

EDITORA

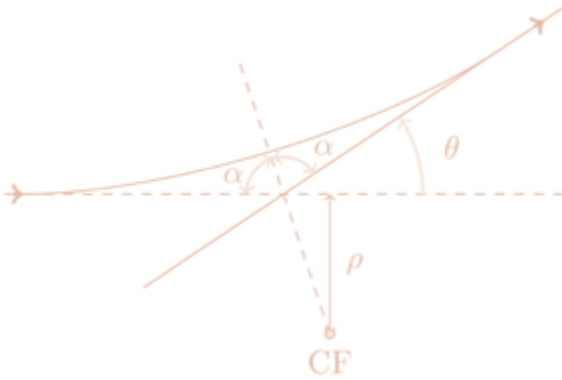


UnB

# Tópicos de Mecânica Clássica e Teoria de Grupos

Hugo Nicolas Nazareno,  
Paulo Eduardo de Brito e  
Márcio Sampaio Gomes Filho





$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & k & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}$$



**Universidade de Brasília**

**Reitora**  
**Vice-Reitor**

Márcia Abrahão Moura  
Enrique Huelva

EDITORA



**UnB**

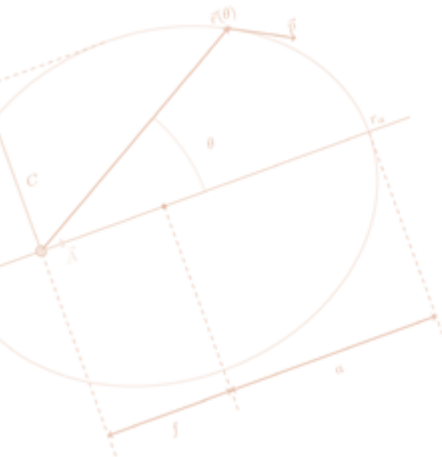
**Diretora**

Germana Henriques Pereira

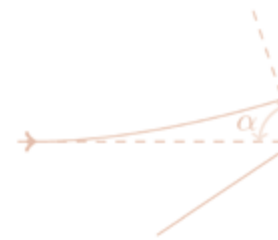
**Conselho editorial**

Germana Henriques Pereira (Presidente)  
Fernando César Lima Leite  
Ana Flávia Magalhães Pinto  
César Lignelli  
Flávia Millena Biroli Tokarski  
Liliane de Almeida Maia  
Maria Lidia Bueno Fernandes  
Mônica Celeida Rabelo Nogueira  
Roberto Brandão Cavalcante  
Sely Maria de Souza Costa  
Wilsa Maria Ramos

$$= \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & k & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}$$



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & k & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}$$



EDITORA



UnB

$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}$$

# Tópicos de Mecânica Clássica e Teoria de Grupos

Hugo Nicolas Nazareno,  
Paulo Eduardo de Brito e  
Márcio Sampaio Gomes Filho



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}$$

**Coordenação de produção editorial**  
**Assistência em editoração**  
**Revisão**  
**Diagramação**

**Equipe editorial**

Marília Carolina de Moraes Florindo  
Lara Perpétuo dos Santos  
Talita Guimarães Sales Ribeiro  
Paulo Eduardo de Brito

© 2018 Editora Universidade de Brasília

Direitos exclusivos para esta edição:  
Editora Universidade de Brasília  
SCS, quadra 2, bloco C, nº 78, edifício OK,  
2º andar, CEP 70302-907, Brasília, DF  
Telefone: (61) 3035-4200  
Site: [www.editora.unb.br](http://www.editora.unb.br)  
E-mail: [contatoeditora@unb.br](mailto:contatoeditora@unb.br)

Todos os direitos reservados. Nenhuma parte desta  
publicação poderá ser armazenada ou reproduzida por  
qualquer meio sem a autorização por escrito da Editora.

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade de Brasília

---

Nazareno, Hugo Nicolas.

Tópicos de mecânica clássica e teoria de grupos / Hugo  
Nicolas Nazareno, Paulo Eduardo de Brito e Márcio Sampaio  
Gomes Filho. – Brasília : Editora Universidade de Brasília, 2022.  
116 p. ; 23 cm. – (Série ensino de graduação).

Inclui bibliografia.  
ISBN 978-65-5846-140-1.

