

Valne funkcije identičnih čestica

Županić, Dubravko

Master's thesis / Diplomski rad

2020

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:255567>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-07-15**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



Valne funkcije identičnih čestica

Županić, Dubravko

Master's thesis / Diplomski rad

2020

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:255567>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-06-18**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO–MATEMATIČKI FAKULTET
MATEMATIČKI ODSJEK

Dubravko Županić

VALNE FUNKCIJE IDENTIČNIH ČESTICA

Diplomski rad

Voditelj rada:
prof. dr. sc. Denis Sunko

Zagreb, srpanj, 2020.

Ovaj diplomski rad obranjen je dana _____ pred ispitnim povjerenstvom u sastavu:

1. _____, predsjednik
2. _____, član
3. _____, član

Povjerenstvo je rad ocijenilo ocjenom _____.

Potpisi članova povjerenstva:

1. _____
2. _____
3. _____

*Zahvaljujem se mentoru na iznimnoj pomoći, razumijevanju i strpljenju tijekom izrade rada.
Zahvaljujem se i obitelji i prijateljima na podršci tijekom studiranja.*

Sadržaj

Sadržaj	iv
Uvod	1
1 Matematički uvod	2
1.1 Grupe, prsteni, polja i moduli	2
1.2 Grupa permutacija	5
1.3 Reynoldsovi operatori	8
1.4 Hilbertov prostor	14
2 Kvantna mehanika	18
2.1 Harmonički oscilator	19
2.2 3D harmonički oscilator	20
2.3 Bargmannov prostor	21
2.4 Sustav dva identična fermiona	23
3 Dvije čestice u 3D harmoničkom oscilatoru	25
3.1 Slobodni modul	25
3.2 Hilbertov red	27
3.3 Valne funkcije	28
4 Redukcija baze s obzirom na grupu permutacija S_3	31
4.1 Permutacija koordinatnih osi	31
4.2 Osnovno stanje	32
4.3 1. pobuđeno stanje	35
4.4 2. pobuđeno stanje	43
4.5 Viša pobuđenja	52
5 Zaključak	53
Bibliografija	54

Uvod

Ovaj diplomski rad je pisan na način da ga može razumijeti svaki student matematike i fizike. Kvantna fizika je grana fizike koja se bavi sustavima čestica i međudjelovanjima među njima. U ovom diplomskom radu je opisan sustav dva identična fermiona u potencijalu trodimenzionalnog harmoničkog oscilatora. Ovo je jedan od najjednostavnijih sustava i dosada je puno puta opisan.

Hilbertov prostor više čestica je funkcionalni vektorski prostor sa prirodnom strukturom slobodnog modula. Ovaj slobodni modul je konačno generiran sa točno $N!^{d-1}$ generatora za N identičnih čestica u d dimenzija. Ove generatore zovemo oblici. Za dva identična fermiona u tri dimenzije imamo 4 generatora (oblika), a to su:

$$\begin{aligned}\psi_1 &= t_1 - t_2, & \psi_2 &= u_1 - u_2 \\ \psi_3 &= v_1 - v_2, & \psi_4 &= \psi_1\psi_2\psi_3\end{aligned}$$

Oblici su antisimetrični polinomi (pri permutiranju čestica mijenjaju predznak). Sve valne funkcije u ovom slobodnom modulu mogu biti prikazane kao linearne kombinacije produkta simetričnih i antisimetričnih funkcija.

Cilj ovog rada je klasificirati generatore ovog slobodnog modula kao i sve polinome 2. i 3. stupnja u 1. i 2. pobuđenom stanju koje oni generiraju s obzirom na grupu permutacija S_3 . U ovom radu je napravljena potpuna redukcija osnovnog stanja te 1. i 2. pobuđenog stanja u ireducibilne reprezentacije ove grupe. Sve reprezentacije su prikazane i korištenjem Youngovih dijagrama, kako je to uobičajeno za simetričnu grupu.

U suvremenoj znanosti, teorija grupa igra važnu ulogu. Tako se javlja u kvantnoj fizici, atomskoj fizici, kemiji i mnogim drugim znanstvenim disciplinama. Kada reduciramo Hilbertov prostor valnih funkcija s obzirom na neku grupu, dobivamo potprostore koji razapinju najmanje moguće reprezentacije te grupe odnosno ireducibilne reprezentacije. Simetrična grupa S_3 ima točno tri ireducibilne reprezentacije od kojih su dvije jednodimenzionalne (trivijalna A_1 i alternirajuća A_2), a jedna je dvodimenzionalna (standardna E).

U ovom radu je za postupak redukcije korišten princip potpunog skupa komutirajućih operatora (CSCO) koji je prvi koristio Dirac. Potrebno je pronaći skup operatora (grupe s obzirom na koju reduciramo prostor) koji će komutirati međusobno te tražiti njihove svojstvene vektore. Ti svojstveni vektori će razapinjati ireducibilne reprezentacije te grupe, odnosno, u ovome radu, simetrične grupe S_3 . Operatori korišteni u ovom radu su Reynoldsovi. S ovakvim operatorima možemo uočiti pravilnosti i simetrije s obzirom na grupu S_3 . Štoviše, valne funkcije sa svojstvenom vrijednosti 1 su invarijantne na djelovanje tog operatora, a one sa svojstvenom vrijednosti 0 nisu.

Poglavlje 1

Matematički uvod

Ovo poglavlje predstavlja kratki matematički uvod u kojem će biti opisane ključne matematičke ideje i matematički principi vezani uz ovaj diplomski rad. Najprije definiramo temeljne pojmove vezane uz grupe i ostale algebarske strukture. Ovo je važno jer je u središtu pozornosti ovog rada grupa permutacija S_3 i njezino djelovanje na Hilbertov prostor valnih funkcija.

Nakon toga definiramo Reynoldsove operatore i njihova svojstva. Ove operatore koristimo u redukciji u glavnom djelu rada. U ovom poglavlju će biti opisan sam postupak redukcije s obzirom na grupu permutacija te Youngovi dijagrami kao način klasifikacije vektora koji razapinju vektorski prostor s obzirom na grupu permutacija.

Naposlijetku definiramo L_p prostore kako bismo mogli uvesti L_2 Hilbertov prostor. U kvantnoj fizici se valne funkcije čestica prikazuju kao vektori, odnosno funkcije, u Hilbertovom prostoru stoga je ovo bitno za izgradnju matematičke teorije potrebe za razvoj glavnog rezultata ovog rada.

1.1 Grupe, prsteni, polja i moduli

U ovom radu koristimo više algebarskih struktura (grupa, prsten i slobodni modul) stoga je poželjno najprije definirati ove strukture. Grana matematike koja se bavi ovakvim apstraktnim strukturama (posebice grupama) se zove teorija grupa. U knjizi [6] te na internetskoj stranici [13] se nalaze sve dodatne informacije vezane uz grupe i ostale algebarske strukture. Najprije je potrebno definirati grupu kao algebarsku strukturu:

Definicija Neprazan skup $(G, *)$, gdje je $* : G \times G \rightarrow G$ binarna operacija, zove se grupa ako vrijede sljedeća svojstva:

1. $(x * y) * z = x * (y * z) \quad \forall x, y, z \in G$ (asocijativnost)
2. $(\exists e \in G) : e * x = x * e = x \quad \forall x \in G$ (neutralni element)
3. $(\forall x \in G)(\exists! x^{-1} \in G) \quad x * x^{-1} = x^{-1} * x = e$ (inverzni element).

Ako još vrijedi i komutativnost $(x * y = y * x, \forall x, y \in G)$, tada kažemo da je grupa komutativna (abelova).

Ako postoji podskup $G \supseteq G_s$ koji je grupa sa istom binarnom operacijom kao u G , tada kažemo da je G_s podgrupa od G . Ako još postoji $G_s \supseteq G_{s_2}$, i tako dalje, tada kažemo da je $G \supseteq G_s \supseteq G_{s_2} \supseteq \dots$ lanac podgrupa. Uvodimo oznaku $G(s)$ za lanac podgrupa.

Definicija Ako je G grupa, a H njezina podgrupa te vrijedi:

$$aH = Ha, \quad \forall a \in G$$

tada kažemo da je H normalna (invarijantna) podgrupa od G i pišemo $H \trianglelefteq G$.

Teorija grupa je apstraktna, njezina pažnja je najviše usmjerena na svojstva koja su posljedica binarne operacije, a manje na prirodu elemenata ili samu operaciju. Iz ovih razloga je potrebno definirati preslikavanje koje će omogućiti međusobno uspoređivanje grupa. Definiramo homomorfizam grupa kao jedno takvo preslikavanje:

Definicija Neka su $(G, *)$ i (H, \times) grupe, a $*$ i \times su binarne operacije. Preslikavanje $f : G \rightarrow H$ je homomorfizam iz G u H ako vrijedi:

$$f(a * b) = f(a) \times f(b) \quad \forall a, b \in G.$$

Homomorfizam koji je bijekcija se zove izomorfizam. Također, može se definirati i antihomomorfizam kao:

$$f(a * b) = f(b) \times f(a) \quad \forall a, b \in G.$$

On je, očito, ekvivalentan homomorfizmu u slučaju abelovih grupa. Sasvim analogno, bijektivni antihomomorfizam je antiizomorfizam.

Dalje definiramo direktan produkt grupa. Najjednostavniji primjer direktnog produkta su koordinate točaka u Kartezijevoj ravnini, odnosno, $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$. Ovo možemo označavati kao $\mathbb{R}^2 = \mathbb{R} \times \mathbb{R}$. Direktan produkt dvije grupe je također grupa što se može lako i dokazati.

Definicija Neka su G i H grupe. Direktan produkt $G \times H$, uz operaciju množenja po komponentama:

$$(g_1, h_1) \cdot (g_2, h_2) = (g_1 \cdot g_2, h_1 \cdot h_2), \quad \forall g_1, g_2 \in G, \quad \forall h_1, h_2 \in H$$

je grupa. Isto možemo napraviti i za više od dvije grupe. Tada za beskonačan broj grupa u produktu pišemo $\prod_i^{+\infty} G_i$, a za konačan broj grupa $\prod_i^n G_i$. Podgrupa direktnog produkta grupa $\bigoplus_{i \in I} G_i$ se zove direktna suma grupa. Za konačne grupe vrijedi:

$$G_1 \times \dots \times G_n = \prod_i^n G_i = \bigoplus_i^n G_i = G_1 \oplus \dots \oplus G_n.$$

Odnosno, za konačne grupe su direktan produkt grupa i direktna suma grupa ekvivalentni. Grupa od interesa u ovome radu (S_3) je konačna stoga u ovo nije potrebno ulaziti detaljnije.

Nastavljamo izgradnju teorije algebarskih struktura definiranjem prstena i polja. Kao što smo već prije opisali, grupe su algebarske strukture koje tvori jedna binarna operacija te neprazan skup elemenata zatvorenih na tu operaciju. S druge strane prsteni su algebarske strukture koje sadrže dvije binarne operacije. U nastavku definiramo prstene.

Definicija Neprazan skup $(R, +, \cdot)$, gdje su $+$: $R \times R \rightarrow R$ i \cdot : $R \times R \rightarrow R$ binarne operacije, zove se prsten ako vrijede sljedeća svojstva:

1. $(R, +)$ je komutativna grupa s neutralnim elementom e_+
2. (R, \cdot) je skup zatvoren na operaciju \cdot i vrijedi asocijativnost
3. Vrijedi distributivnost množenja prema zbrajanju:

$$x \cdot (y + z) = x \cdot y + x \cdot z, \quad \forall x, y, z \in R$$

$$(x + y) \cdot z = x \cdot z + y \cdot z, \quad \forall x, y, z \in R$$

Ako je (R, \cdot) komutativna grupa tada kažemo da je $(R, +, \cdot)$ (ili, kraće, R) polje. Ako postoji podskup $P \subseteq R$ koji je i sam prsten s obzirom na iste operacije kao i R tada kažemo da je P potprsten od R . Ipak, pri proučavanju prstena, bitniju ulogu od potprstena igraju ideali. Njih definiramo u nastavku.

Definicija Neka je R prsten. Podskup $I \subseteq R$ je lijevi (desni) ideal u R ako vrijedi sljedeće:

1. I je potprsten od R
2. $\forall r \in R$ i $\forall x \in I$ je $rx \in I$ ($xr \in I$)

Podskup $I \subseteq R$ je ideal (obostrani) u prstenu R ako je i lijevi i desni ideal.

Sada kada imamo definiciju prstena i polja, možemo definirati vektorske prostore i linearne operatore nad njima. Svi operatori korišteni u ovome radu su linearni stoga nije potrebno u ovo ulaziti detaljnije.

Definicija Neka je V abelova grupa u odnosu na operaciju zbrajanja vektora. Neka je F polje. Elementi iz V su vektori, a elementi iz F su skalari. Nadalje, neka je $g : F \times V \rightarrow V$ preslikavanje koje zovemo vanjsko množenje. g ima sljedeća svojstva:

1. $\alpha(\beta v) = (\alpha\beta)v \quad \forall \alpha, \beta \in F, \quad \forall v \in V$ (kvaziasocijativnost)
2. $(\exists e \in F) \quad e \cdot v = v \quad \forall v \in V$ (neutralni element)
3. $(\alpha + \beta)v = \alpha v + \beta v \quad \forall \alpha, \beta \in F, \quad \forall v \in V$ (distributivnost u odnosu na zbrajanje u F)
4. $\alpha(v + w) = \alpha v + \alpha w \quad \forall \alpha \in F, \quad \forall v, w \in V$ (distributivnost u odnosu na zbrajanje u V).

Tada uređenu trojku (F, V, g) zovemo vektorski prostor nad poljem F , u oznaci $V(F)$.

Definicija Neka su V i W vektorski prostori nad poljem F . Preslikavanje $\hat{A} : V \rightarrow W$ se zove linearan operator ako vrijedi:

$$\hat{A}(\alpha v + \beta w) = \alpha \hat{A}v + \beta \hat{A}w \quad \forall \alpha, \beta \in F, \quad \forall v, w \in V.$$

Jedna od matematičkih struktura u središtu pozornosti ovog rada su polinomi stoga je potrebno definirati i njih. Polinomi sa operacijama zbrajanja i množenja polinoma tvore prsten, tzv. prsten polinoma.

Definicija Izraz oblika $P(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i$, $n \in \mathbb{N}$, $a_i \in R$ gdje je R prsten sa definiranom jedinicom za množenje ((R, \cdot) je grupa.) se zove polinom u varijabli x . Dakle, koeficijente polinoma uzimamo iz

nekog prstena (npr. \mathbb{Z} , \mathbb{R} ili \mathbb{C}). Skup svih polinoma sa operacijama zbrajanja i množenja polinoma tvori prsten, ovaj prsten zovemo prsten polinoma. Na primjer, nad poljem kompleksnih brojeva, pišemo $\mathbb{C}[x]$ za prsten polinoma. Analogno možemo definirati i polinome u više varijabli. Oznaka, za npr. prsten polinoma u n varijabli nad poljem kompleksnih brojeva je $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$.

Preostaje još definirati modul te smo time pokrili sve bitne definicije iz ovog područja potrebne za razumjevanje ovog rada. Definiramo i bazu za module jer je ona potrebna za definiranje slobodnog modula.

Definicija Neka je R prsten te neka je e_R njegova identiteta kod množenja. Kažemo da je M lijevi R -modul ako je $(M, +)$ abelova grupa i $* : R \times M \rightarrow M$ binarna operacija te vrijedi sljedeće:

1. $r * (x + y) = r * x + r * y, \forall r \in R, \forall x, y \in M$
2. $(r + s) * x = r * x + s * x, \forall r, s \in R, \forall x \in M$
3. $(rs) * x = r * (s * x), \forall r, s \in R, \forall x \in M$
4. $e_R * x = x, \forall x \in M$

Analogno se definira i desni R -modul samo prsten djeluje s desne strane ($* : M \times R \rightarrow M$). Cijela teorija se gradi potpuno analogno za lijevi i desni R -modul stoga možemo govoriti samo R -modul. Dalje definiramo bazu na sljedeći način.

Definicija Za prsten R i R -modul M , skup $E \subseteq M$ je baza za M ako vrijedi sljedeće:

1. E je generirajući skup u M . Odnosno, za svaki element iz M vrijedi da je suma elemenata iz E pomnožena sa koeficijentima iz R .
2. E je linearno nezavisan. Odnosno, $r_1 e_1 + r_2 e_2 + \dots + r_n e_n = 0_M$ i $e_1, \dots, e_n \in E$ različiti $\Rightarrow r_1 = r_2 = \dots = r_n = 0_R$ (0_R je neutralni element zbrajanja u R , a 0_M je neutralni element zbrajanja u M).

Ako R -modul M ima bazu tada kažemo da je M slobodni modul.

1.2 Grupa permutacija

Grupa u središtu pozornosti ovog rada je grupa permutacija odnosno simetrična grupa. Ona je definirana u nastavku za općeniti, n -dimenzionalni slučaj.

Definicija Neka je $S \neq \emptyset$ neki skup. Definiramo:

$$\text{Perm}(S) := \{f : S \rightarrow S \mid f \text{ je bijekcija}\}$$

$(\text{Perm}(S), \circ)$, gdje je " \circ " kompozicija funkcija, je grupa. Ta se grupa zove grupa permutacija ili simetrična grupa.

Posebno, ako je S konačan skup, permutacije od S mogu se zapisati na sljedeći način:

$$S_n = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n-1 & n \\ f(1) & f(2) & f(3) & \cdots & f(n-1) & f(n) \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

Bitno je spomenuti da je broj elemenata, odnosno kardinalni broj, grupe permutacija za konačne skupove: $|S_n| = n!$.

U daljnjem tekstu ćemo koristiti notaciju t, u, v za varijable koje permutiramo zbog lakšeg snalaženja u kasnijem tekstu. Ovakvu akciju permutiranja zovemo permutacija koordinatnih osi t, u, v . U ovome radu promatramo grupu S_3 . Ova grupa je, očito, konačna, a njezin broj elemenata je $|S_3| = 3! = 6$. Dakle, postoji 6 mogućih permutacija, a to su:

$$\begin{aligned} e &= \begin{pmatrix} t & u & v \\ t & u & v \end{pmatrix}, (tu) = \begin{pmatrix} t & u & v \\ u & t & v \end{pmatrix}, (tv) = \begin{pmatrix} t & u & v \\ v & u & t \end{pmatrix}, \\ (uv) &= \begin{pmatrix} t & u & v \\ t & v & u \end{pmatrix}, (tuv) = \begin{pmatrix} t & u & v \\ u & v & t \end{pmatrix}, (tvu) = \begin{pmatrix} t & u & v \\ v & t & u \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.2)$$

Općenito, grupa S_n nije abelova (ne vrijedi komutativnost). Uobičajeno je koristiti tablicu množenja za dokazivanje zatvorenosti grupe. U nastavku je navedena takva tablica za grupu S_3 (s obzirom na kompoziciju \circ). Pri čemu, prvo djeluje permutacija u prvom redu, a zatim permutacija u prvom stupcu.

\circ	e	(tu)	(uv)	(tv)	(tuv)	(tvu)
e	e	(tu)	(uv)	(tv)	(tuv)	(tvu)
(tu)	(tu)	e	(tuv)	(tvu)	(uv)	(tv)
(uv)	(uv)	(tvu)	e	(tuv)	(tv)	(tu)
(tv)	(tv)	(tuv)	(tvu)	e	(tu)	(uv)
(tuv)	(tuv)	(tv)	(tu)	(uv)	(tvu)	e
(tvu)	(tvu)	(uv)	(tv)	(tu)	e	(tuv)

Tablica 1.1: Tablica množenja za S_3

Operatore najčešće prikazujemo kao matrice. Tako, na primjer, kada djelujemo simetričnom grupom S_3 na neki vektorski prostor V , njezine elemente, odnosno permutacije (1.2), prikazujemo kao sljedeće matrice:

$$\begin{aligned} \hat{D}(e) &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \hat{D}(tu) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \hat{D}(tv) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ \hat{D}(uv) &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \hat{D}(tuv) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \hat{D}(tvu) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (1.3)$$

Potrebno je reći i nešto o reprezentacijama grupa. Općenito, reprezentacija od neke grupe G je homomorfizam od G u grupu $D(G)$. Elementi grupe $D(G)$ su operatori u vektorskom prostoru V , a ako imamo bazu u V tada su elementi od $D(G)$ matrice. Ako neka grupa G ima dvije reprezentacije

$D^{(1)}(G)$ (dimenzije h_1) i $D^{(2)}(G)$ (dimenzije h_2), tada postoji i treća reprezentacija koja je direktna suma ove dvije, odnosno $D(G) = D^{(1)}(G) \oplus D^{(2)}(G)$. Reprezentacija grupe je reducibilna ako se primjenom transformacije sličnosti T može prikazati na sljedeći način:

$$TD(R)T^{-1} = \begin{bmatrix} D^{(1)}(R) & 0 \\ 0 & D^{(2)}(R) \end{bmatrix}, \quad \forall R \in G \quad (1.4)$$

Ukoliko ovo nije moguće, kažemo da je reprezentacija grupe ireducibilna. Matrična reprezentacija (1.3) grupe permutacija S_3 se zove prirodna reprezentacija jer proizlazi direktno iz definicije. Ako je preslikavanje iz grupe G u grupu $D(G)$ izomorfizam (bijekcija), tada kažemo da je reprezentacija vjerna. Vjerne reprezentacije, općenito, nisu ireducibilne. Može se pokazati da grupa S_3 ima točno 3 ireducibilne reprezentacije. U nastavku je navedena tablica koja ih imenuje te navodi njihove karakteristike.

