe (ze wzgl. na izomorfizm z macierzami przekształceń  $R$ )

- jeśli  $[H,D]=0$ , i operatory symetrii  $D$  należą do jakiejś grupy  $G$ , to funkcje należące do zdegenerowanej wartości własnej  $H$  stanowią bazę jakiejś nieprzywiedlnej reprezentacji grupy  $G$  (będącej grupą symetrii  $H$ , a tym samym grupą symetrii danego układu fizycznego)

jest tak dlatego, ponieważ:

niezmienniczość  $H$  względem operacji  $g \in G$  – grupy symetrii hamiltonianu (układu fizycznego) oznacza [\*]:

$$H(g^{-1}\mathbf{r}) = H(\mathbf{r})$$

albo inaczej

$$D(g)\underbrace{H(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})}_{\phi(\mathbf{x})} = H(g^{-1}\mathbf{r})\psi(g^{-1}\mathbf{r}) = H(\mathbf{r})D(g)\psi(\mathbf{r})$$

a to oznacza:

$$D(g)H = HD(g)$$

ale z [\*]

$$H(\mathbf{r})\psi(g^{-1}\mathbf{r}) = E\psi(g^{-1}\mathbf{r});$$

widać, że funkcjom  $\psi(\mathbf{r})$ ,  $\psi(g^{-1}\mathbf{r})$  odpowiada ta sama wartość własna  $E$ ;

działając operacjami  $D(g)$  na dowolną funkcję  $\psi_j$  pozostajemy w zbiorze funkcji odpowiadających  $E$ , zatem:

**funkcje własne  $H$  odpowiadające zdegenerowanej wartości własnej  $H$  tworzą bazę reprezentacji  $D$  grupy symetrii  $G$  hamiltonianu;**

każdej reprezentacji nieprzywiedlnej powinna odpowiadać inna wartość własna energii (za wyj. degeneracji tzw. przypadkowej);

dana nieprzywiedlna reprezentacja  $D$  grupy  $G$ , jest na ogół przywiedlna (redukowalna) w podgrupie  $G'$  (tej grupy),

[gdyż zmniejsza się liczba klas i wymiar]

ma to podstawowe znaczenie w określaniu rozszczepienia zdegenerowanych poziomów energetycznych układu fizycznego pod wpływem zaburzenia, które obniża symetrię tego układu.