1. Mecânica. 2. Teoria dos grupos. I. Brito, Paulo Eduardo de.  
II. Gomes Filho, Márcio Sampaio. III. Título. IV. Série.

CDU 531/534

---



Associação Brasileira  
das Editoras Universitárias



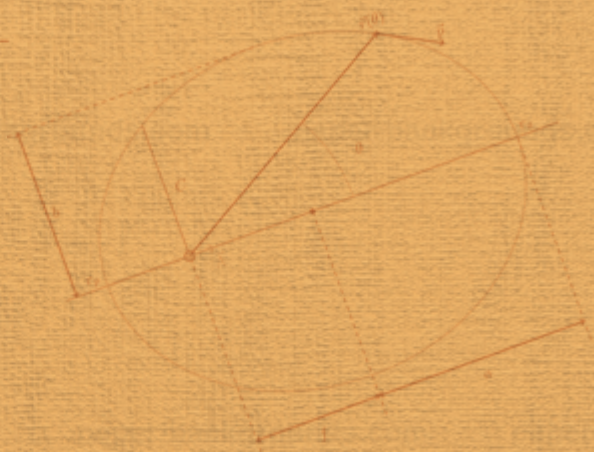
*Para Norma, Irene, Claudio e Susan*

*Para Petruza, Pedro e Ana Paula*

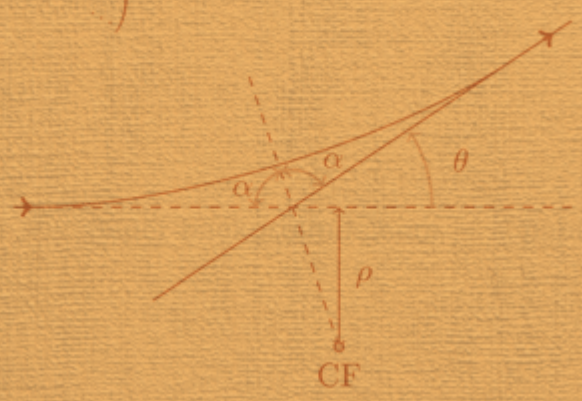
*Para Márcio, Marizete, Rayra e Andressa*



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots + \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots + \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots + \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$

## Prefácio

Este livro é a culminação de nossas conversas mantidas ao longo de meses no Centro Internacional de Física da Matéria Condensada. A ideia foi compartilhar as experiências reunidas por físicos de três gerações: por um lado, um professor aposentado, mas ativo em pesquisa, de outro, um professor em atividade plena e por último um excelente aluno de doutorado. Nosso projeto então focou-se em analisar os temas ausentes ou que deviam enfatizar-se nos cursos de graduação em Física.

Como resultado, decidimos que era necessário mostrar a relevância dos temas tais como:

- O vetor de Lenz, uma constante de movimento, além do momento angular e a energia, no problema de Kepler,
- Analisar o espalhamento clássico dada sua importância na determinação da estrutura dos átomos.
- A formulação muito elegante de Hamilton Jacobi da Mecânica Clássica que por sua vez levou à equação mestra da Teoria Quântica, e finalmente
- a Teoria de Grupos (TG) que é uma ferramenta muito útil para obter resultados para sistemas que possuem simetrias. A análise das degenerações dos níveis de energia é claramente obtida por meio da TG, uma vez que os cálculos são grandemente simplificados.

Nosso principal desejo é que por meio do estudo desses temas possa ser aprimorada a formação dos estudantes de física, assim como os motivar para o emprego dessas técnicas em projetos de pesquisa.

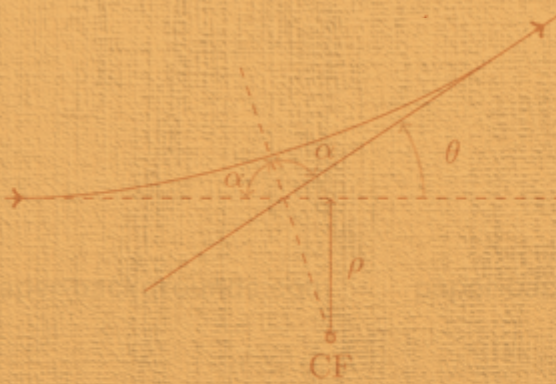
Brasília, dezembro de 2019

Hugo Nicolas Nazareno, Paulo Eduardo de Brito  
e Márcio Sampaio Gomes Filho.