DIMENZIJA REPREZENTACIJE	IME REPREZENTACIJE	OZNAKA	e	(tu)	(tuv)
1	TRIVIJALNA	A_1	1	1	1
1	ALTENIRAJUĆA	A_2	1	-1	1
2	STANDARDNA	E	2	0	-1

Tablica 1.2: Tablica karaktera

U tablici, stupci predstavljaju klase konjugacija. Element grupe $A \in G$ je konjugat od $B \in G$ ako možemo pronaći $C \in G$ takav da je $B = CAC^{-1}$. Klasa konjugacije je skup koji sadrži sve ovakve elemente iz grupe G . Grupa S_3 ima 3 klase konjugacija (e , $\{(tu), (tv), (uv)\}$ i $\{(tuv), (tvu)\}$). Dakle, (tu) , u tablici, predstavlja sve 2-cikluse permutacija, a (tuv) predstavlja sve 3-cikluse permutacija. Treba još spomenuti da su u redovima u tablici napisane ireducibilne reprezentacije, dok brojevi predstavljaju tragove matrica matričnih elemenata ireducibilnih reprezentacija. Ove tragove matrica zovemo karakteri.

Karakter definiramo kao trag matrice u matričnoj reprezentaciji i označavamo ga sa χ . Očito je da u (1.4) za karakter reprezentacije D vrijedi:

$$\chi(R) = \chi^{(1)}(R) + \chi^{(2)}(R), \quad \forall R \in G \quad (1.5)$$

Bitno je spomenuti i da je cijela grupa S_3 generirana sa samo dvije permutacije, a to su upravo (tu) i (tuv) . Dakle, ukoliko imamo ove dvije permutacije, imamo cijelu grupu jer sve preostale elemente grupe možemo dobiti međusobnim množenjem ove dvije.

Ako u vektorskom prostoru reprezentacije V možemo pronaći dva potprostora koji su invarijantni na grupu G , u oznakama V_1 i V_2 tada kažemo da je taj prostor reducibilan te se može prikazati kao direktna suma $V = V_1 \oplus V_2$. Inače, kažemo da je taj prostor ireducibilan.

1.3 Reynoldsovi operatori

Definicija Neka je $\mathbb{C}[x]$ prsten polinoma nad poljem kompleksnih brojeva \mathbb{C} . Neka je G grupa sa elementima $g \in G$. Reynoldsov operator \hat{R} definiramo kao [8]:

$$\hat{R} : \mathbb{C}[x] \longrightarrow \mathbb{C}[x]^G, \quad \hat{R}f = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \hat{D}_g f, \quad \forall f \in \mathbb{C}[x] \quad (1.6)$$

Ovdje je \hat{D}_g operator elementa g iz grupe G , a $|G|$ kardinalni broj grupe G . Dakle, Reynoldsov operator \hat{R} je preslikavanje koje preslikava polinome iz $\mathbb{C}[x]$ u prosjek s obzirom na grupu $G(\mathbb{C}[x]^G)$.

Slutnja 1.3.1. *Reynoldsov operator \hat{R} zadovoljava sljedeća svojstva [8]:*

1. \hat{R} je linearan operator, odnosno, vrijedi:

$$\hat{R}(\alpha f + \beta g) = \alpha \hat{R}f + \beta \hat{R}g, \quad \forall f, g \in \mathbb{C}[x], \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

2. Za sve invarijante $i \in \mathbb{C}[x]^G$ s obzirom na grupu G , vrijedi $\hat{R}i = i$
3. \hat{R} je homomorfizam za $\mathbb{C}[x]^G$ -modul, odnosno:

$$\hat{R}(f \cdot i) = (\hat{R}f) \cdot (\hat{R}i) = (\hat{R}f) \cdot i, \quad \forall f \in \mathbb{C}[x], \quad \forall i \in \mathbb{C}[x]^G$$

U [1] su detaljno opisani Reynoldsovi operatori s obzirom na algebru kao algebarsku strukturu. Međutim, većina rezultata vrijedi i za prstene i module. Algebra je algebarska struktura koja sadrži dva unutarnja množenja i jedno vanjsko. Neka je \mathbb{A} algebra. Reynoldsov operator \hat{R} zadovoljava Reynoldsov identitet [1]:

$$\hat{R} : \mathbb{A} \longrightarrow \mathbb{A}, \quad \hat{R}(fg) = (\hat{R}f)(\hat{R}g) + \hat{R}[(f - \hat{R}f)(g - \hat{R}g)], \quad \forall f, g \in \mathbb{A}$$

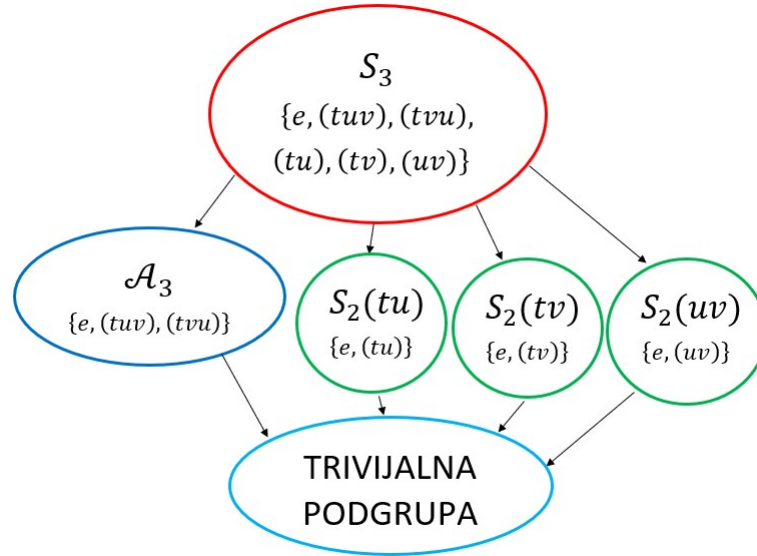
Sljedeći korolar iz [1] govori o svojstvenim vrijednostima Reynoldsovog operatora:

Korolar 1.3.2. *Reynoldsov operator \hat{R} zadovoljava jednadžbu $\hat{R}^2(\hat{I} - \hat{R}) = 0$ (\hat{I} je operator identitete) te vrijedi $\hat{R}^2 = \hat{R}$. Jedine svojstvene vrijednosti u spektru od \hat{R} su 0 i 1.*

Sada možemo promatrati Reynoldsove operatore za grupu S_3 . Najprije, prema (1.6), imamo Reynoldsov operator za cijelu grupu S_3 :

$$\hat{R}_{S_3} = \frac{1}{6}(\hat{D}(e) + \hat{D}(tu) + \hat{D}(tv) + \hat{D}(uv) + \hat{D}(tuv) + \hat{D}(tvu)) \quad (1.7)$$

Kao što je već spomenuto, svaka podgrupa grupe je i sama grupa s obzirom na istu operaciju. Promatranjem tablice 1.1 (tablica množenja za grupu S_3), možemo primjetiti da su permutacije (tuv) , (tvu) i e međusobno zatvorene. Ove permutacije se zovu parne permutacije, dok se preostale permutacije (tu) , (uv) i (tv) zovu neparne permutacije. Parne permutacije tvore podgrupu grupe S_3 ,

Slika 1.1: Struktura podgrupa grupe S_3

tzv. alternirajuću podgrupu $\mathcal{A}_3 \subset S_3$. Kako je \mathcal{A}_3 grupa, možemo prema (1.6) definirati Reynoldsov operator:

$$\hat{R}_{\mathcal{A}_3} = \frac{1}{3}(\hat{D}(e) + \hat{D}(tuv) + \hat{D}(tvu)) \quad (1.8)$$

Na slici 1.3 je prikazana struktura podgrupa grupe S_3 . Trivijalna podgrupa je ona koja ne sadrži niti jedan element. Može se primjetiti da grupa S_3 ima točno 3 S_2 podgrupe. Kako su ovo također grupe, za svaku od njih možemo konstruirati po jedan novi Reynoldsov operator:

$$\hat{R}_{S_2(tu)} = \frac{1}{2}(\hat{D}(e) + \hat{D}(tu)), \hat{R}_{S_2(tv)} = \frac{1}{2}(\hat{D}(e) + \hat{D}(tv)), \hat{R}_{S_2(uv)} = \frac{1}{2}(\hat{D}(e) + \hat{D}(uv)) \quad (1.9)$$

Reynoldsove operatore ćemo koristiti u postupku redukcije u glavnom dijelu ovog diplomskog rada. Svojtvene funkcije operatora alternirajuće podgrupe (1.8) sa svojtvenom vrijednosti 1 uvijek čine jednodimenzionalne potprostore (A_1 ili A_2), dok oni sa svojtvenom vrijednosti 0 čine dvodimenzionalne standardne E reprezentacije. Jedan od operatora S_2 podgrupa nam može pomoći u određivanju o kojoj je jednodimenzionalnoj reprezentaciji riječ. Tako svojtvena vrijednost 1 predstavlja A_1 , a svojtvena vrijednost 0 A_2 reprezentaciju.

Postupak redukcije baze

Dalje navodimo neke najbitnije tvrdnje i teoreme vezane uz sam postupak redukcije. U [4] je moguće pročitati detaljnije o tome. Ista knjiga sadrži i niz primjera reduciranja s obzirom na različite grupe. Najprije je potrebno reći da ako je za linearni operator \hat{C} i neki vektor ν zado-

voljena jednadžba:

$$\hat{C}v = av$$

tada kažemo da je v svojstveni vektor operatora \hat{C} sa svojstvenom vrijednosti a .

Korolar 1.3.3. *Ako je \hat{C} operator koji komutira sa cijelom grupom G i ako je V_λ invarijantni potprostor za \hat{C} i ireducibilni potprostor za G tada je V_λ svojstveni prostor od \hat{C} .*

Dokaz. Kako je V_λ invarijantni potprostor od \hat{C} , možemo pronaći svojstvene vektore za \hat{C} u V_λ i sakupiti ih u svojstvene prostore za \hat{C} .

Pretpostavimo suprotno, odnosno da V_λ možemo rastaviti na direktnu sumu dva svojstvena potprostora od \hat{C} ($V_\lambda = V_1 \oplus V_2$). Odnosno,

$$\hat{C}V_i = \lambda_i V_i, \quad i = 1, 2$$

A ovo je u kontradikciji sa pretpostavkom o ireducibilnosti od V_λ . Dakle, jedina mogućnost je $\hat{C}V_\lambda = \lambda V_\lambda$. \square

Ovaj korolar je jedna od mnogih varijacija Schurove leme. Kažemo da dva operatora $\hat{C}_1, \hat{C}_2 \in G$ komutiraju ako vrijedi $[\hat{C}_1, \hat{C}_2] = \hat{C}_1\hat{C}_2 - \hat{C}_2\hat{C}_1 = 0$. Ako dva ili više operatora međusobno komutiraju, tada kažemo da oni čine skup komutirajućih operatora, ako je ovaj skup dovoljan da reduciramo cijelu bazu vektorskog prostora V u ireducibilne reprezentacije grupe G , kažemo da je to potpun skup komutirajućih operatora i označavamo ga sa CSCO.

Operatori grupe permutacija S_3 , (1.3), ne komutiraju međusobno stoga nisu dobar izbor za CSCO. Jedna mogućnost za izbor operatora koji će činiti CSCO u grupi S_3 su tzv. operatori klase.

$$\hat{D}_1 = \hat{D}(e), \quad \hat{D}_2 = \hat{D}(tu) + \hat{D}(tv) + \hat{D}(uv), \quad \hat{D}_3 = \hat{D}(tuv) + \hat{D}(tvu) \quad (1.10)$$

Oni zapravo sumiraju sve operatore iz svake pojedine klase. Lako se može provjeriti da ovi operatori komutiraju međusobno, a i sa operatorima (1.3) te su stoga dobar izbor za CSCO. Ipak, u ovome radu ćemo koristiti Reynoldsove operatore koji također međusobno komutiraju. Mogući izbor operatora za reduciranje nije predodređen te postoji puno mogućih skupova operatora koje možemo koristiti.

Teorem 1.3.4. *Neka je $\hat{C} \in G$ operator u vektorskom prostoru V . Nužan i dovoljan uvjet da funkcija $\psi_\lambda \in V$ bude u ireducibilnoj reprezentaciji $\text{irrep}(\lambda)$ je da zadovoljava svojstvenu jednadžbu za svojstvenu vrijednost λ , odnosno*

$$\hat{C}\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda$$

Dokaz. Pretpostavimo da je ψ_λ vektor u ireducibilnom potprostoru V od G . Očito, V je prostor reprezentacije za bilo koji operator od G te je invarijantan podprostor od \hat{C} . Prema Schurovoj lemi, ψ_λ je nužno svojstveni vektor od \hat{C} . Dovoljan uvjet slijedi iz činjenice da ako vektor ψ_λ pripada svojstvenom prostoru V_λ od CSCO od G tada ψ_λ pripada ireducibilnoj reprezentaciji λ od G . \square

Kao što je već spomenuto, grupe S_n nisu abelove. Ali, za $n = 2$, grupa S_2 je abelova odnosno komutativna što se lako može provjeriti. Kako je S_2 abelova grupa i za svaku podgrupu $S_n \subset S_{n+1}$ vrijedi da je kanonska podgrupa (Reduciranjem ireducibilnih reprezentacija nadgrupe, svaka ireducibilna reprezentacija podgrupe se javlja točno jednom ili se uopće ne javlja.), kažemo da je lanac podgrupa $S_n \supset S_{n-1} \supset \dots \supset S_3 \supset S_2$ kanonski lanac podgrupa. Iz ovoga direktno slijedi da je $S_3 \supset S_2$ kanonski lanac podgrupa. Iz tablice množenja za grupu S_3 vidimo da je i alternirajuća podgrupa \mathcal{A}_3 također abelova grupa. Dakle, lanac podgrupa $S_3 \supset \mathcal{A}_3$ je također kanonski lanac podgrupa te za njega, također, vrijedi sljedeći teorem.

Teorem 1.3.5. *Neka su $\hat{C} \in G$ i $\hat{C}(s) \in G(s)$ operatori u vektorskom prostoru V te neka je $G \supseteq G(s)$ lanac podgrupa. Nužan i dovoljan uvjet da funkcija $\psi_{(\lambda,m)} \in V$ bude u ireducibilnoj reprezentaciji $\text{irrep}(\lambda, m)$ je da zadovoljava svojstvene jednadžbe:*

$$\begin{pmatrix} \hat{C} \\ \hat{C}(s) \end{pmatrix} \psi_{(\lambda,m)} = \begin{pmatrix} \lambda \\ m \end{pmatrix} \psi_{(\lambda,m)}$$

Ako je $G \supseteq G(s)$ kanonski lanac podgrupa tada kažemo da je $(\hat{C}, \hat{C}(s))$ potpun skup komutirajućih operatora i označavamo ga CSCOII.

Ponekad za potpunu redukciju nije dovoljno koristiti operatore iz samo jedne grupe, odnosno, njezinih pripadnih lanaca podgrupa. Probleme u višedimenzionalnim prostorima zadaje određivanje standardnih E reprezentacija jer broj jednadžba često nije dovoljan. U slučaju grupe permutacija S_3 , možemo si postaviti pitanje: "Jesu li koordinatne osi t , u i v jedini objekti koje možemo permutirati?". Odgovor je ne. Analogno grupi S_3 možemo definirati grupu permutacija za neke druge objekte. Više o tome će biti rečeno kasnije (na konkretnom primjeru), a za sada ćemo, općenito, označavati ovakve grupe s \bar{G} , a pripadne operatore s \bar{C} zbog lakšeg razlikovanja od grupe G .

Teorem 1.3.6. *Neka su $\hat{C} \in G$, $\hat{C}(s) \in G(s)$ te $\bar{C} \in \bar{G}(s)$ operatori u vektorskom prostoru V te neka je $G \supseteq G(s)$ lanac podgrupa. Nužan i dovoljan uvjet da funkcija $\psi_{(\lambda,m,k)} \in V$ bude u ireducibilnim reprezentacijama $\text{irrep}(\lambda, m)$ i u $\text{irrep}(\lambda, k)$ je da zadovoljava svojstvene jednadžbe:*

$$\begin{pmatrix} \hat{C} \\ \hat{C}(s) \\ \bar{C}(s) \end{pmatrix} \psi_{(\lambda,m,k)} = \begin{pmatrix} \lambda \\ m \\ k \end{pmatrix} \psi_{(\lambda,m,k)}$$

Ako je $G \supseteq G(s)$ kanonski lanac podgrupa tada kažemo da je $(\hat{C}, \hat{C}(s), \bar{C}(s))$ potpun skup komutirajućih operatora i označavamo ga CSCOIII.

Uvijek možemo odabrati samo jedan operator koji će činiti CSCO kao linearnu kombinaciju ostalih operatora. Na primjer, ako je CSCOIII neke grupe (npr. S_3) $(\hat{C}(S_3), \hat{C}(S_2), \bar{C}(\bar{S}_2))$ sa svojim vrijednostima (λ, m, k) , možemo uzeti operator:

$$K = 3\hat{C}(S_3) + 2\hat{C}(S_2) + \bar{C}(\bar{S}_2)$$

Svojstvene vrijednosti operatora K su onda $\alpha = 3\lambda + 2m + k$. Ukoliko za sve vektore dobijemo različitu svojstvenu vrijednost α tada znamo da kvantna stanja nisu degenerirana.

Postupak reduciranja se provodi na sljedeći način. Pronađemo CSCO te tražimo svojstvene vrijednosti i svojstvene vektore svakog pojedinog operatora. Dobiveni svojstveni vektori će činiti ireducibilne reprezentacije grupe G , s obzirom na koju reduciramo taj vektorski prostor V . Ukoliko dobijemo reprezentacije koje nisu ireducibilne to ukazuje da skup operatora nije CSCO te da trebamo pronaći i dodati još jedan operator. Nakon što smo reducirali cijelu bazu, možemo pronaći matricu transformacije sličnosti T te, korištenjem (1.4), dobiti matrice grupe G u novoj bazi. Ono što se dobije je blok-dijagonalna forma matrice u kojoj se nalaze matrični elementi za svaku ireducibilnu reprezentaciju redom po dijagonali. Iz ovog razloga je nužno da vektori koji čine standardne reprezentacije budu "jedan do drugoga".

Kompozicije i particije

Osim svojstvenim vrijednostima operatora iz CSCO, ireducibilne reprezentacije možemo prikazivati i korištenjem particija. Pojmovi particija i kompozicija su usko vezani stoga ih definiramo zajedno.

Kompozicije su uređene podjele u kojima je poredak bitan. Ukupan mogući broj k -kompozicija je $\binom{n+k-1}{k-1} = \binom{n+k-1}{n}$, ovdje je n broj čije kompozicije promatramo, a k broj brojeva na koji broj n rastavljamo. Na primjer, ukupan broj 3-kompozicija broja 3 je $\binom{3+3-1}{3-1} = \binom{5}{2} = 10$. S druge strane, particije su uređene podjele u kojima poredak nije bitan te se zapisuju u padajućem nizu. Ukupan broj particija nekog broja se računa prema Hardy-Ramunujan-Rademacherovoj formuli. Ovdje ju ne navodimo jer nije značajna za ovaj rad, a, osim toga, za manji n je moguće pronaći particije bez korištenja tako složene formule.

U nastavku navodimo svih 10 mogućih kompozicija broja 3:

$$3 = 1 + 1 + 1$$

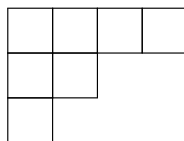
$$3 = 2 + 1 + 0, 3 = 2 + 0 + 1, 3 = 0 + 2 + 1, 3 = 1 + 2 + 0, 3 = 1 + 0 + 2, 3 = 0 + 1 + 2$$

$$3 = 3 + 0 + 0, 3 = 0 + 3 + 0, 3 = 0 + 0 + 3.$$

Sada možemo primijetiti da postoje samo 3 moguće particije broja 3, a to su: $[3] = 3 + 0 + 0$, $[21] = 2 + 1 + 0$ i $[111] = 1 + 1 + 1$. Svaka od njih predstavlja jednu ireducibilnu reprezentaciju grupe S_3 . Tako particija $[3]$ predstavlja trivijalnu A_1 reprezentaciju, particija $[21]$ standardnu E reprezentaciju, a particija $[111]$ alternirajuću A_2 reprezentaciju.

