Maticové elementy a výběrová pravidla pro invariantní operátory

- v kvantové teorii potřebujeme často počítat maticové elementy určitého operátoru, nebo sady operátorů, které se při působení určité grupy transformují mezi sebou
- zde si ukážeme, jak lze provýpočet těchto elementů využít symetrii nejprve pro <u>invariantní operátor Ω</u>, který se při působení grupy nemění, tj.

$$\Omega' = U(g)\,\Omega\,U(g)^{-1} = \Omega \quad \text{pro } \forall g \in G$$

a později pro tzv. ireducibilní tenzorové operátory pomocí obecného Wignerova-Eckartova teorému

- uvažujme maticový element

$$M = \langle \psi_k^\mu | \Omega | \phi_e^\nu \rangle$$

kde ψ_k^μ a φ_e^ν jsou dvě sady vektorů z Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$ které tvoří bázi dvou ireducibilních reprezentací grupy G.
(může jít o vlastní stavy Hamiltoniánu, který má G jako grupu symetrie, ale obecně uvažujme lib. takové vektory)

tj. platí $\quad U(g)\,\psi_k^\mu = \sum_{i=1}^{d_\mu} \psi_i^\mu D_{ik}^\mu(g) \quad , \quad U(g)\,\phi_e^\nu = \sum_{j=1}^{d_\nu} \phi_j^\nu D_{je}^\nu(g)$

- protože uvažujeme unitární působení G na $\mathcal{H}$, bude platit též, že

$$M \overset{\text{unitarita}}{=} \langle U(g)\,\psi_k^\mu | U(g)\,\Omega\,\varphi_e^\nu \rangle \overset{\substack{\text{invariantní operátor} \\ U(g)\Omega = \Omega U(g)}}{=}$$

$$= \langle U(g)\,\psi_k^\mu | \Omega\, U(g)\,\varphi_e^\nu \rangle$$

$$= \Big\langle \sum_{i=1}^{d_\mu} \psi_i^\mu D_{ik}^\mu(g) \Big| \Omega \sum_{j=1}^{d_\nu} \phi_j^\nu D_{je}^\nu(g) \Big\rangle \overset{\text{linearita}}{=}$$

$$= \sum_{i,j} D_{ik}^\mu(g)^* D_{je}^\nu(g)\, \langle \psi_i^\mu | \Omega | \phi_j^\nu \rangle$$

- sumou přes $\forall g \in G$ nakonec dostaneme, s využitím relací ortogonality

$$\sum_{g\in G} D_{ik}^\mu(g)^* D_{je}^\nu(g) = \frac{\#G}{d_\mu}\,\delta^{\mu\nu}\,\delta_{ij}\,\delta_{ke}$$

$$\#G \cdot M = \sum_{g\in G} M = \sum_{i,j} \sum_{g \in G} D^{\mu}_{ik}(g)^{*} D^{\nu}_{je}(g) \langle \psi^{\mu}_{i} | \Omega | \phi^{\nu}_{j} \rangle$$

$$= \frac{\#G}{d_\mu} \sum_{i,j} \delta^{\mu\nu} \delta_{ij} \delta_{ke} \langle \psi^{\mu}_{i} | \Omega | \phi^{\nu}_{j} \rangle$$

a tedy

$$M = \langle \psi^{\mu}_{k} | \Omega | \phi^{\nu}_{e} \rangle = \delta^{\mu\nu} \delta_{ke}\, h^{\mu}$$

kde $h^{\mu} = \frac{1}{d_\mu} \sum_{i=1}^{d_\mu} \langle \psi^{\mu}_{i} | \Omega | \phi^{\nu}_{i} \rangle$ je tzv. redukovaný maticový element nezávislý na k a l

• <u>výběrová pravidla</u>

1) maticový element invariantního operátoru Ω mezi stavy, které přísluší <u>různým ired. repr.</u> je nulový

2) pokud stavy patří do stejné ired. repr. ($\mu = \nu$), ale transformují se <u>podle různých sloupců ($k \neq l$)</u>, pak je tento element <u>též nulový</u>

3) diagonální maticové elementy $\langle \psi^{\mu}_{k} | \Omega | \phi^{\mu}_{k} \rangle$ pro stejné ired. repr. a pro $k = l$ jsou pro všechna **k** stejné, protože h^{μ} nezávisí na k a l

<u>pozn:</u> k určení h^{μ} není třeba počítat „průměr" $\frac{1}{d_\mu} \sum_{i=1}^{d_\mu}$, ale stačí spočítat právě jen jeden z nich, např. $\langle \psi^{\mu}_{1} | \Omega | \psi^{\mu}_{1} \rangle$

$\Rightarrow$ pokud řešíme problém vlastních stavů systému popsaného Hamiltoniánem H invariantním při působení grupy G v určité bázi (např. atomových orbitalů) vyplatí se tuto bázi symetrizovat, protože pak budou všechny matic. elementy mezi různými IR a různými sloupci dané IR nulové, což vede na diagonalizaci menších matic