

# Symetizační (též projekční) operátory pro konečné grupy (44)

- pokud popisujeme systém, který má určitou grupu symetrie  $G$ , v bázi, která je obecná a „nerespektuje“ působení této grupy, tj. mixuje bázové vektory (funkce) z různých invariantních podprostorů, je vhodné mít nějaký nástroj, který by umožnil zkonstruovat „symetizovanou“ bázi, tedy takovou, kde už jednotlivé bázové vektory budou spadat do jednotlivých invariantních podprostorů, které odpovídají příslušné ireducibilní repr. grupy  $\Gamma$

- toto lze docílit pomocí symetizačních operátorů

- uvažujme neprve  $d_m$  prostoru  $V$ , kde působí grupa  $G$ , invariantní podprostor  $W \subset V$ , který přísluší určité IR  $\Gamma^M$  grupy  $G$ , tj. pro bázi  $\{\vec{e}_i^M\}_{i=1}^{d_m} \in W$  bude platit

$$\underbrace{T(g)}_{\text{(operátor repr. } G \text{ na prostoru } V, \text{ při působení na } W \text{ zůstává výsledek ve } W)} \vec{e}_i^M = \sum_{k=1}^{d_m} \vec{e}_k^M D_{ki}^M(g) \quad (*)$$

- pozn. k terminologii: říkáme, že  $\vec{e}_i^M$  patří k  $i$ -tému sloupci reprezentace  $\Gamma^M$  a  $\vec{e}_i^M$  tvoří bázi této reprezentace

- ze vztahu (\*) lze vyvodit, že působením  $T(g)$  na prvky báze by mělo jít zkonstruovat ostatní prvky báze
- s využitím relací ortogonality pro  $D^M(g)$  dostaneme pro unitární repr.

$$\begin{aligned} \sum_{g \in G} D_{rs}^M(g)^* T(g) \vec{e}_i^M &= \sum_{k=1}^{d_m} \sum_{g \in G} D_{rs}^M(g)^* D_{ki}^M(g) \vec{e}_k^M = \\ &= \sum_{k=1}^{d_m} \frac{\#G}{d_m} \delta_{rk} \delta_{si} \vec{e}_k^M = \frac{\#G}{d_m} \delta_{si} \vec{e}_r^M \end{aligned}$$

neboli pro  $s=i$  máme

$$\vec{e}_r^M = \frac{d_m}{\#G} \sum_{g \in G} D_{ri}^M(g)^* T(g) \vec{e}_i^M = P_{ri}^M \vec{e}_i^M$$

kde jsme označili  $P_{rs}^M = \frac{d_m}{\#G} \sum_{g \in G} D_{rs}^M(g)^* T(g)$  symetizační operátor

a obecně  $P_{rs}^M \vec{e}_i^M = \delta_{si} \vec{e}_r^M$

- ušihneme si, že obecně nejde o projekční operátor, neboť např.  $P_{12}^M \vec{e}_2^M = \vec{e}_1^M$ , ale  $P_{12}^M \vec{e}_1^M = 0$  proto je lépe je nazývat symetrizační operátory

- co dostaneme, zapůsobíme-li operátorem  $P_{jk}^M$  na obecný vektor  $\vec{v}$ ?

$$P_{jk}^M \vec{v} = \frac{d_M}{\#G} \sum_g D_{jk}^M(g)^* T(g) \vec{v} = \vec{v}_{jk}^M$$

- pokud jsou tyto vektory nenulové pro jisté  $k$ ,

pak vektory  $\{\vec{v}_{jk}^M\}_{j=1}^{d_M}$  tvoří bázi IR  $\Gamma^M$  v podprostoru

$$\mathcal{L}(\{\vec{v}_{jk}^M\}_{j=1}^{d_M}) = W^M, \text{ neboť}$$

$$T(h) \vec{v}_{jk}^M = \frac{d_M}{\#G} \sum_{g \in G} D_{jk}^M(g)^* \underbrace{T(h)T(g)}_{T(hg)} \vec{v} \leftarrow \begin{array}{l} \text{substituce} \\ g = h^{-1}g' \\ \text{existuje jednoznačně} \end{array}$$

$$= \frac{d_M}{\#G} \sum_{g' \in G} D_{jk}^M(h^{-1}g')^* T(g') \vec{v} =$$

$$= \frac{d_M}{\#G} \sum_{g' \in G} \sum_{r=1}^{d_M} D_{jr}^M(h^{-1})^* D_{rk}^M(g')^* T(g') \vec{v} =$$

$$= \sum_{r=1}^{d_M} D_{jr}^M(h^{-1})^* \vec{v}_{rk}^M = \sum_{r=1}^{d_M} D_{rj}^M(h) \vec{v}_{rk}^M \leftarrow \begin{array}{l} \text{lineární} \\ \text{ko-kombinace} \\ \text{přes index } r \\ \text{jak by mělo být} \\ \text{u báze IR } \Gamma^M \end{array}$$

unitarita  $D^M$

- dostáváme tak celou bázi  $W^M$  z jediného vektoru  $\vec{v} \in V$ , ovšem  $\vec{v}$  musí obsahovat příspěvek z  $W^M$ , jinak bychom dostali nuly

- ovšem museli bychom znát obecně  $D^M(g)$ , ale obvykle jsou tabelovány pouze charaktery IR příslušné grupy, proto se zavádí neúplné symetrizační operátory (již projekční)

$$P^M = \sum_{j=1}^{d_M} P_{jj}^M = \sum_{j=1}^{d_M} \sum_{g \in G} \frac{d_M}{\#G} D_{jj}^M(g)^* T(g) = \frac{d_M}{\#G} \sum_{g \in G} \chi^M(g)^* T(g),$$

- myni ovšem nekonstruujeme přímo bázi, ale jen vektory z  $W^M$ ;

$$P^M \vec{v} = \sum_{j=1}^{d_M} \vec{v}_{jj}^M$$

a je tedy nutno působit na různé vektory  $\vec{v} \in V$  a ortogonalizovat