Youngovi dijagrami

Postoji još jedan način prikazivanja ireducibilnih reprezentacija, a to je preko Youngovih dijagrama. Oni su detaljno opisani u [7], a ovdje ćemo ih opisati samo ukratko. Youngovi dijagrami predstavljaju konačan skup kvadrata koji su posloženi u redove u nerastućem poretku. Na primjer,



U navedenom primjeru imamo četiri kvadrata u prvom redu, dva kvadrata u drugome redu i jedan kvadrat u trećem redu. Ukupan broj kvadrata je sedam. Ovaj Youngov dijagram je particija broja sedam, u što se možemo uvjeriti zbrajanjem broja kvadrata u redovima. Dakle, $[421] = 4 + 2 + 1$. Ovaj dijagram predstavlja ireducibilnu reprezentaciju grupe S_7 i to je reprezentacija mješovite simetrije. Ako dijagram reflektiramo preko glavne dijagonale dobivamo još jednu particiju. Ova particija se zove konjugirana particija. U ovom primjeru ona glasi $[3211] = 3 + 2 + 1 + 1$. To je zapravo zbroj kvadrata u pojedinim stupcima. Kažemo da je particija samokonjugirajuća ako se ne mijenja reflektiranjem preko dijagonale.

Promotrimo sada particije za grupu S_3 . Pripadni Youngovi dijagrami su sljedeći:

$$[3] = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}, [21] = \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \\ \hline \end{array}, [111] = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}$$

Particija $[3]$ i pripadni Youngov dijagram predstavljaju trivijalnu A_1 reprezentaciju grupe S_3 . Pripadni dijagram se zove simetrični dijagram. $[111]$ predstavlja alternirajuću A_2 reprezentaciju, a pripadni dijagram se zove antisimetrični dijagram. I, $[21]$ predstavlja standardnu E reprezentaciju, a pripadni dijagram je dijagram mješovite simetrije. Primijetimo da je particija $[3]$ konjugat particije $[111]$, a particija $[21]$ je samokonjugirajuća.

Sada smo u poziciji da govorimo o primjeni Youngovih dijagrama u teoriji reprezentacije grupa. Uvodimo primitivne objekte koji će nam predstavljati ono što permutiramo. Neka su ti primitivni objekti: t , u i v . Primjena Youngovih dijagrama zahtjeva strogo poredani skup, BSOMP $t < u < v$. Pri "slaganju" kvadrata moramo paziti da u redovima imamo rastući niz prema desno, a u stupcima strogo rastući niz prema dolje.

Započnimo slaganje Youngovih dijagrama tako da prvo spojimo dva kvadrata.

$$\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \quad (3 \times 3 = 6 + 3)$$

Kako imamo tri moguća primitivna objekta, svaki dijagram $\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array}$ predstavlja tri mogućnosti. Zbog toga što Youngov dijagram mora biti strogo rastući prema dolje i rastući u desno imamo samo tri mogućnosti za $\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}$ i 6 mogućnosti za $\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array}$. $\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}$ predstavlja vektore koji su potpuno antisimetrični s obzirom na grupu permutacija, a $\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array}$ predstavlja potpuno simetrične vektore. Sada dodajemo još jedan kvadrat na svaki od dobivenih dijagrama. Najprije dodajemo još jedan kvadrat na $\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array}$:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \\ \hline \end{array} \quad (6 \times 3 = 10 + 8)$$

Dakle, dobili smo 10 simetričnih vektora i 8 vektora mješovite simetrije. Nakon toga dodajemo još

jedan kvadrat na $\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}$:

$$\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \square = \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \quad (3 \times 3 = 8 + 1)$$

Dobili smo još 8 vektora mješovite simetrije i jedan potpuno antisimetrični vektor. Dijagrami $\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}$ u parovima čine standardne E reprezentacije simetrične grupe S_3 . Ukupno, postoji 10 mogućnosti za simetrični dijagram, samo jedna za antisimetrični dijagram te šesnaest za dijagrame mješovite simetrije. Ne razmatramo ih sve već samo one koji imaju sve različite oznake.

Najprije imamo potpuno simetrični dijagram $\begin{array}{|c|c|c|} \hline t & u & v \\ \hline \end{array}$, on predstavlja potpunu invarijantnost na permutacije varijabli t, u i v . Njegov konjugat je potpuno antisimetrični dijagram $\begin{array}{|c|} \hline t \\ \hline u \\ \hline v \\ \hline \end{array}$. On će za permutacije klase konjugacije (tu) mijenjati predznak, a za permutacije klase konjugacije (tuv) ostati nepromijenjen. Još imamo i dijagram mješovite simetrije $\begin{array}{|c|c|} \hline t & u \\ \hline v & \square \\ \hline \end{array}$, on će biti invarijantan na permutaciju (tu) , a njegov konjugat $\begin{array}{|c|c|} \hline t & v \\ \hline u & \square \\ \hline \end{array}$ će mijenjati predznak pri permutaciji (tu) . Ova dva čine dvodimenzionalnu reprezentaciju E kao što je i navedeno u tablici karaktera.

Ono što je ključno je da Youngovi dijagrami, u ovakvoj klasifikaciji, predstavljaju ireducibilne reprezentacije grupe S_3 .

1.4 Hilbertov prostor

Najprije definiramo \mathcal{L}^p prostore i njihova svojstva kako bismo mogli uvesti L^2 Hilbertov prostor. Elementi Hilbertovog prostora su funkcije koje, u slučaju kvantne mehanike, predstavljaju valne funkcije kvantnih stanja. Ipak, prije ovoga je potrebno definirati σ -algebru i mjeru kao funkciju nad njom.

Familija $\mathcal{F} \subseteq \mathcal{P}(X)$ (Ovdje $\mathcal{P}(X)$ predstavlja partitivni skup skupa X . Partitivni skup je skup svih podskupova.) se zove σ -algebra ako vrijedi:

1. $\emptyset \in \mathcal{F}$ (Sadrži prazan skup.)
2. $A \in \mathcal{F} \Rightarrow A^C \in \mathcal{F}$ (Ako sadrži neki skup onda sadrži i njegov komplement.)
3. $A_i \in \mathcal{F}, i \in \mathbb{N} \Rightarrow \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \in \mathcal{F}$ (Zatvorena je na prebrojive unije skupova.)

Neka je $X \neq \emptyset$ i \mathcal{F} σ -algebra na X . Funkcija $\mu : \mathcal{F} \rightarrow [1, +\infty]$ je mjera na \mathcal{F} ako vrijedi:

1. $\mu(\emptyset) = 0$

2. $E_i \in \mathcal{F}, i \in \mathbb{N}, E_i \cap E_j = \emptyset, \bigcup_{i=1}^{\infty} E_i \in \mathcal{F} \Rightarrow \mu\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} E_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} \mu(E_i)$

Uređeni par (X, \mathcal{F}) tada zovemo izmjerivi prostor, a uređenu trojku (X, \mathcal{F}, μ) prostor s mjerom. Školski primjer mjere bi bila Lebesgueova mjera. U jednoj dimenziji ona glasi:

$$\mu([a, b)) = b - a \quad (1.11)$$

Ovo je samo duljina intervala tj. duljina nečega općenito. Možemo ju generalizirati na n dimenzija. Tako je dvodimenzionalna Lebesgueova mjera površina, a trodimenzionalna volumen. Sada možemo krenuti sa \mathcal{L}^p prostorima.

Neka je (X, \mathcal{F}, μ) prostor s mjerom te neka je $p \in [1, +\infty)$. Promatramo dva moguća polja (\mathbb{R} i \mathbb{C}), označimo ih sa \mathbb{F} . Definiramo:

$$\mathcal{L}^p(X, \mathcal{F}, \mu; \mathbb{F}) := \{f : X \rightarrow \mathbb{F} \text{ izmjeriva} : |f|^p \text{ je } \mu\text{-integrabilna}\}$$

$\mathcal{L}^p(X, \mathcal{F}, \mu; \mathbb{F})$ je vektorski prostor nad \mathbb{F} . Na \mathcal{L}^p definiramo $\|\cdot\|_p : \mathcal{L}^p \rightarrow [0, +\infty)$:

$$\|f\|_p := \left(\int_X |f(x)|^p \mu(dx) \right)^{\frac{1}{p}} \quad (1.12)$$

Lako se pokaže da $\|\cdot\|_p$ zadovoljava sljedeća svojstva:

1. $\|f\|_p \geq 0, \forall f \in \mathcal{L}^p$
2. $\|\alpha f\|_p = |\alpha|^p \|f\|_p, \forall \alpha \in \mathbb{R}, \forall f \in \mathcal{L}^p$
3. $\|f\|_p = 0 \iff f = 0$ gotovo svuda

Osim ova tri navedena svojstva, da bi $\|\cdot\|_p$ bila norma mora vrijediti i nejednakost trokuta. (Točnije, 3. svojstvo mora vrijediti svugdje, a ne gotovo svuda u aksiomima norme.) O tome govori sljedeći teorem.

Teorem 1.4.1. *Neka je (X, \mathcal{F}, μ) prostor s mjerom i $p \in [1, +\infty)$ Ako su $f, g \in \mathcal{L}^p$ tada je i $f+g \in \mathcal{L}^p$ i vrijedi:*

$$\|f + g\|_p \leq \|f\|_p + \|g\|_p$$

Dokaz. Najprije razmatramo slučaj $p = 1$.

$$\|f + g\|_1 = \int_X |f + g| d\mu \leq \int_X (|f| + |g|) d\mu = \int_X |f| d\mu + \int_X |g| d\mu = \|f\|_1 + \|g\|_1$$

Ovdje smo u nejednakosti iskoristili $|f + g| \leq |f| + |g|$, a u 2. jednakosti linearnost integrala.

Treba još pokazati da tvrdnja vrijedi i za $p \in \langle 1, +\infty \rangle$. Neka je q takav da su p i q konjugirani eksponenti, odnosno, vrijedi:

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1 \iff p + q = pq \iff (p-1)q = p$$

Dakle, $(|f + g|^{p-1})^q = |f + g|^p$. Iz ovoga zaključujemo $|f + g|^{p-1} \in \mathcal{L}^q$.

Kako je $|f + g| \leq |f| + |g|$, vrijedi:

$$|f + g|^p \leq (|f| + |g|)|f + g|^{p-1}$$

Integriranjem ove nejednakosti dobivamo:

$$\begin{aligned} \int_X |f + g|^p d\mu &\leq \int_X |f||f + g|^{p-1} d\mu + \int_X |g||f + g|^{p-1} d\mu \\ \iff \|f + g\|_p^p &\leq \int_X |f||f + g|^{p-1} d\mu + \int_X |g||f + g|^{p-1} d\mu \end{aligned}$$

Poznato je da vrijedi $\|fg\|_1 = \int_X |fg| d\mu \leq \|f\|_p \|g\|_q$ za $f \in \mathcal{L}^p$ i $g \in \mathcal{L}^q$ (Hölder). Korištenjem ove nejednakosti dobivamo:

$$\|f + g\|_p^p \leq \|f\|_p \|(f + g)^{p-1}\|_q + \|g\|_p \|(f + g)^{p-1}\|_q = (\|f\|_p + \|g\|_p) \int_X |(f + g)^{p-1}|^q d\mu$$

Ovdje možemo iskoristiti $\frac{p}{q} = p - 1$, pa imamo:

$$\|f + g\|_p^p \leq (\|f\|_p + \|g\|_p) \|f + g\|_p^{p-1}$$

Ukoliko je $\|f + g\|_p = 0$ nejednakost vrijedi trivijalno. U suprotnom, dijeljenjem nejednakosti sa $\|f + g\|_p^{p-1}$ slijedi tvrdnja. Iz ovoga direktno slijedi i da je $f + g \in \mathcal{L}^p$. \square

Dakle, u \mathcal{L}^p prostorima vrijedi nejednakost trokuta. Ovaj teorem se zove "Nejednakost Minkowskog". Sada, zbog tri svojstva navedena ranije i nejednakosti trokuta, možemo zaključiti da je $\|\cdot\|_p$ "skoro" norma na \mathcal{L}^p . (Svojstvo 3. mora vrijediti uvijek, a ne gotovo svuda.) Dakle, \mathcal{L}^p je "skoro" normirani prostor. (Normirani prostor je vektorski prostor sa definiranom normom.) Problem se rješava definiranjem sljedeće klase ekvivalencije:

$$f \sim g \iff \|f - g\|_p = 0$$

Sada je moguće definirati kvocijentni prostor prema gore navedenoj klasi ekvivalencije:

$$L^p(X, \mathcal{F}, \mu; \mathbb{F}) := \mathcal{L}^p(X, \mathcal{F}, \mu; \mathbb{F}) / \sim$$

Ovaj prostor je normirani prostor. U kvantnoj fizici je od posebnog značaja L^2 prostor jer na njemu možemo definirati skalarni produkt. O tome govori sljedeći korolar.

Korolar 1.4.2. *Specijalno, za $p=2$, L^2 je Hilbertov prostor tj. potpuni unitarni prostor sa skalarnim produktom:*

$$\langle f, g \rangle_{L^2} = \int fg d\mu$$

Kažemo da su valne funkcije čestica u kvantnoj mehanici elementi gore definiranog L^2 unitarnog prostora. Strogo gledajući, ovo nije u potpunosti točno jer je zapravo riječ o klasama funkcija kao što je gore definirano, ali bez smanjenja općenitosti možemo govoriti o funkcijama. Dakle, Hermiteove valne funkcije, koje su rješenja Schrödingerove jednačbe za kvantni harmonički oscilator, su elementi L^2 Hilbertovog prostora. Hermiteove valne funkcije će biti izvedene kasnije. Više o L^p prostorima, L^2 Hilbertovom prostoru i primjeni matematike u kvantnoj mehanici moguće je pročitati u [12]. U Hilbertovom prostoru norma (1.12) izgleda ovako ($p = 2$):

$$\|f\|_2 := \left(\int_X |f(x)|^2 \mu(dx) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.13)$$

Bitno je još spomenuti i da je u slučaju okomitih funkcija skalarni produkt jednak nuli. Odnosno, za $f \perp g$:

$$\langle f, g \rangle_{L^2} = \int fg d\mu = 0$$

Poglavlje 2

Kvantna mehanika

Cilj ovog poglavlja je razmotriti ključne ideje iz kvantne mehanike potrebne za razumijevanje ovog diplomskog rada. Temelj kvantne mehanike je Schrödingerova jednačba:

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (2.1)$$

Ovdje \hat{H} predstavlja operator ukupne energije (Hamiltonijan), E vrijednost energije, a ψ valnu funkciju. U matematičkoj terminologiji, u (2.1) ψ je svojstvena funkcija Hamiltonijana, a E je svojstvena vrijednost.

Kao što je već spomenuto, dva operatora \hat{C}_1 i \hat{C}_2 komutiraju ako vrijedi $[\hat{C}_1, \hat{C}_2] = 0$. Ako dva operatora komutiraju, tada oni imaju skup netrivialnih zajedničkih svojstvenih funkcija. Pod netrivialnih se podrazumijeva, u ovom slučaju, različitih od konstantnih funkcija. Ako još k tome svaki od njih komutira s Hamiltonijanom, odnosno $[\hat{C}_1, \hat{H}] = 0$, $[\hat{C}_2, \hat{H}] = 0$, kažemo da su svojstvene vrijednosti operatora \hat{C}_1 i \hat{C}_2 dobri kvantni brojevi.

Valne funkcije ψ su elementi Hilbertovog prostora koji je definiran u matematičkom uvodu. Ovo znači da postoji niz okomitih funkcija $\{\varphi_n\}$ koje razapinju ovaj prostor te da se svaka valna funkcija ψ koja je element ovog Hilbertovog prostora može prikazati kao linearna kombinacija ovih funkcija, odnosno:

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \varphi_n(x)$$

Više o operatorima i Schrödingerovoj jednačbi piše u [3].

Na samom početku ovog poglavlja biti će opisan model harmoničkog oscilatora u kvantnoj mehanici. Nakon toga, dana je generalizacija kvantnog harmoničkog oscilatora na tri dimenzije. Dalje će biti opisan Bargmannov prostor i prelazak iz L^2 Hilbertovog prostora u Bargmannov prostor korištenjem transformata. Naposljetku će biti opisani sustavi čestica, posebice slučaj dva identična fermiona s kojim se ovaj rad zapravo bavi.

2.1 Harmonički oscilator

Postoje dva različita pristupa rješavanju kvantnog harmoničkog oscilatora (algebarski i analitički). Oba načina su opisana u [2], a algebarska metoda je opisana i u [7]. Algebarska metoda se svodi na definiranje operatora spuštanja i podizanja koje primjenjujemo na valne funkcije i na taj način dobivamo sva moguća kvantna stanja energije. Ovdje je opisan analitički pristup. Ideja harmoničkog oscilatora u klasičnoj fizici je zasnovana na tijelu mase m koje titra na opruzi konstante elastičnosti k . Problem u kvantnoj fizici se svodi na rješavanje Schrödingerove jednadžbe (2.1) za potencijal harmonijskog oscilatora. Hamiltonijan glasi:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (2.2)$$

Uvrštavanjem u Schrödingerovu jednadžbu (2.1) dobije se:

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = E\psi \quad (2.3)$$

Uvodimo bezdimenzionalnu varijablu $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$, pa jednadžba (2.3) glasi:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - K)\psi \quad (2.4)$$

gdje je $K = \frac{2E}{\hbar\omega}$. Rješavanjem jednadžbe (2.4) dobivamo dozvoljene vrijednosti za K , a time i za E . Najprije je potrebno uočiti da na velikim ξ -evima (odnosno x -evima) vrijedi:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2\psi$$

Aproksimativno rješenje ove jednadžbe je:

$$\psi(\xi) \approx Ae^{-\xi^2/2} + Be^{\xi^2/2}$$

Odmah se vidi da B dio ne konvergira stoga ga nije moguće normalizirati. Iz ovog se razloga uzima rješenje oblika:

$$\psi(\xi) = h(\xi)e^{-\xi^2/2}$$

Ovu jednadžbu dva puta deriviramo te nju i njenu 2. derivaciju uvrstimo u (2.4). Slijedi:

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh}{d\xi} + (K - 1)h = 0 \quad (2.5)$$

Rješenje tražimo u obliku reda:

$$h(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j$$

Ovaj izraz također deriviramo dva puta te dobivene izraze uvrstimo u (2.5), sređivanjem dobivamo:

$$\sum_{j=0}^{\infty} [(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j] \xi^j = 0$$

Zbog jedinstvenosti razvoja slijedi:

$$(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j = 0$$

Odnosno, dobili smo rekurzivnu relaciju:

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-K}{(j+1)(j+2)} a_j \quad (2.6)$$

Rekurzija (2.6) je ekvivalentna jednadžbi (2.5). Intuitivno je jasno da se rješenja $h(\xi)$ mogu zapisati kao zbroj parne funkcije generirane sa a_0 i neparne funkcije generirane s a_1 . Nije moguće normalizirati sva rješenja dobivena na ovaj način stoga se postavlja restrikcija $K = 2n + 1$ za neki $n \in \mathbb{N}_0$. Odnosno, energija mora biti oblika:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (2.7)$$

Sada rekurzija (2.6) glasi:

$$a_{j+2} = \frac{-2(n-j)}{(j+1)(j+2)} a_j \quad (2.8)$$

Općenito, rješenja $h_n(\xi)$ su polinomi koji sadrže samo parne potencije za n paran i neparne potencije za n neparan. Ti polinomi su zapravo Hermite-ovi polinomi $H_n(\xi)$. Dakle, rješenja Schrodingerove jednadžbe (2.4) su:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (2.9)$$

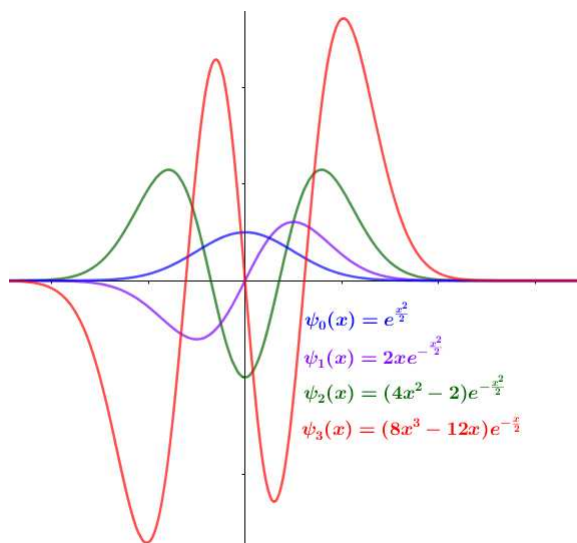
Dana su normalizirana rješenja, postupak normalizacije neće biti proveden jer nije značajan za ovaj rad. Ove valne funkcije se zovu Hermiteove funkcije. Na slici 2.1 je prikazano prvih nekoliko funkcija (nenormaliziranih).

