Projekční operátory (~~[illegible]~~ symetrizační operátory) pro konečné grupy

- motivace → systém popisujeme často ve bázi, která vystihuje jeho složení, avšak ne jeho symetrie

  Př. – atomové orbitaly jako báze při hledání molekulových orbitalů
  – součiny jednočásticových funkcí jako báze pro popis několika interagujících částic

- přitom víme, že vlastní stavy systému přísluší jisté ireducibilní repr. grupy symetrie systému, neboli náleží do ireducibilního invariantního podprostoru vůči oper. $T(g)$, $\forall g \in G$ ⟹ proto bychom chtěli spíše bázi, která odpovídá rozdělení ~~[illegible]~~ prostoru stavů na tyto invariantní podprostory

- pokud ale máme obecnou bázi, jejíž ~~[illegible]~~ vektory ~~[illegible]~~ mají nenulové složky v různých inv. podprostorech, potřebujeme z nich nějak „vyrobit“, „vyprojektovat“ bázi těchto inv. podpr. → k tomu slouží právě projekční (symetrizační) operátory

Pozn. k terminologii: Nechť vektory $v_1^\mu, \dots v_{d_\mu}^\mu \in W$ ~~[illegible]~~ $\subset V$ tvoří bázi ireducibilní repr. Γ^μ grupy G na inv. podprostoru W, tj.

(1) $$T(g)\, v_i^\mu = \sum_{k=1}^{d_\mu} v_k^\mu D_{ki}^\mu(g)$$

(Pozn. $T(g)$ můžeme uvažovat na celém prostoru V, působili na $v_i^\mu \in W$ výsledek však zůstává ve W)

pak říkáme, že v_i^μ patří k i-tému sloupci reprezentace $\Gamma^\mu = \{T^\mu(g), g \in G\}$

a vektory $v_1^\mu, \dots v_{d_\mu}^\mu$ se nazývají partnery (vzhledem k ~~[illegible]~~ této reprezentaci).

- ze vztahu (1) můžeme „vytušit“, že pomocí operátorů $T^\mu(g)$ by měly nějak jít zkonstruovat z jednoho v_i^μ ostatní partneři v_k^μ (neboť působením $T^\mu(g)$ dostáváme lineární kombinace všech v_k^μ) pokud bychom znali $D_{ki}^\mu(g)$ příslušné ireduc. repr.

- pomocí relací ortogonality skutečně dostáváme (pro unitární repr.)

$$\sum_g D_{rs}^\mu(g)^* T(g)\, v_i^\mu = \sum_{k=1}^{d_\mu} \sum_g D_{rs}^\mu(g)^* D_{ki}^\mu(g)\, v_k^\mu = \sum_{k=1}^{d_\mu} \frac{\#G}{d_\mu} \delta_{rk}\delta_{si}\, v_k^\mu = \frac{\#G}{d_\mu}\delta_{si}\, v_r^\mu$$

a tedy pro $s = i$ máme

$$v_r^\mu = \frac{d_\mu}{\#G} \sum_g D_{ri}^\mu(g)^* T(g)\, v_i^\mu$$

- definujeme-li operátory $P^{\mu}_{rs} = \frac{d_\mu}{\#G} \sum_g D^{\mu}_{rs}(g)^* T(g)$

vidíme, že P^{μ}_{rs} obecně není projekční op.
např. $P^{\mu}_{12} v^{\mu}_2 = v^{\mu}_1$
$P^{\mu}_{12} v^{\mu}_1 = 0$
tedy $(P^{\mu}_{12})^2 \neq P^{\mu}_{12}$

pak vidíme jednak, že

$$v^{\mu}_r = P^{\mu}_{ri} v^{\mu}_i \quad * \quad (\text{obecněji } P^{\mu}_{rs} v^{\mu}_i = \delta_{si} v^{\mu}_r)$$

a ~~tak~~ dále vezmeme-li libovolný vektor $v \in V$ a zvolíme-li určité k a

spočteme-li

$$v^{\mu}_{jk} = P^{\mu}_{jk} v = \frac{d_\mu}{\#G} \sum_g D^{\mu}_{jk}(g)^* T(g) v$$

pak tyto vektory (je jich d_μ, indexovány pomocí j) tvoří bázi ireducibilní repr. Γ^μ (na podpr. $\mathcal{L}(\{v^{\mu}_{jk}, j=1,\dots d_\mu\})$), neboť

$$T(h) v^{\mu}_{jk} = \frac{d_\mu}{\#G} \sum_g D^{\mu}_{jk}(g)^* \underbrace{T(h) T(g)}_{T(hg)} v = \frac{d_\mu}{\#G} \sum_{g'} D^{\mu}_{jk}(h^{-1}g')^* T(g') v =$$

substituce $g = h^{-1}g'$, což lze neboť pro g vždy $\exists$ nějaké g' takové, že $g = h^{-1}g'$ a sumujeme přes celou grupu

$$= \frac{d_\mu}{\#G} \sum_{g'} \sum_r D^{\mu}_{jr}(h^{-1})^* D^{\mu}_{rk}(g')^* T(g') v =$$

P^{μ}_{rk}

$$= \sum_r D^{\mu}_{jr}(h^{-1})^* v^{\mu}_{rk} = \sum_r D^{\mu}_{rj}(h) v^{\mu}_{rk}$$

díky unitaritě
$D^{\mu}_{jr}(h^{-1}) = D^{\mu}_{rj}(h)^*$

- dostali jsme tedy bázi ireduc. repr. Γ^μ grupy G v prostoru V z jediného vektoru $v \in V$, ovšem tato báze nemusí být nenulová, což je zřejmé z toho, že libovolný v nemusí mít nenulovou složku v inv. podprostoru příslušném IR Γ^μ

- problém je, že bychom potřebovali znát* $D^\mu(g)$, tj. přímo matice příslušející určité IR, většinou jsou ale tabelovány jen charaktery => neúplný projekční operátor

$$P^\mu = \sum_j P^{\mu}_{jj} = \sum_j \sum_g \frac{d_\mu}{\#G} D^{\mu}_{jj}(g)^* T(g) = \frac{d_\mu}{\#G} \sum_g \chi^{\mu}(g)^* T(g)$$

ovšem jeho působením obecně dostáváme

$$P^\mu v = \sum_j v^{\mu}_{jj}$$

tj. jen jistou lineární kombinaci vektorů z invariantního podprostoru příslušejícího IR Γ^μ a ne konkrétní bázi -> nutno působit na různé v a ortogonalizovat