

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 výpočet těchto elementů využít symetrie nejprve pro invariantní operátor Ω , který se při působení grupy ne-ění, 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 teoremu

- uvažujme maticový element

$$M = \langle \psi_k^m | \Omega | \phi_l^v \rangle$$

kde ψ_k^m a ϕ_l^v 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 uvažujeme lib. takové vektory)

tj. platí

$$U(g)\psi_k^m = \sum_{i=1}^{d_m} \psi_i^m D_{ik}^m(g), \quad U(g)\phi_l^v = \sum_{j=1}^{d_v} \phi_j^v D_{jl}^v(g)$$

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

těži, že

$$M = \langle U(g)\psi_k^m | U(g)\Omega\phi_l^v \rangle = \begin{matrix} \text{unitarita} & & \text{invariantní operátor} \\ & & U(g)\Omega = \Omega U(g) \end{matrix}$$

$$= \langle U(g)\psi_k^m | \Omega U(g)\phi_l^v \rangle$$

$$= \left\langle \sum_{i=1}^{d_m} \psi_i^m D_{ik}^m(g) \middle| \Omega \sum_{j=1}^{d_v} \phi_j^v D_{jl}^v(g) \right\rangle = \begin{matrix} \text{linearity} \end{matrix}$$

$$= \sum_{i,j} D_{ik}^m(g)^* D_{jl}^v(g) \langle \psi_i^m | \Omega | \phi_j^v \rangle$$

- soumou přes $\forall g \in G$ nakonec dostaneme, s využitím relací ortogonalit

$$\sum_{g \in G} D_{ik}^m(g)^* D_{jl}^v(g) = \frac{\#G}{d_m} \delta^{mv} \delta_{ij} \delta_{kl}$$

$$\begin{aligned} \#G \cdot M &= \sum_{g \in G} M = \sum_{i,j} \sum_{g \in G} D_{ik}^{\mu} (g)^* D_{je}^{\nu} (g) \langle \psi_i^{\mu} | \Omega | \phi_j^{\nu} \rangle \\ &= \frac{\#G}{d_{\mu}} \sum_{i,j} \delta^{m\nu} \delta_{ij} \delta_{ke} \langle \psi_i^{\mu} | \Omega | \phi_j^{\nu} \rangle \end{aligned}$$

a tedy $M = \langle \psi_k^{\mu} | \Omega | \phi_e^{\nu} \rangle = \delta^{m\nu} \delta_{ke} h^{\mu}$

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

výběrová pravidla

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

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

3) diagonální maticové elementy $\langle \psi_k^{\mu} | \Omega | \phi_k^{\mu} \rangle$ pro stejné ired. repr. a ~~stejný sloupec~~ pro $k = l$ jsou pro všechna k stejné, protože h^{μ} nezávisí na k a e

pozor: 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. $\langle \psi_1^{\mu} | \Omega | \psi_1^{\mu} \rangle$

\Rightarrow pokud řešíme problém vlastních stavů systému popsaneého Hamiltoniánek H invariantním při působení grupy G v určité bází (např. atomových orbitale) vyplatí se tuto bází symmetrizovat, protože pak budou všechny matic. elementy mezi různými IR a různými sloupci dané IR nulové, což vede na diagonalizaci menších matic