Ovdje je kratko opisan način rješavanja Schrödingerove jednadžbe za kvantni harmonički oscilator, opisano je samo onoliko koliko je nužno, detaljnije se o tome može pročitati u [2].

2.2 3D harmonički oscilator

Kvantni harmonički oscilator se prirodno generalizira na više dimenzija. U slučaju tri dimenzije Hamiltonijan (2.2) glasi:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - \frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 - \frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 z^2 \quad (2.10)$$



Slika 2.1: Nenormalizirane Hermiteove funkcije

Schrödingerova jednačba (2.1) je separabilna po koordinatama te se može riješiti posebno za svaku koordinatu. Analogno slučaju u jednoj dimenziji, za sve tri varijable dobivamo energije oblika (2.7). Dozvoljene energije za 3D harmonički oscilator su samo zbrojevi pojedinačnih energija:

$$E = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2})\hbar\omega$$

Također, prirodno se generaliziraju i valne funkcije za 3D harmonički oscilator kao produkt valnih funkcija za svaku pojedinu varijablu (2.9). Ovdje su dane u nenormaliziranom obliku:

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = H_{n_x}(x)H_{n_y}(y)H_{n_z}(z)e^{-(x^2+y^2+z^2)/2} \quad (2.11)$$

Ovdje n_i za $i = x, y, z$ predstavljaju kvantne brojeve za svaku pojedinu koordinatnu os.

2.3 Bargmannov prostor

U literaturi [11] je dan Bargmannov transformat kojim preslikavamo valne funkcije iz L^2 Hilbertovog prostora u Bargmannov prostor. On je definiran kao:

$$\mathcal{B}[\psi](t) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{t^2+x^2}{2}+xt} \sqrt{2} \psi(x) dx \quad (2.12)$$

Ako uvrstimo Hermiteove funkcije (2.9) (ali bez norme), dobivamo:

$$\mathcal{B}[H_n(x)e^{-x^2/2}](t) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{t^2+x^2}{2}+xt} \sqrt{2} H_n(x) e^{-x^2/2} dx$$

Ovaj integral se može riješiti korištenjem funkcije izvodnice:

$$e^{-t^2+2xt} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(x)$$

Množenjem obje strane sa $e^{-t^2/2+xt} \sqrt{2-x^2}$ te integriranjem dobije se:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{3}{2}t^2+xt(2+\sqrt{2})-x^2} dx = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{t^2+x^2}{2}+xt} \sqrt{2} H_n(x) e^{-x^2/2} dx \quad (2.13)$$

Iz ovoga direktno slijedi $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{3}{2}t^2+xt(2+\sqrt{2})-x^2} dx = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \pi^{1/4} \mathcal{B}[H_n(x)e^{-x^2/2}](t)$. Rješavanjem lijeve strane u (2.13):

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{3}{2}t^2+xt(2+\sqrt{2})-x^2} dx = \sqrt{\pi} e^{\sqrt{2}t^2}$$

Ovo rješenje se razvija u red:

$$\sqrt{\pi} e^{\sqrt{2}t^2} = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (\sqrt{2}t)^n \frac{t^n}{n!}$$

Uspoređivanjem redova s obje strane jednakosti, može se primjetiti da vrijedi $\pi^{1/4} \mathcal{B}[H_n(x)e^{-x^2/2}](t) = \sqrt{\pi} (\sqrt{2}t)^n$. Iz ovoga slijedi:

$$\mathcal{B}[H_n(x)e^{-x^2/2}](t) = \pi^{1/4} (\sqrt{2}t)^n \quad (2.14)$$

U relaciji (2.14) se vidi da Hermiteove funkcije prelaze u potencije kompleksne varijable t u Bargmannovom prostoru. Ako ovo usporedimo sa normaliziranim Hermiteovim valnim funkcijama (2.9), vidimo da će Bargmannov transformator normaliziranih Hermiteovih valnih funkcija biti $\frac{t^n}{\sqrt{n!}}$.

Sada je moguće napraviti sljedeće mapiranje Hermiteovih funkcija za trodimenzionalni harmonički oscilator (2.11) u Bargmannov prostor:

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = H_{n_x}(x) H_{n_y}(y) H_{n_z}(z) e^{-(x^2+y^2+z^2)/2} \xrightarrow{\mathcal{B}} t^{n_x} u^{n_y} v^{n_z} \quad (2.15)$$

Ovo je opisano u [9]. Prikazivanje valnih funkcija preko polinoma u Bargmannovom prostoru nam je korisno zbog dobrog algebarskog svojstva $t^n t^m = t^{n+m}$. Odnosno, množenje valnih funkcija se svodi na zbrajanje kvantnih brojeva.

Uočimo da se u preslikavanju ispustila norma. Naime, norma nema lijepa svojstva pri množenju valnih funkcija što komplicira računanje ($n!m! \neq (n+m)!$). Postupak normalizacije je moguće napraviti naknadno, ukoliko je potrebno. Prije konkretnog računanja obvezno je potrebno normalizirati funkcije. U ovom radu, općenito, norma neće biti uključena u račun.

U Bargmannovom prostoru skalarni produkt računamo preko izraza:

$$\langle f, g \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{C}} \overline{f(z)} g(z) e^{-|z|^2} dz, \quad z \in \mathbb{C}$$

Ovdje je dz Lebesgueova mjera (1.11) u dvije dimenzije. Ako uvrstimo Bargmannove transformate Hermiteovih funkcija dobivamo izraz za skalarni produkt dva polinoma:

$$\langle t^n, t^m \rangle = n! \delta_{nm} \quad (2.16)$$

Funkcija δ_{nm} se zove Kronecker delta funkcija i definirana je na sljedeći način:

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ 1 & n = m \end{cases}$$

Dakle, ako se u polinomima javi iste varijable na istu potenciju, tada je skalarni produkt veći od nule, a ako se javljaju različite potencije skalarni produkt je nula. Može se pokazati da je s ovako definiranim skalarnim produktom Bargmannov prostor zapravo Hilbertov prostor.

Transformacija Hamiltonijana (2.2) u Bargmannov prostor se radi posve analogno transformaciji Hermiteovih funkcija. Najprije treba transformirati operatore položaja i količine gibanja u Bargmannov prostor [5]:

$$x \xrightarrow{\mathcal{B}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(t + \frac{\partial}{\partial t} \right), \quad \frac{\partial}{\partial x} \xrightarrow{\mathcal{B}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-t + \frac{\partial}{\partial t} \right)$$

Slično transformiramo i preostale koordinate. Hamiltonijan za tri dimenzije (2.10) onda postaje:

$$\hat{H} = \left(t \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial u} + v \frac{\partial}{\partial v} + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega \quad (2.17)$$

Njegove svojstvene funkcije (funkcije koje zadovoljavaju jednadžbu $\hat{H}\psi = E\psi$) su čiste potencije. Ovo smo mogli i očekivati jer su Bargmannovi transformati Hermiteovih funkcija upravo čiste potencije.

2.4 Sustav dva identična fermiona

Sustavi identičnih čestica su detaljno opisani u [2] i [7]. Pretpostavimo da je valna funkcija stanja prve čestice $\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1)$, a druge čestice $\psi_{n_2}(\mathbf{r}_2)$. Ovdje su \mathbf{r}_1 i \mathbf{r}_2 vektori položaja čestice, a n_1 i n_2 kvantni brojevi. U tom slučaju bi valna funkcija sustava dvije čestice bila jednostavno samo njihov produkt, odnosno:

$$\psi_{n_1, n_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2)$$

Ovdje je A norma. Međutim, ovo je uz pretpostavku da možemo razlikovati čestice. A što kada su čestice nerazpoznatljivo identične? Ne možemo tvrditi da je jedna u stanju n_1 , a druga u stanju n_2 jer ih ne možemo razlikovati na apsolutno nikakav način. Zato koristimo valne funkcije u kojima je nebitno koja je čestica u kojem stanju:

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A[\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) \pm \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_1}(\mathbf{r}_2)]$$

Iz ovoga možemo zaključiti da postoje dvije vrste identičnih čestica, bozoni i fermioni. Za bozone se koristi $+$ u valnoj funkciji, a za fermione $-$.

U ovom diplomskom radu se promatra sustav dva identična fermiona. Valna funkcija sustava dva identična fermiona je, dakle,

$$\psi_{n_1, n_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A[\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) - \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_1}(\mathbf{r}_2)] \quad (2.18)$$

Očito je, za $n_1 = n_2$, $\psi_{n_1, n_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0$. Iz ovoga direktno slijedi da dva identična fermiona ne mogu biti u istom kvantnom stanju istovremeno. Ovo je vrlo poznati rezultat koji se zove Paulijev princip isključenja.

Funkcija (2.18) je antisimetrična stoga ju je moguće zapisati u obliku determinante. Takve determinante se zovu Slaterove determinante.

$$\psi_{n_1, n_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) & \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2) \\ \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1) & \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) \end{vmatrix} \quad (2.19)$$

Općenito su valne funkcije identičnih fermiona antisimetrične dok su valne funkcije identičnih bozona simetrične. Više o tome je moguće pročitati u [7]. Iz ovoga slijedi da valne funkcije identičnih fermiona možemo prikazivati kao Slaterove determinante.

Do istog rezultata je moguće doći i na elegantniji način. Definiramo operator permutacije položaja čestica \hat{P} na sljedeći način:

$$\hat{P}\psi_{n_1, n_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{n_1, n_2}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$$

Očito, svojstvene vrijednosti ovog operatora su ± 1 . Iz ovoga slijedi da možemo dobiti valne funkcije sa simetričnom svojstvenom vrijednosti $+1$ (bozoni) ili sa antisimetričnom svojstvenom vrijednosti -1 (fermioni).

Valne funkcije dva identična fermiona (2.18), odnosno (2.19) u potencijalu 3D harmonijskog oscilatora, prelaze u potencije varijabli t_1, t_2, u_1, u_2, v_1 i v_2 u Bargmannovom prostoru korištenjem mapiranja (2.15). Dakle, mogu se zapisati, analogno kao (2.19), na sljedeći način:

$$\psi_{(n_{11}, n_{12}, n_{13}), (n_{21}, n_{22}, n_{23})}((t_1, u_1, v_1), (t_2, u_2, v_2)) = A \begin{vmatrix} t_1^{n_{11}} u_1^{n_{12}} v_1^{n_{13}} & t_2^{n_{11}} u_2^{n_{12}} v_2^{n_{13}} \\ t_1^{n_{21}} u_1^{n_{22}} v_1^{n_{23}} & t_2^{n_{21}} u_2^{n_{22}} v_2^{n_{23}} \end{vmatrix} \quad (2.20)$$

U slučaju dvije čestice, Hamiltonijan (2.17) će postati:

$$\hat{H} = \left(t_1 \frac{\partial}{\partial t_1} + u_1 \frac{\partial}{\partial u_1} + v_1 \frac{\partial}{\partial v_1} + t_2 \frac{\partial}{\partial t_2} + u_2 \frac{\partial}{\partial u_2} + v_2 \frac{\partial}{\partial v_2} + 3 \right) h\omega \quad (2.21)$$

Poglavlje 3

Sustav dva identična fermiona u potencijalu trodimenzionalnog harmoničkog oscilatora

Hilbertov prostor mnoštva čestica odnosno Bargmannov prostor je funkcionalni vektorski prostor sa prirodnom strukturom slobodnog modula. Ovaj slobodni modul je konačno generiran, a antisimetrične funkcije koje su njegovi generatori se zovu oblici.

U ovom poglavlju najprije konstruiramo slobodni modul kojeg tvori sustav dva identična fermiona u potencijalu trodimenzionalnog harmoničkog oscilatora. Nakon toga razmatramo Hilbertov red kojeg koristimo za brojanje svih mogućih kvantnih stanja u Hilbertovom prostoru te opisujemo valne funkcije kao polinome u Bargmannovom prostoru. Naposljetku govorimo o stanjima u kojima se centar mase giba (CM) i o stanjima u kojima se ne giba, odnosno stanja relativnog gibanja (RM).

3.1 Slobodni modul antisimetričnih polinoma nad prstenom simetričnih polinoma

U matematičkom uvodu smo definirali prsten polinoma i slobodni modul. Sada ćemo ovu teoriju primijeniti na sustav dva identična fermiona u potencijalu 3D harmoničkog oscilatora. Naime, već spomenuti transformati Hermiteovih valnih funkcija tvore slobodni modul antisimetričnih polinoma nad prstenom simetričnih polinoma. Najprije želimo nešto reći o prstenu simetričnih polinoma (o tome je moguće detaljnije pročitati u [8]).

Definicija Neka je $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ prsten polinoma u n varijabli nad poljem kompleksnih brojeva \mathbb{C} . Za polinom $f \in \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ kažemo da je simetričan ako je invarijantan na sve permutacije (iz grupe S_n) varijabli x_1, \dots, x_n .

Vratimo se na Bargmannove transformate Hermiteovih valnih funkcija (2.14). Za dvije čestice u jednoj dimenziji bismo dobili polinome u potencijama varijabli t_1 i t_2 . Ove varijable možemo

shvatiti kao nultočke polinoma u varijabli t . Odnosno,

$$(t - t_1)(t - t_2) = 0 \iff t^2 - (t_1 + t_2)t + t_1t_2 = 0 \quad (3.1)$$

Koeficijenti u ovom polinomu su elementarne simetrične funkcije. (One su vezane za korijene polinoma Viète-ovim formulama.)

$$e_1 = t_1 + t_2, \quad e_2 = t_1t_2.$$

Za tri dimenzije i dvije čestice je onda moguće konstruirati točno 6 elementarnih simetričnih funkcija.

$$\begin{aligned} e_1(t) &= t_1 + t_2, & e_2(t) &= t_1t_2 \\ e_1(u) &= u_1 + u_2, & e_2(u) &= u_1u_2 \\ e_1(v) &= v_1 + v_2, & e_2(v) &= v_1v_2 \end{aligned} \quad (3.2)$$

Ove funkcije ćemo zvati Eulerovi bozoni. Oni će predstavljati pobuđenja u ovome radu. Pobuđenja e_1 predstavljaju pobuđenje tekućeg stanja, a pobuđenja e_2 pobuđenja plinovitog stanja. Primijetimo, polinomi e_1 su polinomi prvog stupnja, a polinomi e_2 su polinomi drugog stupnja. Eulerovi bozoni su detaljno opisani u [11].

Međusobnim zbrajanjem i množenjem Eulerovih bozona (3.2) uvijek dobivamo simetrične polinome. Množenje i zbrajanje polinoma je asocijativno, postoji neutral u zbrajanju (tzv. nulpolinom gdje su svi koeficijenti nula), a i svaki polinom ima inverz pri zbrajanju koji je također simetrična funkcija (npr. inverz od $t_1 + t_2$ je $-t_1 - t_2$, a ovo je simetrična funkcija). Dakle, Eulerovi bozoni čine bazu za prsten simetričnih polinoma u jednoj dimenziji te se svaki simetrični polinom može prikazati kao njihova linearna kombinacija. O tome govori sljedeći teorem iz [8]:

Teorem 3.1.1. *Svaki simetrični polinom $f \in \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ možemo zapisati jedinstveno kao polinom u elementarnim simetričnim polinomima.*

Elementarne simetrične funkcije su jedna mogućnost za odabir baze prstena simetričnih polinoma. Još nekoliko različitih baza je dano u [8]. Ovdje ćemo još raspraviti Schurove polinome. Može se pokazati da oni, također, čine bazu za prsten simetričnih polinoma. Schurovi polinomi s_λ su definirani kao omjer dvije determinante. Prva je Vandermondova determinanta [10]:

$$\Delta(t_1, \dots, t_N) = \begin{vmatrix} t_1^{N-1} & \dots & t_N^{N-1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ t_1 & \dots & t_N \\ 1 & \dots & 1 \end{vmatrix} = \prod_{1 \leq i < j \leq N} (t_i - t_j) \quad (3.3)$$

Općenito, Slaterove determinante za osnovna stanja od N čestica su Vandermondove determinante (3.3). Drugu determinantu definiramo za particiju $\lambda = (\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_N)$ broja $d \in \mathbb{N}$ sa najviše N djelova [8]:

$$a_\lambda(t_1, \dots, t_N) = \begin{vmatrix} t_1^{\lambda_1+N-1} & \dots & t_N^{\lambda_1+N-1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ t_1^{\lambda_N} & \dots & t_N^{\lambda_N} \end{vmatrix} \quad (3.4)$$

Schurov polinom je:

$$s_\lambda = \frac{a_\lambda(t_1, \dots, t_N)}{\Delta(t_1, \dots, t_N)} \quad (3.5)$$

Teorem 3.1.2. *Skup Schurovih polinoma s_p gdje je $p = p_1 + \dots + p_N$ particija broja $d \in \mathbb{N}$ sa najviše n djelova tvori bazu za elementarne simetrične polinome stupnja d .*

Na primjer, za simetrične polinome prvog stupnja ($d = 1$) u dvije varijable ($N = 2$), dobivamo Schurov polinom:

$$s_{1=1+0} = \frac{t_1^2 - t_2^2}{t_1 - t_2} = \frac{(t_1 - t_2)(t_1 + t_2)}{t_1 - t_2} = t_1 + t_2$$

Ovaj Schurov polinom odmah prepoznamo kao Eulerov bozon iz (3.2). Kako je jedina moguća particija $1 = 1 + 0$, on razapinje sve simetrične polinome 1. stupnja za $N = 2$. Među Schurovim polinomima drugog stupnja za $N = 2$ pronalazimo i $e_2(t) = t_1 t_2$. Polinomi drugog stupnja su razapeti sa dva Schurova polinoma polinoma (jer postoje dvije N particije broja 2).

Sustav dva identična fermiona u potencijalu 3D harmoničkog oscilatora u Bargmannovom prostoru interpretiramo kao slobodni modul antisimetričnih polinoma nad prstenom simetričnih polinoma koje tvore Eulerovi bozoni. Bazu u ovom slobodnom modulu razapinju antisimetrične funkcije koje zovemo oblici, oni su dani u literaturi [11]:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= t_1 - t_2, & \psi_2 &= u_1 - u_2 \\ \psi_3 &= v_1 - v_2, & \psi_4 &= \psi_1 \psi_2 \psi_3 \end{aligned} \quad (3.6)$$

Produkt oblika sa Eulerovim bozonima i njihovim linearnim kombinacijama uvijek daje antisimetrične funkcije. Dakle, ovaj slobodni modul je doista zatvoren. Kao što je gore definirano, s ovom bazom, sve antisimetrične funkcije ovog slobodnog modula mogu biti zapisane kao linearna kombinacija oblika pomnoženim sa simetričnim funkcijama iz prstena kojeg generiraju Eulerovi bozoni. Odnosno,

$$\psi = \sum_{i=1}^4 \Phi_i \psi_i \quad (3.7)$$

Ovdje Φ_i predstavljaju simetrične polinome (iz prstena kojeg generiraju Eulerovi bozoni), a ψ_i oblike odnosno antisimetrične polinome. Oblici su međusobno okomiti, a iz ovog vidimo da svaku funkciju u Bargmannovom prostoru možemo zapisati kao linearnu kombinaciju oblika stoga opet možemo zaključiti da je Bargmannov prostor doista Hilbertov prostor.

3.2 Hilbertov red

Iz [10] je poznato da postoji Hilbertov red koji prebrojava sva kvantna stanja u Hilbertovom prostoru. Taj red je oblika:

$$Z_d(N, q) = P_d(N, q) \prod_{k=1}^N \frac{1}{1 - q^k}$$

Ovdje je $P_d(N, q)$ polinom koji zadovoljava Svrtanovu rekurziju ([10]):

$$NP_d(N, q) = \sum_{k=1}^N (-1)^{k+1} [C_k^N(q)]^d P_d(N-k, q) \quad (3.8)$$

Ovdje je:

$$C_k^N(q) = \frac{(1-q^N) \cdots (1-q^{N-k+1})}{1-q^k}$$

Uvrštavanjem $q = 1$ u (3.8) dobivamo $P_d(N, 1) = N!^{d-1}$, a ovo je dimenzija slobodnog modula odnosno broj oblika koji ga generiraju. Za $N = 2$ i $d = 3$ imamo $P_3(2, 1) = 2!^{3-1} = 4$. Time smo potvrdili da, za $N = 2$ i $d = 3$, doista postoji točno četiri generatora odnosno da bazu čine oblici (3.6).

Rješavanjem rekurzije (3.8) za $d = 3$ i $N = 2$ se dobiva $P_3(2, q) = 3q + q^3$. Dakle, za $d = 3$ i $N = 2$, Hilbertov red glasi:

$$Z_3(2, q) = (3q + q^3) \left[\left(\frac{1}{1-q} \right) \left(\frac{1}{1-q^2} \right) \right]^3 = 3q + 9q^2 + 28q^3 + \cdots \quad (3.9)$$

Polinom $P_3(2, q) = (3q + q^3)$ u (3.9) predstavlja oblike. Imamo tri oblika stupnja jedan (ψ_1, ψ_2 i ψ_3) pa stoga koeficijent 3 ispred q i jedan oblik stupnja tri (ψ_4) pa stoga koeficijent 1 ispred q^3 . Primijetimo, ψ_4 je neuobičajen, on je umnožak preostala tri oblika. Kažemo da je on pseudoskalar jer zapravo predstavlja orijentirani volumen $(x_1 - x_2)(y_1 - y_2)(z_1 - z_2)$ u Bargmannovom prostoru.

S druge strane, red $\left[\left(\frac{1}{1-q} \right) \left(\frac{1}{1-q^2} \right) \right]^3$ predstavlja Eulerove bozone (3.2). Ovdje uočavamo da je to iteracija jednostavnih simetričnih funkcija po smjerovima. Kako je sve na treću potenciju zapravo ponavljamo jednostavne simetrične funkcije za dvije čestice u jednoj dimenziji tri puta (jednom za svaki smjer t, u i v).

3.3 Valne funkcije

Algoritam kojim se traže oblici je detaljno opisan u [11]. Najprije se vidi da Hilbertov red (3.9) ukazuje da je osnovno stanje trostruko degenerirano (koeficijent ispred q u (3.9) je tri), odnosno, ono je razapeto sa prva 3 oblika. Prije navedena notacija nije baš praktična, stoga uvodimo sljedeći način zapisivanja Hermiteovih funkcija dva identična fermiona u 3D harmoničkom oscilatoru (2.20):

$$\psi_{(n_{11}, n_{12}, n_{13}), (n_{21}, n_{22}, n_{23})}(t_1, u_1, v_1), (t_2, u_2, v_2) = [(n_{11}, n_{12}, n_{13}), (n_{21}, n_{22}, n_{23})]_{\Phi}$$

U ovoj notaciji Slaterove determinante osnovnog stanja su:

$$[(1, 0, 0), (0, 0, 0)]_{\Phi} = \begin{vmatrix} t_1 & t_2 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = t_1 - t_2$$

$$[(0, 1, 0), (0, 0, 0)]_{\Phi} = \begin{vmatrix} u_1 & u_2 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = u_1 - u_2$$

$$[(0, 0, 1), (0, 0, 0)]_{\Phi} = \begin{vmatrix} v_1 & v_2 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = v_1 - v_2$$

Valne funkcije prvog pobuđenog stanja se dobivaju množenjem oblika ψ_1, ψ_2 i ψ_3 s Eulerovim bozonima $e_1(t), e_1(u)$ i $e_1(v)$. Stanja dobivena na ovaj način zovemo trivijalna stanja. Postoji 9 mogućnosti kao što i predviđa Hilbertov red (3.9) (koeficijent 9 ispred q^2). Sva stanja na prvoj pobuđenoj razini su: $e_1(t)\psi_1, e_1(u)\psi_1, e_1(v)\psi_1, e_1(t)\psi_2, e_1(u)\psi_2, e_1(v)\psi_2, e_1(t)\psi_3, e_1(u)\psi_3, e_1(v)\psi_3$. U prvom pobuđenom stanju nema novih oblika. Dakle, ovih 9 valnih funkcija razapinje cijeli potprostor 1. pobuđenog stanja.

Drugo pobuđeno stanje je razapeto sa 28 stanja (koeficijent 28 ispred q^3). Trivijalna stanja u drugoj pobuđenoj razini se dobivaju množenjem oblika ψ_1, ψ_2 i ψ_3 s Eulerovim bozonima $e_1(t)^2, e_1(u)^2, e_1(v)^2, e_2(t), e_2(u), e_2(v), e_1(t)e_1(u), e_1(t)e_1(v)$ i $e_1(u)e_1(v)$. Ukupno postoji $3 \times 9 = 27$ ovakvih stanja, 28. stanje koje predviđa Hilbertov red (3.9) je zapravo 4. oblik ψ_4 . On je okomit na svih 27 trivijalnih stanja. Može se prikazati kao suma četiri Slaterove determinante.

$$\psi_4 = \psi_1\psi_2\psi_3 = [(1, 1, 1), (0, 0, 0)]_{\Phi} - [(1, 1, 0), (0, 0, 1)]_{\Phi} - [(1, 0, 1), (0, 1, 0)]_{\Phi} - [(0, 1, 1), (1, 0, 0)]_{\Phi}$$

Stanja relativnog gibanja

Uklanjanjem centra mase (CM) iz problema dva tijela ga reduciramo na problem jednog dijela. [5] Ako bismo htjeli razdvojiti stanja gibanja centra mase (CM) od stanja relativnog gibanja (RM) na 2. pobuđenoj razini, morati ćemo promijeniti bazu Eulerovih bozona (3.2).

Vratimo se na polinom (3.1), njegova diskriminanta je:

$$D = (t_1 + t_2)^2 - 4t_1t_2 = e_1^2 - 4e_2 = (t_1 - t_2)^2 = \psi_1^2. \quad (3.10)$$

Ovo je zapravo kvadrat Slaterove determinante za osnovno stanje navedene ranije:

$$\Delta(t_1, t_2) = \begin{vmatrix} t_1 & t_2 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = t_1 - t_2 = \psi_1$$

Iako je oblik $\psi_1 = t_1 - t_2$ antisimetričan polinom, diskriminanta (3.10) je simetričan polinom jer $\psi_1^2 = (t_1 - t_2)^2$ pri permutiranju ne mijenja predznak. Dakle, ova diskriminanta se nalazi u prstenu simetričnih polinoma te ju možemo koristiti kao polinom pobuđenja. Ovo možemo i dokazati jer se diskriminanta može prikazati kao linearna kombinacija Eulerovih bozona. Odnosno,

$$\Delta^2 = e_1^2 - 4e_2 \iff e_2 = \frac{e_1^2 - \Delta^2}{4}$$

Ovakva pobuđenja predstavljaju kvantna stanja u kojima se centar mase sustava ne giba i takva stanja zovemo stanja relativnog gibanja. Stoga ćemo u ovome radu koristiti sljedeću bazu za polinome pobuđenja:

$$e_1(i) = i_1 + i_2, \quad \Delta^2(i) = (i_1 - i_2)^2, \quad i \in \{t, u, v\} \quad (3.11)$$

Sada je prvo bozonsko pobuđenje e_1 odgovorno za valne funkcije gibanja centra mase (CM) dok je drugo Δ^2 odgovorno za relativno gibanje (RM). Primijetimo, Δ^2 je polinom drugog stupnja, odnosno na prvoj pobuđenoj razini neće biti valnih funkcija relativnog gibanja.

Drugo pobuđeno stanje možemo podijeliti na dva potprostora, potprostor gibanja centra mase (CM) i potprostor relativnog gibanja (RM). Potprostor gibanja centra mase (CM) je razapet sa sljedećih 18 stanja: $e_1^2(t)\psi_1, e_1^2(t)\psi_2, e_1^2(t)\psi_3, e_1^2(u)\psi_1, e_1^2(u)\psi_2, e_1^2(u)\psi_3, e_1^2(v)\psi_1, e_1^2(v)\psi_2, e_1^2(v)\psi_3, e_1(t)e_1(u)\psi_1, e_1(t)e_1(u)\psi_2, e_1(t)e_1(u)\psi_3, e_1(t)e_1(v)\psi_1, e_1(t)e_1(v)\psi_2, e_1(t)e_1(v)\psi_3, e_1(u)e_1(v)\psi_1, e_1(u)e_1(v)\psi_2$ i $e_1(u)e_1(v)\psi_3$.

S druge strane, potprostor relativnog gibanja (RM) je razapet sa sljedećih 10 stanja: $\psi_1^3, \psi_1^2\psi_2, \psi_1^2\psi_3, \psi_2^2\psi_1, \psi_2^3, \psi_2^2\psi_3, \psi_3^2\psi_1, \psi_3^2\psi_2, \psi_3^3$ i $\psi_1\psi_2\psi_3$. Primijetimo, 4. oblik također spada u RM.

Poglavlje 4

Redukcija baze s obzirom na grupu permutacija S_3

Glavni zadatak ovog diplomskog rada je reducirati vektore stanja koji razapinju vektorske prostore stanja u ireducibilne reprezentacije grupe permutacija S_3 te ih klasificirati koristeći Youngove dijagrame. Cilj je složiti vektore u ireducibilne reprezentacije. Ovo najprije radimo za osnovno stanje, zatim za 1. pobuđeno stanje te za 2. pobuđeno stanje. Pokušati ćemo uočiti određenu pravilnost, ali dalje od 2. pobuđenog stanja nećemo ići.

U ovom poglavlju najprije razmatamo što se događa sa stanjima pri permutiranju koordinatnih osi t , u i v . Dalje provodimo već opisani postupak reduciranja. Najprije pronalazimo Reynoldsove operatore koji će činiti CSCO. Zatim, pronalaskom svojstvenih vektora dobivamo ireducibilne reprezentacije grupe S_3 . Želimo dobiti i sve matrice elemente za sve ireducibilne reprezentacije, ovo ćemo postići korištenjem (1.4). Na ovaj način ćemo zapravo dobiti matrice permutacija u novoj bazi. Matrice će biti u blok-dijagonalnoj formi te ćemo iz njih moći iščitati sve pripadne matrice elemente za svaku ireducibilnu reprezentaciju.

Četvrti oblik $\psi_4 = \psi_1\psi_2\psi_3$, koji je invarijantan na permutacije, se neće promijeniti te će ostati u istoj formi kao i u (3.6). On je pseudoskalar te predstavlja orijentirani volumen u t , u , v koordinatnom sustavu, a poznato je da je volumen invarijantan na permutiranje koordinatnih osi.

4.1 Permutacija koordinatnih osi

Najprije želimo vidjeti što će se dogoditi kada permutiramo koordinatne osi t , u i v . Uzmimo za primjer jednu od matrica iz prirodne reprezentacije S_3 (1.3). Neka je to npr. matrica $\hat{D}(tuv)$. Primjenom ove matrice na osnovno stanje $\psi = (\psi_1, \psi_2, \psi_3)$ dobivamo:

$$\hat{D}(tuv)\psi = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_1 \end{bmatrix}$$

Ono što se zapravo ovdje dogodilo je da je os t preimenovana u os u , a os u u os v te os v u os t u Bargmannovom prostoru. Ovo je zapravo isto kao da smo permutirali osi x , y i z u sustavu iz kojega

smo počeli s izvodom 3D harmoničkog oscilatora (odnosno Kartezijevom koordinatnom sustavu).

Množenje polinoma je komutativno stoga se pri ovakvim permutacijama 4. oblik ne mijenja (on je samo produkt prva 3 oblika). Iz ovoga se odmah može zaključiti da je 4. oblik invarijantan na permutacije.

4.2 Osnovno stanje

Želimo novu bazu koja će razapinjati ireducibilne reprezentacije grupe S_3 . Odmah možemo uočiti da će zbroj $\psi_1 + \psi_2 + \psi_3$ biti invarijantan na svih 6 permutacija (1.2). Kako je navedeno u tablici karaktera, ovaj vektor će činiti jednodimenzionalan potprostor trivijalne ireducibilne reprezentacije A_1 . Odmah bismo mogli "pogoditi" rješenje traženjem dva okomita vektora na ovaj vektor. Međutim, želimo primijeniti algoritam opisan u matematičkom uvodu.

Najprije treba dogovoriti notaciju. Neka je n broj pobuđenja. Odnosno $n = 0$ za osnovno stanje, $n = 1$ za 1. pobuđeno stanje, $n = 2$ za 2. pobuđeno stanje, i.t.d. Ovo će biti prvi kvantni broj u označavanju dobivenih funkcija.

Osnovno stanje je trodimenzionalan potprostor, stoga su sve matrice permutacije zapravo operatori (1.3). Kao što je već navedeno, ovi ne komutiraju međusobno, stoga nisu dobar izbor za CSCO. Uzimamo Reynoldsov operator (1.8), odnosno operator alternirajuće podgrupe. Kao što je vidljivo na slici 1.3, grupa S_3 ima 3 S_2 podgrupe, a to su $S_2(tu)$, $S_2(tv)$ i $S_2(uv)$. Ove 3 grupe su međusobno izomorfne te je svejedno koju ćemo uzeti u CSCO. Uzimamo Reynoldsov operator grupe $S_2(tu)$ iz (1.9). Kako $S_2 \subseteq S_3$ čini kanonski lanac podgrupa, $(\hat{R}_{\mathcal{A}_3}, \hat{R}_{S_2(tu)})$ čini potpun skup komutirajućih operatora, CSCOII. Ovi operatori komutiraju i sa Hamiltonijanom (2.21) stoga su njihove svojstvene vrijednosti dobri kvantni brojevi. Neka je λ svojstvena vrijednost od $\hat{R}_{\mathcal{A}_3}$, a m svojstvena vrijednost od $\hat{R}_{S_2(tu)}$. Dakle, (n, λ, m) su dobri kvantni brojevi. Valne funkcije ćemo označavati sa $\psi_{(n,\lambda,m)}$. Sada možemo napisati svojstvene jednadžbe.

$$\hat{R}_{\mathcal{A}_3}\psi_{(n,\lambda,m)} = \lambda\psi_{(n,\lambda,m)}, \quad \hat{R}_{S_2(tu)}\psi_{(n,\lambda,m)} = m\psi_{(n,\lambda,m)}$$

Svojstvene vrijednosti ovih operatora dobivamo rješavanjem sljedećih jednadžbi:

$$\det(\hat{R}_{\mathcal{A}_3} - \lambda\hat{I}) = 0, \quad \det(\hat{R}_{S_2(tu)} - m\hat{I}) = 0$$

Iz $\det(\hat{R}_{\mathcal{A}_3} - \lambda\hat{I}) = 0$ dobivamo polinom $\lambda^2 - \lambda^3 = \lambda^2(1 - \lambda) = 0$. Ovaj polinom ima dvije nultočke iz čega slijedi da su rješenja ove jednadžbe $\lambda = 0$ (kratnosti 2) i $\lambda = 1$ (kratnosti 1). Dakle, svojstvene vrijednosti operatora $\hat{R}_{\mathcal{A}_3}$ su $\lambda = \{0, 1\}$. Kako je kratnost svojstvene vrijednosti $\lambda = 0$ dva, ova svojstvena vrijednost razapinje dvodimenzionalni potprostor. S druge strane $\lambda = 1$ razapinje jednodimenzionalni potprostor.

Slično, rješavanjem $\det(\hat{R}_{S_2(tu)} - m\hat{I}) = 0$, dobivamo svojstvene vrijednosti $m = \{0, 1\}$ (0 je kratnosti 1, a 1 je kratnosti 2) za operator $\hat{R}_{S_2(tu)}$. Simultanim traženjem svojstvenih vektora za oba operatora ćemo dobiti tri vektora koji razapinju osnovno stanje. Neka su vektori oblika:

$$\psi_{(n,\lambda,m)} = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 + a_3\psi_3.$$

Iz:

$$(\hat{R}_{\mathcal{A}_3} - \lambda \hat{I})\psi_{(n,\lambda,m)} = \begin{bmatrix} 1/3 - \lambda & 1/3 & 1/3 \\ 1/3 & 1/3 - \lambda & 1/3 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 - \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = 0,$$

za svojstvenu vrijednost $\lambda = 1$, dobivamo sustav 3 linearne jednačbe s 3 nepoznanice:

$$\begin{cases} -\frac{2}{3}a_1 + \frac{1}{3}a_2 + \frac{1}{3}a_3 = 0 \\ \frac{1}{3}a_1 - \frac{2}{3}a_2 + \frac{1}{3}a_3 = 0 \\ \frac{1}{3}a_1 + \frac{1}{3}a_2 - \frac{2}{3}a_3 = 0 \end{cases} \iff a_1 = a_2 = a_3 = t_1, \quad t_1 \in \mathbb{Z}$$

Za bilo koji odabir parametra $t_1 \in \mathbb{Z}$ dobivamo ekvivalentne vektore jer se konstanta može izlučiti stoga bez smanjenja općenitosti možemo uzeti $t_1 = 1$, a iz ovog slijedi prvi vektor osnovnog stanja u novoj bazi:

$$\psi_{(0,1,1)} = \psi_1 + \psi_2 + \psi_3 = \left| \begin{array}{|c|c|c|} \hline t & u & v \\ \hline \end{array} \right\rangle$$

Ovaj vektor razapinje trivijalnu A_1 ireducibilnu reprezentaciju grupe S_3 , on je svojstveni vektor i za operator $\hat{R}_{S_2(tu)}$ sa svojstvenom vrijednosti $m = 1$. To je onaj vektor kojeg smo i prepoznali kao permutacionu invarijantu na samom početku ovog poglavlja. Za njega koristimo Youngov dijagram potpuno invarijantan na permutacije.

Za $\lambda = 0$ dobivamo jednačbu $a_1 + a_2 + a_3 = 0$. Dva svojstvena vektora koja trebamo dobiti ne možemo parametrizirati samo s jednim parametrom stoga promatramo i:

$$(\hat{R}_{S_2(tu)} - m \hat{I})\psi_{(n,\lambda,m)} = \begin{bmatrix} 1/2 - m & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 1/2 - m & 0 \\ 0 & 0 & 1 - m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = 0,$$

Za $m = 1$ dobivamo jednačbu $a_1 = a_2$. Zajedno s $a_1 + a_2 + a_3 = 0$, za $\lambda = 0$ dobivamo:

$$\begin{cases} a_1 + a_2 + a_3 = 0 \\ a_1 = a_2 \end{cases} \iff \begin{cases} a_1 = a_2 = t_2 \\ a_3 = -2t_2 \end{cases} \quad t_2 \in \mathbb{Z}$$

Opet možemo uzeti $t_2 = 1$, pa dobivamo drugi svojstveni vektor:

$$\psi_{(0,0,1)} = \psi_1 + \psi_2 - 2\psi_3 = \left| \begin{array}{|c|c|} \hline t & u \\ \hline v & \\ \hline \end{array} \right\rangle$$

Ovdje koristimo dijagram mješovite simetrije koji je invarijantan na permutaciju (tu) .

Slično, razmatranjem $\lambda = 0$ i $m = 0$ dobivamo:

$$\begin{cases} a_1 + a_2 + a_3 = 0 \\ a_1 = -a_2 \\ a_3 = 0 \end{cases} \iff \begin{cases} a_1 = t_3 \\ a_2 = -t_3 \\ a_3 = 0 \end{cases} \quad t_3 \in \mathbb{Z}$$

Za, $t_3 = 1$ dobivamo još jedan svojstveni vektor:

$$\psi_{(0,0,0)} = \psi_1 - \psi_2 = \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline t & v \\ \hline u & \\ \hline \end{array} \right\rangle$$

Ovo je nova baza u kojoj vektori stanja razapinju ireducibilne reprezentacije grupe S_3 . Stanje $\psi_{(0,1,1)}$ razapinje jednodimenzionalni potprostor trivijalne A_1 reprezentacije te ga zato označavamo simetričnim Youngovim dijagramom, a stanja $\psi_{(0,0,1)}$ i $\psi_{(0,0,0)}$ dvodimenzionalni potprostor standardne E reprezentacije. $\psi_{(0,0,1)}$ je označen s Youngovim dijagramom mješovite simetrije koji je invarijantan na permutaciju (tu) , a $\psi_{(0,0,0)}$ njegovim konjugatom koji je antisimetričan s obzirom na permutaciju (tu) .

Da smo dosita dobili ireducibilne reprezentacije ćemo se uvjeriti pronalaskom transformacije sličnosti kao u (1.4). Vektori se transformiraju iz stare baze na sljedeći način:

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_1 - \psi_2 \\ \psi_1 + \psi_2 - 2\psi_3 \\ \psi_1 + \psi_2 + \psi_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_{(0,0,0)} \\ \psi_{(0,0,1)} \\ \psi_{(0,1,1)} \end{bmatrix}$$

Iz ovoga dobivamo matricu transformacije koordinatnog sustava, odnosno matricu transformacije sličnosti:

$$T = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

Primjenom temeljnog znanja linearne algebre dobivamo inverznu matricu:

$$T^{-1} = \begin{bmatrix} 1/2 & 1/6 & 1/3 \\ -1/2 & 1/6 & 1/3 \\ 0 & -1/3 & 1/3 \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

Sada možemo uzeti (4.1), (4.2) i matricu $\hat{D}(tuv)$ iz (1.3) te ih uvrstiti u (1.4). Na taj način dobivamo matricu permutacije (tuv) u novoj bazi:

$$\hat{D}(tuv)_{os} = T\hat{D}(tuv)T^{-1} = \begin{bmatrix} -1/2 & 1/2 & 0 \\ -3/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

Iz ovoga vidimo da smo reducirali vektore na dvije reprezentacije, od kojih je jedna trivijalna $\psi_{(0,1,1)} = \psi_1 + \psi_2 + \psi_3$ sa pripadnim matičnim elementom $A_1(tuv) = 1$, dok je druga standardna $\{\psi_{(0,0,0)} = \psi_1 - \psi_2, \psi_{(0,0,1)} = \psi_1 + \psi_2 - 2\psi_3\}$ sa pripadnim matičnim elementom:

$$E(tuv) = \begin{bmatrix} -1/2 & 1/2 \\ -3/2 & -1/2 \end{bmatrix}$$

Odmah se vidi da tragovi matrica odgovaraju tablici karaktera iz matematičkog uvoda. Kao što je već prije navedeno, osim (tuv) , potrebna nam je i permutacija (tu) da bismo dobili cijelu grupu.

Ponavljanjem postupka, za $\hat{D}(tu)$, dobivamo:

$$\hat{D}(tu)_{os} = T\hat{D}(tu)T^{-1} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

Sada kada imamo ove dvije matrice, jednostavno, njihovim međusobnim množenjem dobivamo sve preostale matrice (tablica množenja iz matematičkog uvoda):

$$\begin{aligned} \hat{D}(e)_{os} &= \hat{D}(tu)_{os}\hat{D}(tu)_{os} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \hat{D}(uv)_{os} = \hat{D}(tuv)_{os}\hat{D}(tu)_{os} = \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 \\ 3/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ \hat{D}(tv)_{os} &= \hat{D}(tuv)_{os}\hat{D}(uv)_{os} = \begin{bmatrix} 1/2 & -1/2 & 0 \\ -3/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \hat{D}(tvu)_{os} = \hat{D}(tu)_{os}\hat{D}(uv)_{os} = \begin{bmatrix} -1/2 & -1/2 & 0 \\ 3/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Imamo 2 vektora koja razapinju standardnu reprezentaciju i jedan koji razapinje trivijalnu reprezentaciju. Odnosno, trodimenzionalni potprostor smo rastavili na jedan dvodimenzionalni i jedan jednodimenzionalni potprostor. Ukupno stanja:

$$3 = 2 + 1$$

4.3 1. pobuđeno stanje

Kao što je već navedeno, prvo pobuđeno stanje je razapeto s 9 mogućih stanja: $e_1(t)\psi_1$, $e_1(t)\psi_2$, $e_1(t)\psi_3$, $e_1(u)\psi_1$, $e_1(u)\psi_2$, $e_1(u)\psi_3$, $e_1(v)\psi_1$, $e_1(v)\psi_2$ i $e_1(v)\psi_3$. Želimo napraviti istu stvar kao s osnovnim stanjem te raščlaniti ovo stanje na ireducibilne reprezentacije grupe S_3 .

Za prvo pobuđeno stanje će biti $n = 1$. Uzmimo $(\hat{R}_{\mathcal{A}_3}, \hat{R}_{S_2(tu)})$, kao za osnovno stanje, za CSCO. Kako je 1. pobuđeno stanje potprostor dimenzije 9, ne možemo koristiti operatore (1.3) već moramo pronaći i definirati nove matrice. Identiteta $\hat{D}(e)$ na prvoj pobuđenoj razini, kao i inače ima jedinice na dijagonali, a sve ostalo su nule. Najprije pronađimo matričnu reprezentaciju permutacije. Ova matrica nam je potrebna u definiciji Reynoldsovog operatora $\hat{R}_{S_2(tu)}$.

$$\hat{D}(tu)\psi_{1ps} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_1(t)\psi_1 \\ e_1(u)\psi_2 \\ e_1(v)\psi_3 \\ e_1(v)\psi_1 \\ e_1(t)\psi_2 \\ e_1(u)\psi_3 \\ e_1(u)\psi_1 \\ e_1(v)\psi_2 \\ e_1(t)\psi_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_1(u)\psi_2 \\ e_1(t)\psi_1 \\ e_1(v)\psi_3 \\ e_1(v)\psi_2 \\ e_1(u)\psi_1 \\ e_1(t)\psi_3 \\ e_1(t)\psi_2 \\ e_1(v)\psi_1 \\ e_1(u)\psi_3 \end{bmatrix} \quad (4.5)$$

Reynoldsov operator $\hat{R}_{S_2(tu)}$ će onda biti:

$$\hat{R}_{S_2(tu)} = \frac{1}{2}(\hat{D}(e) + \hat{D}(tu)) = \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

Dalje definiramo matrice za permutacije (tuv) i (tvu) jer su nam te potrebne za konstrukciju operatora (1.8).

$$\hat{D}(tuv) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \hat{D}(tvu) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Reynoldsov operator $\hat{R}_{\mathcal{A}_3}$ će onda biti:

$$\hat{R}_{\mathcal{A}_3} = \frac{1}{3}(\hat{D}(e) + \hat{D}(tuv) + \hat{D}(tvu)) = \begin{bmatrix} 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

Prema **Korolaru 1.3.2** svojstvene vrijednosti Reynoldsovih operatora mogu biti samo 0 i 1. Dakle, vrijednosti su iste kao i u osnovnom stanju, odnosno $\lambda = \{0, 1\}$ i $m = \{0, 1\}$. (Kratnosti su drugačije jer je riječ o deveterodimenzionalnom prostoru pa imamo i više vektora.) Na ovaj način ne možemo u potpunosti reducirati ovu bazu od 9 vektora stoga moramo definirati još jedan operator. (Dvije svojstvene vrijednosti nisu dovoljne jer imamo 9 nepoznanica, a broj jednačbi je premalen za precizno određivanje vektora.) Prema **Teoremu 1.3.6**, možemo koristiti i operatore iz nekog drugog lanca podgrupa te bismo na taj način dobili drugu vrstu potpunog skupa komutirajućih operatora, CSCOIII. U nastavku definiramo novu grupu permutacija u kojoj su objekti koje permutiramo polinomi, a ne koordinatne osi. Nakon toga nastavljamo redukciju 1. pobuđenog stanja.

Grupa permutacija \bar{S}_3

U Bargmannovom prostoru imamo tri koordinatne osi (t , u i v). Promatramo monome u jednoj varijabli. Monomi su jednostavni izrazi u kojima je dozvoljeno međusobno množenje i potenciranje, a zbrajanje i oduzimanje nije. Neka su $p_1 \in \mathbb{C}[t]$, $p_2 \in \mathbb{C}[u]$ i $p_3 \in \mathbb{C}[v]$ monomi, svaki iz drugog prstena polinoma u jednoj varijabli. Njihov produkt $p_1 p_2 p_3$ je onda monom u 3 varijable (t , u i v). Sada definiramo operatore "permutacije monoma" koji će zamijeniti koordinate djelovanja ovih monoma. Jedan takav operator je, npr. operator $\hat{D}(123)$:

$$\hat{D}(123)p_1(i)p_2(j)p_3(k) = p_1(j)p_2(k)p_3(i), \quad i, j, k \in \{t, u, v\}.$$

Ili, npr. operator $\hat{D}(12)$:

$$\hat{D}(12)p_1(i)p_2(j)p_3(k) = p_1(j)p_2(i)p_3(k), \quad i, j, k \in \{t, u, v\}.$$

Analogija s grupom permutacija koordinatnih osi S_3 i permutacijama (tuv) i (tu) je očita. Skup ovakvih permutacija $\{(e, (12), (13), (23), (123), (132))\}$ tvori novu grupu permutacija, označimo je sa \bar{S}_3 . Bitno je napomenuti da je identiteta e identična identiteti iz grupe S_3 . Ova grupa je izomorfna grupi S_3 te je stoga cijela teorija u potpunosti analogna. Dakle, struktura podgrupa grupe \bar{S}_3 je identična strukturi podgrupa grupe S_3 koja je prikazana na slici 1.3.

Ovo je definirano na ovaj način jer se na višim pobuđenim razinama može javiti monom u maksimalno tri varijable. Međutim, u prvom pobuđenom stanju, možemo imati monom u maksimalno dvije varijable. Također, očito je da su na prvoj pobuđenoj razini $p_1(i) = e_1(i)$ i $p_2(j) = \psi(j)$. Analogna podgrupa podgrupi S_2 je \bar{S}_2 . Ako usporedimo djelovanje operatora $\hat{D}(tu)$ i $\hat{D}(12)$ na stanje $e_1(t)\psi_2$ u oba slučaja dobivamo stanje $e_1(u)\psi_1$. Međutim, za npr. stanje $e_1(t)\psi_3$ dobivamo značajno drugačiji rezultat.

$$e_1(t)\psi_3 \xrightarrow{\hat{D}(12)} e_1(v)\psi_1, \quad e_1(t)\psi_3 \xrightarrow{\hat{D}(tu)} e_1(u)\psi_3.$$

Stanja $e_1(t)\psi_1$, $e_1(u)\psi_2$ i $e_1(v)\psi_3$ se sastoje od dva mononoma, ali u istoj varijabli te su stoga invarijantna na sve permutacije iz grupe \bar{S}_3 . Drugim riječima, svako stanje će se preslikati u sebe pri permutiranju permutacijama iz grupe \bar{S}_3 .

U postupku redukcije ćemo koristiti Reynoldsov operator za podgrupu $\bar{S}_2(12)$. Matrična reprezentacija operatora $\hat{D}(12)$ za prvo pobuđeno stanje je:

$$\hat{D}(12)\psi_{1ps} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_1(t)\psi_1 \\ e_1(u)\psi_2 \\ e_1(v)\psi_3 \\ e_1(v)\psi_1 \\ e_1(t)\psi_2 \\ e_1(u)\psi_3 \\ e_1(u)\psi_1 \\ e_1(v)\psi_2 \\ e_1(v)\psi_2 \\ e_1(t)\psi_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_1(t)\psi_1 \\ e_1(u)\psi_2 \\ e_1(v)\psi_3 \\ e_1(t)\psi_3 \\ e_1(u)\psi_1 \\ e_1(v)\psi_2 \\ e_1(t)\psi_2 \\ e_1(u)\psi_3 \\ e_1(u)\psi_3 \\ e_1(v)\psi_1 \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

Analogno kao (1.9), definiramo Reynoldsov operator za grupu $\bar{S}_2(12)$:

$$\hat{R}_{(12)} = \frac{1}{2}(\hat{D}(e) + \hat{D}(12)) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

Prema **Korolaru 1.3.2** znamo da su jedine moguće svojstvene vrijednosti ovog operatora 0 i 1, pri čemu su funkcije sa svojstvenom vrijednosti 1 invarijantne na djelovanje permutacije (12) dok su one sa svojstvenom vrijednosti 0 antisimetrične s obzirom na tu permutaciju. Neka je k oznaka za svojstvenu vrijednost operatora $\hat{R}_{(12)}$. Dakle, $k = \{0, 1\}$.

Morati ćemo definirati i još jedan skup Youngovih dijagrama jer se radi o drugoj grupi permutacija. Općenito, za grupu \bar{S}_3 će primitivni objekti biti monomi, odnosno, $\boxed{p_1}$, $\boxed{p_2}$ i $\boxed{p_3}$. Neka su onda primitivni objekti za 1. pobuđeno stanje $\boxed{e_1}$ i $\boxed{\psi}$. Ako je vektor invarijantan na djelovanje operatora $\hat{R}_{(12)}$ (svojstvena vrijednost $k = 1$), označavati ćemo ga sa simetričnim Youngovim dijagramom $\boxed{e_1} \boxed{\psi}$, a ako vektor mijenja predznak kod primjene operatora $\hat{R}_{(12)}$ (svojstvena vrijednost $k = 0$) dodijeliti ćemo mu antisimetrični dijagram $\begin{bmatrix} e_1 \\ \psi \end{bmatrix}$. Sada možemo nastaviti sa postupkom redukcije za 1. pobuđeno stanje.

Redukcija prvog pobuđenog stanja

Operator (4.9) komutira sa operatorima ($\hat{R}_{\mathcal{A}_3}, \hat{R}_{S_2(tu)}$) te sa Hamiltonijanom (2.21). Dakle, možemo ga dodati u CSCO. Imamo potpun skup komutirajućih operatora ($\hat{R}_{\mathcal{A}_3}, \hat{R}_{S_2(tu)}, \hat{R}_{(12)}$) te je skup svojstvenih vrijednosti (n, λ, m, k) skup dobrih kvantnih brojeva. Valne funkcije ćemo označavati sa $\psi_{(n,\lambda,m,k)}$.

Sada možemo napisati svojstvene jednadžbe iz kojih ćemo tražiti skup svojstvenih vektora koji će razapinjati ireducibilne reprezentacije grupe S_3 .

$$\hat{R}_{\mathcal{A}_3}\psi_{(n,\lambda,m,k)} = \lambda\psi_{(n,\lambda,m,k)}, \hat{R}_{S_2(tu)}\psi_{(n,\lambda,m,k)} = m\psi_{(n,\lambda,m,k)}, \hat{R}_{(12)}\psi_{(n,\lambda,m,k)} = k\psi_{(n,\lambda,m,k)}$$

Neka su vektori oblika:

$$\begin{aligned} \psi_{(n,\lambda,m,k)} = & a_1 e_1(t)\psi_1 + a_2 e_1(u)\psi_2 + a_3 e_1(v)\psi_3 + a_4 e_1(v)\psi_1 + \\ & + a_5 e_1(t)\psi_2 + a_6 e_1(u)\psi_3 + a_7 e_1(u)\psi_1 + a_8 e_1(v)\psi_2 + a_9 e_1(t)\psi_3 \end{aligned}$$

Svojstvene vektore tražimo kao i u osnovnom stanju. Za $(\lambda, m, k) = (1, 1, 1)$ dobivamo dva svojstvena vektora. Svaki od njih razapinje jednu trivijalnu A_1 reprezentaciju. Dakle, trivijalna

reprezentacija je dvostruko degenerirana na 1. pobuđenoj razini.

$$\psi_{(1,1,1,1)}^I = e_1(t)\psi_1 + e_1(u)\psi_2 + e_1(v)\psi_3 = \left| \begin{array}{|c|c|c|} \hline t & u & v \\ \hline \end{array} \right|, \boxed{e_1\psi} \rangle$$

$$\psi_{(1,1,1,1)}^II = e_1(v)\psi_1 + e_1(t)\psi_2 + e_1(u)\psi_3 + e_1(u)\psi_1 + e_1(v)\psi_2 + e_1(t)\psi_3 = \left| \begin{array}{|c|c|c|} \hline t & u & v \\ \hline \end{array} \right|, \boxed{e_1 \quad \psi} \rangle$$

Za $\psi_{(1,1,1,1)}^I$ koristimo dijagram $\boxed{e_1\psi}$ jer su polinomi u samo jednoj, istoj, varijabli. Dalje, za $(\lambda, m, k) = (1, 0, 0)$ dobivamo jedan svojstveni vektor koji predstavlja alternirajuću A_2 reprezentaciju.

$$\psi_{(1,1,0,0)} = e_1(v)\psi_1 + e_1(t)\psi_2 + e_1(u)\psi_3 - e_1(u)\psi_1 - e_1(v)\psi_2 - e_1(t)\psi_3 = \left| \begin{array}{|c|} \hline t \\ \hline u \\ \hline v \\ \hline \end{array} \right|, \left| \begin{array}{|c|} \hline e_1 \\ \hline \psi \\ \hline \end{array} \right| \rangle$$

Ovaj vektor je invarijantan na permutacije (tuv) i (tvu) , a za permutacije (tu) , (tv) i (uv) samo mijenja predznak. Lako se uoči da ga možemo prikazati kao sljedeću determinantu:

$$\psi_{(1,1,0,0)} = \begin{vmatrix} e_1(t) & e_1(u) & e_1(v) \\ \psi_1 & \psi_2 & \psi_3 \\ 1 & 1 & 1 \end{vmatrix}$$

Kako permutacije samo mijenjaju poredak stupaca, jasno je da je ova determinanta invarijantna na permutacije ciklusa duljine 3, a za permutacije ciklusa duljine 2 samo mijenja predznak. Zanimljivo je da je pripadna permanenta upravo $\psi_{(1,1,1,1)}^II$. Također, $\psi_{(1,1,0,0)}$ je konjugat od $\psi_{(1,1,1,1)}^II$ za oba skupa Youngovih dijagrama.

U potprostoru $(\lambda, k) = (0, 1)$ imamo još i dvije standardne E reprezentacije. Prva je u istom potprostoru kao i $\psi_{(1,1,1,1)}^I$, označimo je sa $E_{(0,1)}^I$.

1. $(\lambda, m, k) = (0, 0, 1)$

$$\psi_{(1,0,0,1)}^I = e_1(t)\psi_1 - e_1(u)\psi_2 = \left| \begin{array}{|c|c|} \hline t & v \\ \hline u & \\ \hline \end{array} \right|, \boxed{e_1\psi} \rangle$$

2. $(\lambda, m, k) = (0, 1, 1)$

$$\psi_{(1,0,1,1)}^I = e_1(t)\psi_1 + e_1(u)\psi_2 - 2e_1(v)\psi_3 = \left| \begin{array}{|c|c|} \hline t & u \\ \hline v & \\ \hline \end{array} \right|, \boxed{e_1\psi} \rangle$$

Prvi vektor mijenja predznak za permutaciju (tu) , drugi je invarijantan na (tu) . Primjetimo, Youngovi dijagrami za grupu S_3 su međusobni konjugati.

Druga standardna reprezentacija se nalazi u istom potprostoru kao i $\psi_{(1,1,1,1)}^II$, označimo je sa $E_{(0,1)}^II$.

1. $(\lambda, m, k) = (0, 0, 1)$

$$\psi_{(1,0,0,1)}^{\text{II}} = e_1(v)\psi_1 - e_1(u)\psi_3 - e_1(v)\psi_2 + e_1(t)\psi_3 = \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline t & v \\ \hline u & \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|c|} \hline e_1 & \psi \\ \hline \end{array} \right\rangle$$

2. $(\lambda, m, k) = (0, 1, 1)$

$$\psi_{(1,0,1,1)}^{\text{II}} = e_1(v)\psi_1 - 2e_1(t)\psi_2 + e_1(u)\psi_3 - 2e_1(u)\psi_1 + e_1(v)\psi_2 + e_1(t)\psi_3 = \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline t & u \\ \hline v & \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|c|} \hline e_1 & \psi \\ \hline \end{array} \right\rangle$$

Posljednja dva vektora se nalaze u potprostoru $(\lambda, k) = (0, 0)$ te čine još jednu standardnu E reprezentaciju, označimo je sa $E_{(0,0)}$.

1. $(\lambda, m, k) = (0, 0, 0)$

$$\psi_{(1,0,0,0)} = -e_1(v)\psi_1 + 2e_1(t)\psi_2 - e_1(u)\psi_3 - 2e_1(u)\psi_1 + e_1(v)\psi_2 + e_1(t)\psi_3 = \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline t & v \\ \hline u & \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|} \hline e_1 \\ \hline \psi \\ \hline \end{array} \right\rangle$$

2. $(\lambda, m, k) = (0, 1, 0)$

$$\psi_{(1,0,1,0)} = -e_1(v)\psi_1 + e_1(u)\psi_3 - e_1(v)\psi_2 + e_1(t)\psi_3 = \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline t & u \\ \hline v & \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|} \hline e_1 \\ \hline \psi \\ \hline \end{array} \right\rangle$$

Primjetimo, ovi vektori su konjugati, za oba skupa dijagrama, standardne reprezentacije $E_{(0,1)}^{\text{II}}$. Kao i za osnovno stanje, promotrimo kako se vektori transformiraju iz vektora prijašnje baze:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & -2 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & -2 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_1(t)\psi_1 \\ e_1(u)\psi_2 \\ e_1(v)\psi_3 \\ e_1(v)\psi_1 \\ e_1(t)\psi_2 \\ e_1(u)\psi_3 \\ e_1(u)\psi_1 \\ e_1(v)\psi_2 \\ e_1(t)\psi_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_{(1,1,1,1)}^{\text{I}} \\ \psi_{(1,0,0,1)}^{\text{I}} \\ \psi_{(1,0,1,1)}^{\text{I}} \\ \psi_{(1,1,1,1)}^{\text{II}} \\ \psi_{(1,1,0,0)} \\ \psi_{(1,0,0,1)}^{\text{II}} \\ \psi_{(1,0,1,1)}^{\text{II}} \\ \psi_{(1,0,0,0)} \\ \psi_{(1,0,1,0)} \end{bmatrix}$$

Iz ovoga možemo iščitati matricu transformacije:

$$T_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & -2 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & -2 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{11} & 0 \\ 0 & T_{12} \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

$$\hat{D}(tvu)_{1ps} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & -1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3/2 & -1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3/2 & -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1/2 & -3/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & -1/2 \end{bmatrix}$$

$$\hat{D}(tv)_{1ps} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & -1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -3/2 & -1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3/2 & -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & -3/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1/2 & -1/2 \end{bmatrix}$$

U svim matricama se tragovi matrica slažu sa tragovima navedenim u tablici karaktera iz matematičkog uvoda. Ono što se ističe, u ovim blok-dijagonalnim formama matrica, je da smo reducirali prvo pobuđeno stanje na direktnu sumu ireducibilnih reprezentacija:

$$\hat{D}(R)_{1ps} = (A_1 \oplus E_{(0,1)}^I)_{11} \oplus (A_1 \oplus A_2 \oplus E_{(0,1)}^{II} \oplus E_{(0,0)})_{12}, \quad \forall R \in S_3$$

Ono što dalje treba provjeriti je slažu li se skalarni produkti. Skalarni produkt se računa prema formuli (2.16). Želimo se uvjeriti da su dobivene funkcije, koje razapinju cijelo prvo pobuđeno stanje, doista okomite. Skalarni produkti su prikazani u sljedećoj tablici:

\times	$\psi_{(1,1,1,1)}^I$	$\psi_{(1,0,0,1)}^I$	$\psi_{(1,0,1,1)}^I$	$\psi_{(1,1,1,1)}^{II}$	$\psi_{(1,1,0,0)}$	$\psi_{(1,0,0,1)}^{II}$	$\psi_{(1,0,1,1)}^{II}$	$\psi_{(1,0,0,0)}$	$\psi_{(1,0,1,0)}$
$\psi_{(1,1,1,1)}^I$	12	0	0	0	0	0	0	0	0
$\psi_{(1,0,0,1)}^I$	0	12	0	0	0	0	0	0	0
$\psi_{(1,0,1,1)}^I$	0	0	12	0	0	0	0	0	0
$\psi_{(1,1,1,1)}^{II}$	0	0	0	24	0	0	0	0	0
$\psi_{(1,1,0,0)}$	0	0	0	0	24	0	0	0	0
$\psi_{(1,0,0,1)}^{II}$	0	0	0	0	0	24	0	0	0
$\psi_{(1,0,1,1)}^{II}$	0	0	0	0	0	0	24	0	0
$\psi_{(1,0,0,0)}$	0	0	0	0	0	0	0	24	0
$\psi_{(1,0,1,0)}$	0	0	0	0	0	0	0	0	24

Lako je provjeriti da su svi dobiveni vektori okomiti (imaju skalarni produkt nula). Ono što se ističe je da vektori u potprostoru T_{11} imaju normu 12, dok oni u potprostoru T_{12} imaju normu 24.

Prvo pobuđeno stanje smo rastavili na 3 standardne reprezentacije $E_{(0,1)}^I$, $E_{(0,1)}^{II}$ i $E_{(0,0)}$, dvije trivijalne A_1 reprezentacije te jednu alternirajuću A_2 reprezentaciju. Odnosno, ukupno imamo 9 stanja:

$$9 = 2 + 2 + 2 + 1 + 1 + 1$$

U terminologiji Youngovih dijagrama i simetrije, standardne reprezentacije su razapete vektorima mješovite simetričnosti, trivijalne reprezentacije potpuno simetričnim vektorima, a alternirajuća reprezentacija potpuno antisimetričnim vektorom.

4.4 2. pobuđeno stanje

Stanja relativnog gibanja (RM)

Najprije razmatramo RM dio. Kao što je već navedeno, on je razapet sa 10 stanja: $\psi_1^3, \psi_1^2\psi_2, \psi_1^2\psi_3, \psi_2^2\psi_1, \psi_2^2\psi_3, \psi_3^2\psi_1, \psi_3^2\psi_2, \psi_3^3$ i $\psi_1\psi_2\psi_3$.

Za drugo pobuđeno stanje imamo $n = 2$. Kao i za 1. pobuđeno stanje, imamo potpun skup komutirajućih operatora ($\hat{R}_{\mathcal{A}_3}, \hat{R}_{S_2(tu)}, \hat{R}_{(12)}$), odnosno CSCOIII. Valne funkcije ćemo označavati, analogno 1. pobuđenom stanju, sa $\psi_{(n,\lambda,m,k)}$. Sada koristimo diskriminante iz (3.11) kao pobuđenja pa je potrebno promijeniti notaciju u Youngovim dijagramima za $\hat{D}(12)$. Sada su primitivni objekti $\boxed{\psi^2}$ i $\boxed{\psi}$. Ako je vektor invarijantan na djelovanje operatora $\hat{D}(12)$ (svojstvena vrijednost $k = 1$), označavati ćemo ga sa simetričnim Youngovim dijagramom $\boxed{\psi^2} \boxed{\psi}$, a ako vektor mijenja predznak kod primjene operatora $\hat{D}(12)$ (svojstvena vrijednost $k = -1$) dodijeliti ćemo mu antisimetrični dijagram $\begin{array}{|c|} \hline \psi^2 \\ \hline \psi \\ \hline \end{array}$. Sve matrice permutacija će biti gotovo identične onima za prvo pobuđeno stanje. Podsjetimo se, potprostor 1. pobuđenog stanja je prostor dimenzije 9, a RM potprostor 2. pobuđenog stanja je dimenzije 10. Ono što dodajemo u RM potprostoru je zapravo 4 oblik, a on je svejedno invarijantan na permutacije stoga će u svim matricama permutacije biti predstavljen samo s jednom dodatnom jedinicom.

U nastavku ćemo pronaći matrice permutacije za RM. Slično kao u (4.5):

$$\hat{D}(tu)\psi_{RM} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1^3 \\ \psi_2^3 \\ \psi_3^3 \\ \psi_3^2\psi_1 \\ \psi_1^2\psi_2 \\ \psi_2^2\psi_3 \\ \psi_2^2\psi_1 \\ \psi_3^2\psi_2 \\ \psi_1^2\psi_3 \\ \psi_1\psi_2\psi_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_2^3 \\ \psi_1^3 \\ \psi_3^3 \\ \psi_3^2\psi_2 \\ \psi_2^2\psi_1 \\ \psi_1^2\psi_3 \\ \psi_1^2\psi_2 \\ \psi_3^2\psi_1 \\ \psi_2^2\psi_3 \\ \psi_1\psi_2\psi_3 \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

Reynoldsov operator $\hat{R}_{S_2(tu)}$ će onda biti:

$$\hat{R}_{S_2(tu)} = \frac{1}{2}(\hat{D}(e) + \hat{D}(tu)) = \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.14)$$

Ako ovu matricu usporedimo sa (4.6) vidimo da smo samo dodali jednu jedinicu za ψ_4 . Kao u prvom pobuđenom stanju, definiramo matrice za permutacije (tuv) i (tvu) .

$$\hat{D}(tuv) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \hat{D}(tvu) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Reynoldsov operator $\hat{R}_{\mathcal{A}_3}$ će onda biti:

$$\hat{R}_{\mathcal{A}_3} = \frac{1}{3}(\hat{D}(e) + \hat{D}(tuv) + \hat{D}(tvu)) = \begin{bmatrix} 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

Kao i za 1. pobuđeno stanje, potreban nam je i operator $\hat{R}_{(12)}$ pa u tu svrhu definiramo operator

$\hat{D}(12)$.

$$\hat{D}(12) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.16)$$

Primjetimo, ψ_4 je invarijantan na sve permutacije iz grupe \bar{S}_3 . Dakle, operator $\hat{R}_{(12)}$ je:

$$\hat{R}_{(12)} = \frac{1}{2}(\hat{D}(e) + \hat{D}(12)) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.17)$$

Sada kada imamo CSCO možemo tražiti vektore koji će činiti ireducibilne reprezentacije grupe S_3 . Neka su vektori oblika:

$$\psi_{(n,\lambda,m,k)} = a_1\psi_1^3 + a_2\psi_2^3 + a_3\psi_3^3 + a_4\psi_3^2\psi_1 + a_5\psi_1^2\psi_2 + a_6\psi_2^2\psi_3 + a_7\psi_2^2\psi_1 + a_8\psi_3^2\psi_2 + a_9\psi_1^2\psi_3 + a_{10}\psi_1\psi_2\psi_3$$

Svojstvene jednadžbe su iste kao i prije, odnosno:

$$\hat{R}_{\mathcal{A}_3}\psi_{(n,\lambda,m,k)} = \lambda\psi_{(n,\lambda,m,k)}, \hat{R}_{S_2(tu)}\psi_{(n,\lambda,m,k)} = m\psi_{(n,\lambda,m,k)}, \hat{R}_{(12)}\psi_{(n,\lambda,m,k)} = k\psi_{(n,\lambda,m,k)}$$

Kako su svi operatori Reynoldsovi, znamo da su im svojstvene vrijednosti $\lambda, m, k = \{0, 1\}$.

Postupak traženja svojstvenih vektora je potpuno analogan postupku za osnovno stanje i za prvo pobuđeno stanje.

Za $(\lambda, m, k) = (1, 1, 1)$ dobivamo 3 svojstvena vektora. Sva tri čine A_1 trivijalne reprezentacije. Dakle, u RM dijelu 2. pobuđenog stanja, reprezentacija A_1 je trostruko degenerirana.

$$\psi_{(2,1,1,1)}^I = \psi_1^3 + \psi_2^3 + \psi_3^3 = \left| \begin{array}{|c|c|c|} \hline t & u & v \\ \hline \end{array}, \psi^3 \right\rangle$$

$$\psi_{(2,1,1,1)}^{II} = \psi_3^2\psi_1 + \psi_1^2\psi_2 + \psi_2^2\psi_3 + \psi_2^2\psi_1 + \psi_3^2\psi_2 + \psi_1^2\psi_3 = \left| \begin{array}{|c|c|c|} \hline t & u & v \\ \hline \end{array}, \psi^2 \psi \right\rangle$$

$$\psi_{(2,1,1,1)}^{\text{III}} = \psi_1\psi_2\psi_3 = \left[\begin{array}{|c|c|c|} \hline t & u & v \\ \hline \end{array}, \left[\begin{array}{|c|c|c|} \hline \psi & \psi & \psi \\ \hline \end{array} \right] \right]$$

Ovdje vidimo da je $\psi_{(2,1,1,1)}^{\text{III}}$ četvrti oblik ψ_4 koji je ostao isti kao u staroj bazi. Za njega koristimo simetrični dijagram $\left[\begin{array}{|c|c|c|} \hline \psi & \psi & \psi \\ \hline \end{array} \right]$ jer je riječ o 3 monoma.

Za $(\lambda, m, k) = (1, 0, 0)$ dobivamo jedan svojstveni vektor. On čini alternirajuću A_2 reprezentaciju simetrične grupe S_3 .

$$\psi_{(2,1,0,0)}^{\text{I}} = \psi_3^2\psi_1 + \psi_1^2\psi_2 + \psi_2^2\psi_3 - \psi_2^2\psi_1 - \psi_3^2\psi_2 - \psi_1^2\psi_3 = \left[\begin{array}{|c|} \hline t \\ \hline u \\ \hline v \\ \hline \end{array}, \left[\begin{array}{|c|} \hline \psi^2 \\ \hline \psi \\ \hline \end{array} \right] \right]$$

U potprostoru $(\lambda, k) = (0, 1)$ imamo dvije standardne reprezentacije. Prva je u istom potprostoru kao i vektor trivijalne reprezentacije $\psi_{(2,1,1,1)}^{\text{I}}$. Označimo je sa $E_{(0,1)}^{\text{I}}$.

1. $(\lambda, m, k) = (0, 0, 1)$

$$\psi_{(2,0,0,1)}^{\text{I}} = \psi_1^3 - \psi_2^3 = \left[\begin{array}{|c|c|} \hline t & v \\ \hline u & \\ \hline \end{array}, \left[\begin{array}{|c|c|} \hline \psi^2 & \psi \\ \hline \end{array} \right] \right]$$

2. $(\lambda, m, k) = (0, 1, 1)$

$$\psi_{(2,0,1,1)}^{\text{I}} = \psi_1^3 + \psi_2^3 - 2\psi_3^3 = \left[\begin{array}{|c|c|} \hline t & u \\ \hline v & \\ \hline \end{array}, \left[\begin{array}{|c|c|} \hline \psi^2 & \psi \\ \hline \end{array} \right] \right]$$

Druga je u istom potprostoru kao i $\psi_{(2,1,1,1)}^{\text{II}}$, označimo je sa $E_{(0,1)}^{\text{II}}$.

1. $(\lambda, m, k) = (0, 0, 1)$

$$\psi_{(2,0,0,1)}^{\text{II}} = \psi_3^2\psi_1 - \psi_2^2\psi_3 - \psi_3^2\psi_2 + \psi_1^2\psi_3 = \left[\begin{array}{|c|c|} \hline t & v \\ \hline u & \\ \hline \end{array}, \left[\begin{array}{|c|c|} \hline \psi^2 & \psi \\ \hline \end{array} \right] \right]$$

2. $(\lambda, m, k) = (0, 1, 1)$

$$\psi_{(2,0,1,1)}^{\text{II}} = \psi_3^2\psi_1 - 2\psi_1^2\psi_2 + \psi_2^2\psi_3 - 2\psi_2^2\psi_1 + \psi_3^2\psi_2 + \psi_1^2\psi_3 = \left[\begin{array}{|c|c|} \hline t & u \\ \hline v & \\ \hline \end{array}, \left[\begin{array}{|c|c|} \hline \psi^2 & \psi \\ \hline \end{array} \right] \right]$$

Posljednja standardna reprezentacija se nalazi u potprostoru $(\lambda, k) = (0, 0)$, označimo je sa $E_{(0,0)}^{\text{I}}$

1. $(n, \lambda, m, k) = (2, 0, 0, 0)$

$$\psi_{(2,0,0,0)}^{\text{I}} = -\psi_3^2\psi_1 + 2\psi_1^2\psi_2 - \psi_2^2\psi_3 - 2\psi_2^2\psi_1 + \psi_3^2\psi_2 + \psi_1^2\psi_3 = \left[\begin{array}{|c|c|} \hline t & v \\ \hline u & \\ \hline \end{array}, \left[\begin{array}{|c|} \hline \psi^2 \\ \hline \psi \\ \hline \end{array} \right] \right]$$

2. $(n, \lambda, m, k) = (2, 0, 1, 0)$

$$\psi_{(2,0,1,0)}^{\text{I}} = -\psi_3^2\psi_1 + \psi_2^2\psi_3 - \psi_3^2\psi_2 + \psi_1^2\psi_3 = \left[\begin{array}{|c|c|} \hline t & u \\ \hline v & \\ \hline \end{array}, \left[\begin{array}{|c|} \hline \psi^2 \\ \hline \psi \\ \hline \end{array} \right] \right]$$

Matrica permutacije za (tu) je (4.13). Analognim postupkom, dobivamo matricu permutacije (tu) u novoj bazi:

$$\hat{D}(tu)_{RM} = T_1 \hat{D}(tu) T_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

Uspoređivanjem matičnih elemenata za ireducibilne reprezentacije sa (4.11) i (4.12), vidimo da su isti. Jedinica koja predstavlja ψ_4 je samo matična reprezentacija trivijalne A_1 reprezentacije. Analogno se mogu dobiti i sve preostale matrice, ali ovdje ih nećemo navoditi jer su svi matični elementi ekvivalentni prije dobivenim elementima. Od ovog trenutka nećemo više razmatrati matrice permutacija jer nema novih elemenata.

Ovime je postupak redukcije za RM dio 2. pobuđenog stanja završen. Kao i za prvo pobuđeno stanje, matrice permutacija možemo prikazati kao direktnu sumu:

$$\hat{D}(R)_{RM} = (A_1 \oplus E_{(0,1)}^I)_{21} \oplus (A_1 \oplus A_2 \oplus E_{(0,1)}^{II} \oplus E_{(0,0)}^I)_{22} \oplus (A_1)_{23}, \quad \forall R \in S_3$$

Dakle, RM dio 2. pobuđenog stanja se reducira na tri trivijalne A_1 reprezentacije, jednu alternirajuću A_2 reprezentaciju i 3 standardne E reprezentacije. Odnosno,

$$10 = 2 + 2 + 2 + 1 + 1 + 1 + 1$$

Stanja gibanja centra mase (CM)

CSCO je identičan prvom pobuđenom stanju i RM dijelu 2. pobuđenog stanja. Dimenzija ovog prostora je 18 pa su sve matrice operatora veličine 18×18 . Sličnost sa prije navedenim matricama je velika stoga ih nema smisla navoditi. Štoviše, ukoliko uzmemo dvije matrice iz 1. pobuđenog stanja te ih smjestimo na dijagonalu, a ostatak popunimo nulama, dobiti ćemo matrice ovog prostora.

Pojasnimo najprije stanja koja djeluju kao da operator $\hat{D}(12)$ nije primjenjiv na njih. Kod stanja $e_1(t)e_1(u)\psi_3$, $e_1(t)e_1(v)\psi_2$ i $e_1(u)e_1(v)\psi_1$ imamo sličnu situaciju kao kod ψ_4 . Opet imamo produkt tri monoma jedne varijable. Imamo:

$$\hat{D}(12)e_1(i)e_1(j)\psi(k) = e_1(j)e_1(i)\psi(k).$$

Iz ovoga odmah vidimo da su sva tri stanja invarijantna na operator $\hat{D}(12)$ (svojevrsna vrijednost $k = 1$). Međutim, za razliku od ψ_4 , ova stanja nisu invarijantna na sve permutacije iz \bar{S}_3 . Štoviše, invarijantna su samo na $\hat{D}(12)$ i na identitetu. Tako, na primjer, $\hat{D}(23)e_1(t)e_1(v)\psi_2 = e_1(t)e_1(u)\psi_3$.

Međutim, ova činjenica ne utječe na glavni rezultat ovog rada jer je operator $\hat{D}(12)$ koji smo uzeli u CSCO dovoljan za redukciju cijelog prostora u ireducibilne reprezentacije grupe S_3 . Ali, kako ne bi bilo ispravno pisati $\boxed{e_1 \mid e_1 \mid \psi}$ jer ovi vektori nisu invarijantni na sve permutacije iz \bar{S}_3 , možemo

koristiti $\boxed{\begin{array}{c|c} e_1 & e_1 \\ \hline \psi & \end{array}}$. Ovaj dijagram prikazuje invarijantnost pri permutiranju koordinati djelovanja e_1 i e_1 . Ipak, najprije je potrebno odrediti vektore koji će razapinjati ireducibilne reprezentacije.

Na prvi pogled i stanja kao npr. $e_1(t)e_1(u)\psi_2$ predstavljaju problem, ali ovakva stanja sadrže dva monoma funkcije jedne varijable ($e_1(t)$ i $e_1(u)\psi_2$) te se operator $\hat{D}(12)$ može primijeniti bez ikakvih poteškoća. Na primjer,

$$D(12)e_1(t)e_1(v)\psi_3 = e_1(v)e_1(t)\psi_1 = e_1(t)e_1(v)\psi_1.$$

Za ova stanja ćemo koristiti $\boxed{e_1 \mid e_1 \mid \psi}$ za simetrične vektore i $\boxed{\begin{array}{c} e_1 \\ \hline e_1 \psi \end{array}}$ za antisimetrične vektore.

Postupak traženja svojstvenih vektora je potpuno analogan prijašnjem postupku. Najprije imamo svojstvene vrijednosti za A_1 reprezentacije, odnosno $(\lambda, m, k) = (1, 1, 1)$. Ovdje dobivamo 4 vektora.

$$\psi_{(2,1,1,1)}^{IV} = e_1^2(t)\psi_1 + e_1^2(u)\psi_2 + e_1^2(v)\psi_3 = \left| \boxed{t \mid u \mid v}, \boxed{e_1^2 \mid \psi} \right\rangle$$

$$\psi_{(2,1,1,1)}^V = e_1^2(v)\psi_1 + e_1^2(t)\psi_2 + e_1^2(u)\psi_3 + e_1^2(u)\psi_1 + e_1^2(v)\psi_2 + e_1^2(t)\psi_3 \left| \boxed{t \mid u \mid v}, \boxed{e_1^2 \mid \psi} \right\rangle$$

Primjetimo, u ova dva koristimo $\boxed{e_1^2}$ kao primitivni objekt pobuđenja odnosno prvog polinoma.

$$\psi_{(2,1,1,1)}^{VI} = e_1(u)e_1(v)\psi_1 + e_1(t)e_1(v)\psi_2 + e_1(t)e_1(u)\psi_3 = \left| \boxed{t \mid u \mid v}, \boxed{e_1 \mid e_1 \mid \psi} \right\rangle$$

Ovdje ipak koristimo dijagram $\boxed{e_1 \mid e_1 \mid \psi}$ jer je ovaj zbroj u potpunosti zatvoren na sve permutacije iz \bar{S}_3 .

$$\begin{aligned} \psi_{(2,1,1,1)}^{VII} &= e_1(t)e_1(v)\psi_1 + e_1(t)e_1(u)\psi_2 + e_1(u)e_1(v)\psi_3 + e_1(t)e_1(u)\psi_1 + e_1(u)e_1(v)\psi_2 + e_1(t)e_1(v)\psi_3 \\ &= \left| \boxed{t \mid u \mid v}, \boxed{e_1 \mid e_1 \mid \psi} \right\rangle \end{aligned}$$

Sada smo pronašli sve vektore koji razapinju trivijalne A_1 reprezentacije u 2. pobuđenom stanju. Ukupno ih ima 7. Iz ovog slijedi da je u 2. pobuđenom stanju degeneracija A_1 reprezentacije 7.

Dalje tražimo preostale alternirajuće reprezentacije, njihove svojstvene vrijednosti su $(\lambda, m, k) = (1, 0, 0)$. Dobivamo dva vektora:

$$\psi_{(2,1,0,0)}^{II} = e_1^2(v)\psi_1 + e_1^2(t)\psi_2 + e_1^2(u)\psi_3 - e_1^2(u)\psi_1 - e_1^2(v)\psi_2 - e_1^2(t)\psi_3 = \left| \begin{array}{c} t \\ u \\ v \end{array}, \begin{array}{c} e_1^2 \\ \hline \psi \end{array} \right\rangle$$

$$\begin{aligned} \psi_{(2,1,0,0)}^{\text{III}} &= e_1(t)e_1(v)\psi_1 + e_1(t)e_1(u)\psi_2 + e_1(u)e_1(v)\psi_3 - e_1(t)e_1(u)\psi_1 - e_1(u)e_1(v)\psi_2 - e_1(t)e_1(v)\psi_3 \\ &= \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline t & v \\ \hline u & v \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|} \hline e_1 \\ \hline e_1\psi \\ \hline \end{array} \right\rangle \end{aligned}$$

Ovo su sve alternirajuće A_2 reprezentacije u 2. pobuđenom stanju (ukupno ih je 3). Preostalih 12 vektora tvori još šest standardnih E reprezentacija. Najprije imamo $E_{(0,1)}^{\text{III}}$.

$$1. (\lambda, m, k) = (0, 0, 1)$$

$$\psi_{(2,0,0,1)}^{\text{III}} = e_1^2(t)\psi_1 - e_1^2(u)\psi_2 = \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline t & v \\ \hline u & \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|c|} \hline e_1^2 & \psi \\ \hline \end{array} \right\rangle$$

$$2. (\lambda, m, k) = (0, 1, 1)$$

$$\psi_{(2,0,1,1)}^{\text{III}} = e_1^2(t)\psi_1 + e_1^2(u)\psi_2 - 2e_1^2(v)\psi_3 = \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline t & u \\ \hline v & \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|c|} \hline e_1^2 & \psi \\ \hline \end{array} \right\rangle$$

Sljedeća je $E_{(0,1)}^{\text{IV}}$:

$$1. (\lambda, m, k) = (0, 0, 1)$$

$$\psi_{(2,0,0,1)}^{\text{IV}} = e_1^2(v)\psi_1 - e_1^2(u)\psi_3 - e_1^2(v)\psi_2 + e_1^2(t)\psi_3 = \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline t & v \\ \hline u & \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|c|} \hline e_1^2 & \psi \\ \hline \end{array} \right\rangle$$

$$2. (\lambda, m, k) = (0, 1, 1)$$

$$\psi_{(2,0,1,1)}^{\text{IV}} = e_1^2(v)\psi_1 - 2e_1^2(t)\psi_2 + e_1^2(u)\psi_3 - 2e_1^2(u)\psi_1 + e_1^2(v)\psi_2 + e_1^2(t)\psi_3 = \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline t & u \\ \hline v & \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|c|} \hline e_1^2 & \psi \\ \hline \end{array} \right\rangle$$

Zatim slijedi $E_{(0,1)}^{\text{V}}$:

$$1. (\lambda, m, k) = (0, 0, 1)$$

$$\psi_{(2,0,0,1)}^{\text{V}} = e_1(u)e_1(v)\psi_1 - e_1(t)e_1(v)\psi_2 = \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline t & v \\ \hline u & \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|c|} \hline e_1 & e_1 \\ \hline \psi & \\ \hline \end{array} \right\rangle$$

$$2. (\lambda, m, k) = (0, 1, 1)$$

$$\psi_{(2,0,1,1)}^{\text{V}} = e_1(u)e_1(v)\psi_1 + e_1(t)e_1(v)\psi_2 - 2e_1(t)e_1(u)\psi_3 = \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline t & u \\ \hline v & \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|c|} \hline e_1 & e_1 \\ \hline \psi & \\ \hline \end{array} \right\rangle$$

Ovdje koristimo $\begin{array}{|c|c|} \hline e_1 & e_1 \\ \hline \psi & \\ \hline \end{array}$ jer su ovi vektori invarijantni samo na operator $\hat{D}(12)$, odnosno permutirane koordinata djelovanja e_1 i e_1 . I posljednja standardna reprezentacija u potprostoru $(\lambda, k) = (0, 1)$ je $E_{(0,1)}^{\text{VI}}$:

1. $(\lambda, m, k) = (0, 0, 1)$

$$\psi_{(2,0,0,1)}^{\text{VI}} = e_1(t)e_1(v)\psi_1 - e_1(u)e_1(v)\psi_3 - e_1(u)e_1(v)\psi_2 + e_1(t)e_1(v)\psi_3 = \left[\begin{array}{c|c} t & v \\ \hline u & \end{array} \right], \left[\begin{array}{c|c} e_1 & e_1\psi \end{array} \right] \rangle$$

2. $(\lambda, m, k) = (0, 1, 1)$

$$\psi_{(2,0,1,1)}^{\text{VI}} = e_1(t)e_1(v)\psi_1 - 2e_1(t)e_1(u)\psi_2 + e_1(u)e_1(v)\psi_3 - 2e_1(t)e_1(u)\psi_1 + e_1(u)e_1(v)\psi_2 + e_1(t)e_1(v)\psi_3 = \left[\begin{array}{c|c} t & u \\ \hline v & \end{array} \right], \left[\begin{array}{c|c} e_1 & e_1\psi \end{array} \right] \rangle$$

Posljednja 4 vektora čine još dvije standardne E reprezentacije u potprostoru $(\lambda, k) = (0, 0)$. Najprije imamo $E_{(0,0)}^{\text{II}}$:

1. $(\lambda, m, k) = (0, 0, 0)$

$$\psi_{(2,0,0,0)}^{\text{II}} = -e_1^2(v)\psi_1 + 2e_1^2(t)\psi_2 - e_1^2(u)\psi_3 - 2e_1^2(u)\psi_1 + e_1^2(v)\psi_2 + e_1^2(t)\psi_3 = \left[\begin{array}{c|c} t & v \\ \hline u & \end{array} \right], \left[\begin{array}{c|c} e_1^2 \\ \hline \psi \end{array} \right] \rangle$$

2. $(\lambda, m, k) = (0, 1, -1)$

$$\psi_{(2,0,1,0)}^{\text{II}} = -e_1^2(v)\psi_1 + e_1^2(u)\psi_3 - e_1^2(v)\psi_2 + e_1^2(t)\psi_3 = \left[\begin{array}{c|c} t & u \\ \hline v & \end{array} \right], \left[\begin{array}{c|c} e_1^2 \\ \hline \psi \end{array} \right] \rangle$$

I posljednja 2 vektora, $E_{(0,0)}^{\text{III}}$:

1. $(\lambda, m, k) = (0, 0, 0)$

$$\psi_{(2,0,0,0)}^{\text{III}} = -e_1(t)e_1(v)\psi_1 + 2e_1(t)e_1(u)\psi_2 - e_1(u)e_1(v)\psi_3 - 2e_1(t)e_1(u)\psi_1 + e_1(u)e_1(v)\psi_2 + e_1(t)e_1(v)\psi_3 = \left[\begin{array}{c|c} t & v \\ \hline u & \end{array} \right], \left[\begin{array}{c|c} e_1 \\ \hline e_1\psi \end{array} \right] \rangle$$

2. $(\lambda, m, k) = (0, 1, 0)$

$$\psi_{(2,0,1,0)}^{\text{III}} = -e_1(t)e_1(v)\psi_1 + e_1(u)e_1(v)\psi_3 - e_1(u)e_1(v)\psi_2 + e_1(t)e_1(v)\psi_3 = \left[\begin{array}{c|c} t & u \\ \hline v & \end{array} \right], \left[\begin{array}{c|c} e_1 \\ \hline e_1\psi \end{array} \right] \rangle$$

Naposlijetku, kao rezime, primjećujemo da se 28×28 matrica transformacije za 2. pobuđeno stanje (sa RM i CM dijelom uključenim) može prikazati kao direktna suma 3 matrice transformacije za 1. pobuđeno stanje (4.10) sa dodatnom jediničnom matricom za 4. oblik koji je invarijantan na permutacije.

$$T_2 = \begin{bmatrix} CM & 0 \\ 0 & RM \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & T_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & T_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = T_1 \oplus T_1 \oplus T_1 \oplus \hat{1} \quad (4.21)$$

Ovo znači da ćemo dobiti iste matrice elemente ireducibilnih reprezentacija u nizu po dijagonalni uz dodatnu jedinicu za 4. oblik. Ukupno smo dobili 10 jednodimenzionalnih reprezentacija (6 trivijalnih, 3 alternirajuće i 4. oblik koji je trivijalna) i 9 standardnih reprezentacija. Odnosno,

$$28 = 2 + 2 + 2 + 2 + 2 + 2 + 2 + 2 + 2 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1.$$

Sve matrice permutacija se mogu napisati kao direktne sume matrica za 1. pobuđeno stanje, odnosno:

$$\hat{D}(R)_{2ps} = \hat{D}(R)_{1ps} \oplus \hat{D}(R)_{1ps} \oplus \hat{D}(R)_{1ps} \oplus \hat{1}, \quad \forall R \in S_3.$$

4.5 Viša pobuđenja

Treće pobuđeno stanje je razapeto sa 60 vektora. Pažljivom analizom je moguće uočiti da se sve matrice permutacije mogu prikazati kao direktne sume matrica osnovnog stanja i prvog pobuđenog stanja, odnosno:

$$\hat{D}(R)_{2ps} = 6 \cdot \hat{D}(R)_{1ps} \oplus 2 \cdot \hat{D}(R)_{os}, \quad \forall R \in S_3.$$

Ove dvije posljednje dolaze od pobuđenja 4. oblika sa Eulerovim bozonima $e_1(t)$, $e_1(u)$ i $e_1(v)$ te od pobuđenja oblika ψ_1 , ψ_2 i ψ_3 sa produktom Eulerovih bozona $e_1(t)e_1(u)e_1(v)$. Konstrukcija valnih funkcija je sasvim analogna postupku provedenom za osnovno stanje te prvo i drugo pobuđeno stanje. Tako na primjer imamo:

$$\psi_{(3,1,1,1)} = e_1^3(t)\psi_1 + e_1^3(u)\psi_2 + e_1^3(v)\psi_3 = \left| \begin{array}{|c|c|c|} \hline t & u & v \\ \hline \end{array} , \begin{array}{|c|} \hline e_1^3 \\ \hline \end{array} \left| \begin{array}{|c|} \hline \psi \\ \hline \end{array} \right\rangle$$

Ovo je primjer vektora koji predstavlja trivijalnu A_1 reprezentaciju na 3. pobuđenoj razini. Na ovaj način možemo u potpunosti klasificirati vektore koji će činiti ireducibilne reprezentacije grupe S_3 na svim pobuđenim razinama.

Poglavlje 5

Zaključak

U ovom diplomskom radu primjenjujemo matematičku teoriju grupa na kvantnu fiziku. Princip potpunog skupa komutirajućih operatora (CSCO) koji se koristi u ovom radu je primjenjiv na puno različitih kvantnih sustava s obzirom na različite grupe.

U ovom radu koristimo od prije poznatu teoriju prikazivanja valnih funkcija kao linearnu kombinaciju produkta simetričnih i antisimetričnih polinoma što tvori slobodni modul antisimetričnih polinoma nad prstenom simetričnih polinoma. Glavni zadatak ovog rada je bio reducirati prostor ovih polinoma za dvije čestice s obzirom na grupu permutacija koordinatnih osi S_3 . Ovo je napravljeno te smo dobili ireducibilne reprezentacije vektora stanja u odnosu na ovu grupu. Isto je napravljeno za osnovno stanje te prvo i drugo pobuđeno stanje. Također je postavljena klasifikacija preko Youngovih dijagrama koju možemo koristiti da bismo dobili ireducibilne reprezentacije za bilo koje više pobuđeno stanje.

U samom postupku se uvijek javljaju određene ireducibilne reprezentacije u istim formama. Tako imamo dvije trivijalne A_1 reprezentacije od kojih jedna ima konjugat u formi alternirajuće A_2 reprezentacije i 3 standardne E reprezentacije (svaka u pripadnom potprostoru jedne jednodimenzionalne reprezentacije). Iznimka je 4. oblik $\psi_4 = \psi_1\psi_2\psi_3$ koji se javlja u stanjima relativnog gibanja (RM) 2. pobuđene razine. On predstavlja još jednu trivijalnu A_1 reprezentaciju drugačije forme od dvije već navedene. Pri tome, on nije promijenio oblik u odnosu na staru bazu što smo mogli i očekivati jer je invarijantan na permutacije. (On predstavlja orijentirani volumen u Bargmannovom prostoru, a volumen se ne mijenja pri permutiranju koordinatnih osi.)

Kako se forma ovih reprezentacija ne mijenja, moguće je dobiti sve reprezentacije na višim pobuđenjima uspoređivanjem s ovim već dobivenima. Ovim radom je dovršena redukcija baze kvantnih stanja s obzirom na grupu permutacija S_3 za sustav dva identična fermiona u potencijalu trodimenzionalnog harmonijskog oscilatora.

Bibliografija

- [1] M. Billik i G. C. Rota, *On Reynolds Operators in Finite-Dimensional Algebras*, (1960), 6.
- [2] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice Hall, 1995.
- [3] Richard L. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, 1980.
- [4] Jin Qian-Chen, *Group Representation Theory for Physicists*, World Scientific, 2002.
- [5] Katarina Rožman i D. K. Sunko, *Generic example of algebraic bosonisation*, (2019), 7.
- [6] Bruce E. Sagan, *The Symmetric Group*, Springer Science, 2001.
- [7] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, 1994.
- [8] Bernd Sturmfels, *Algorithms in Invariant Theory*, SpringerWienNewYork, 1993.
- [9] D. K. Sunko, *Fundamental building blocks of strongly correlated wave functions*, (2016), 7.
- [10] ———, *Fundamental invariants of many-body Hilbert space*, (2016), 15.
- [11] ———, *Natural generalization of the ground-state Slater determinant to more than one dimension*, (2016), 13.
- [12] Gerald Teschl, *Mathematical Methods in Quantum Mechanics*, American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 2009.
- [13] Vipul Naik, *Groupprops*, 2006, https://groupprops.subwiki.org/wiki/Main_Page, [Online; accessed 22-November-2019].

Sažetak

Valne funkcije kvantnih stanja shvaćamo kao vektore u apstraktnom Hilbertovom prostoru. Hilbertov prostor je potpuni unitarni vektorski prostor sa definiranim skalarnim produktom. Ovaj skalarni produkt je tipični skalarni produkt dviju funkcija. Korištenjem određenog transformata, možemo prijeći u Bargmannov prostor u kojem valne funkcije postaju polinomi. Ovaj prostor čini slobodan modul antisimetričnih polinoma nad prstenom simetričnih polinoma čiji su generatori oblici.

U ovom radu proučavamo valne funkcije dva identična fermiona u potencijalu 3D harmonijskog oscilatora. Ovaj kvantni sustav ima točno 4 oblika od kojih su tri polinomi stupnja 1 (ψ_1, ψ_2 i ψ_3), a 4. je produkt prva tri te se nalazi u drugom pobuđenom stanju kao polinom stupnja 3. Prvo pobuđeno stanje je razapeto sa devet stanja, a drugo pobuđeno stanje sa 28 stanja.

Redukcijom vektora stanja koji razapinju osnovno stanje te prvo i drugo pobuđeno stanje, s obzirom na grupu permutacija S_3 , javljaju se dvije različite trivijalne A_1 reprezentacije, jedna alternirajuća A_2 reprezentacija i 3 različite standardne E reprezentacije. Zanimljivo je da se 4. oblik, koji je invarijantan na permutacije, javlja u istom obliku kao ranije u 2. pobuđenom stanju te čini još jednu novu trivijalnu A_1 reprezentaciju drugačije simetrije od ovih navedenih. Kako je uobičajeno za simetričnu grupu S_3 , sve valne funkcije su prikazane preko Youngovih dijagrama.

KLJUČNE RIJEČI: Hilbertov prostor, grupa permutacija, simetrična grupa, redukcija, Youngovi dijagrami

Summary

We understand the wave functions of quantum states as vectors in the abstract Hilbert space. Hilbert space is a unitary vector space with defined scalar product. This scalar product is a typical scalar product of two functions. Using transformation for Bargmann space, the wave functions become polynomials. This space forms a free module over ring of polynomials which is generated with shapes.

In this paper, we study the wave functions of two identical fermions in the potential of a 3D harmonic oscillator. This quantum system has exactly 4 shapes, three of which are polynomials of degree 1 (ψ_1 , ψ_2 , and ψ_3), and the 4th is the product of other three (degree 3) and occurs in second excited state. First excited state is spanned by nine states and second state is spanned by 28 states.

By reducing state vectors that decompose the ground state and the first and second excited states, with respect to the permutation group S_3 , two different trivial A_1 representations, one alternating A_2 representation and 3 different standard E representations occurs. Interestingly, the 4th shape, which is invariant to permutations, occur in the same form as before in the 2nd excited state and forms another new trivial A_1 representation of a different symmetry than others. As is usual for the symmetric group S_3 , all wave functions are represented by Young diagrams.

KEYWORDS: Hilbert space, permutation group, symmetric group, reduction, Young diagrams

Životopis

Rođen sam 28. listopada 1994. godine u Ogulinu. U 3. godini života sam se preselio u Zagreb te sam ovdje i odrastao. Već od najranije dobi sam pokazivao veliki interes prema svim prirodnim znanostima, matematici i radu na računalu.

Pohađao sam "Osnovnu školu Dr. Ivan Merz" u Zagrebu. Posljednje 4 godine obrazovanja u ovoj školi mi je razrednica bila profesorica iz matematike. Ona me uspješno zainteresirala za matematiku svojim načinom predavanja te organiziranjem raznih kvizova na satovima razredne zajednice. U ovoj školi sam pokazivao talent za matematiku i prirodne znanosti (fiziku, kemiju, biologiju) te sam u ovim predmetima bio uspješan.

Nakon završetka osnovnog obrazovanja sam upisao srednju školu "1. tehnička škola tesla" u Zagrebu. Profesor koji mi je predavao fiziku je bio izvrstan i zanimljiv predavač te me uspio dodatno motivirati i zainteresirati za učenje fizike. Ova škola je imala i veliki broj računalnih predmeta te je u meni uspjela probuditi interes za programiranjem. U 4. razredu sam sudjelovao na natjecanje iz informatike "Infokup" te sam dospio do županijskog dijela natjecanja. Naposljetku sam i kao temu završnog rada odabrao izradu znanstvenog kalkulatora u programu "Visual Basic".

Upravo zbog svojih interesa sam odlučio studirati na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu sveučilišta u Zagrebu. Prakse iz matematike sam odradio u OŠ Dobriše Cesarića i III. gimnaziji u Zagrebu, a praksu iz fizike u XV. gimnaziji u Zagrebu. Zadovoljan sam sveukupnim uspjehom na praksi i ostalim kolegijima na PMF-u. Tijekom studiranja na PMF-u sam se zainteresirao za modernu fiziku te sam iz tog razloga odabrao temu diplomskog rada u području kvantne fizike. Završetak studiranja vidim kao novi početak u životu.