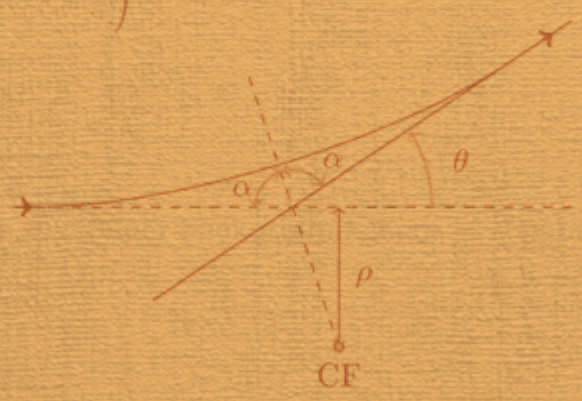




$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$

# Sumário

## Parte A Tópicos de Mecânica Clássica

<b>Introdução à Parte A</b> .....	13
<b>1 Vetor de Laplace-Runge-Lenz e o problema de Kepler</b> .....	14
1.1 Definição e história .....	14
1.1.1 Constante de movimento .....	15
1.1.2 Conexão com a energia e a órbita da partícula .....	16
<b>2 Espalhamento Clássico</b> .....	20
2.1 Definição e história .....	20
2.2 Seção eficaz diferencial de espalhamento .....	23
2.2.1 Caso Coulombiano: fórmula de Rutherford .....	24
<b>3 Formulação de Hamilton-Jacobi da Mecânica Clássica</b> .....	28
3.1 Introdução .....	28
3.2 Transformações canônicas .....	29
3.2.1 Trabalhando com $G$ .....	31
3.2.2 Transformação que promove $\mathcal{H}$ constante .....	32
3.2.3 Sistemas conservativos .....	33
3.2.4 Separação de variáveis .....	34
3.2.5 Exemplos de campos conservativos .....	36
3.2.6 O problema de Kepler na formulação de Hamilton-Jacobi .....	37

## Parte B Teoria de Grupos

<b>Introdução à Parte B</b> .....	45
<b>4 Tópicos de Teoria de Grupos e sua aplicação a estados eletrônicos em sistemas cristalinos</b> .....	46
4.1 Definição de grupo .....	47
4.2 Grupos abelianos .....	47
4.3 Grupos não-abelianos .....	48
4.4 Rotações e a notação de Schoenflies .....	48
4.5 Grupos cíclicos .....	50
4.6 Subgrupos e classes laterais .....	51
4.7 Exemplos de grupos finitos .....	53
4.8 Elementos conjugados e classes .....	53
4.9 Subgrupo invariante e grupo fator .....	54



4.10	Isomorfismo e homomorfismo .....	55
4.11	Teoria de representações .....	56
4.12	Representações Redutíveis e Irredutíveis .....	57
4.13	Lemas fundamentais da teoria de representações .....	58
4.13.1	Lema 1 .....	58
4.13.2	Lema 2 (Lema de Schur) .....	60
4.13.3	Lema 3 .....	62
4.14	Grande Teorema de Ortogonalidade .....	64
4.15	Caráter de uma representação .....	68
4.16	Tabela de caracteres .....	69
4.17	Segunda relação de caracteres .....	71
4.18	Construção de tabelas de caracteres .....	72
4.19	Decomposição de representações redutíveis .....	73
4.20	A representação regular .....	74
4.21	Operadores de transformação .....	77
4.21.1	Grupo da Equação de Schrödinger .....	80
4.22	Funções de base para representações irredutíveis .....	81
4.23	Grupos abelianos .....	85
4.24	Estrutura cristalinas e o Teorema de Bloch .....	86
4.24.1	Teorema de Bloch .....	87
4.25	Funções de base e operadores de projeção .....	94
4.26	Grande Teorema dos Elementos da Matriz.....	100
4.27	Produto direto de grupos e suas representações.....	103
4.28	Inclusão do spin .....	110
<b>Referências bibliográficas .....</b>		<b>113</b>

**Parte A**

---

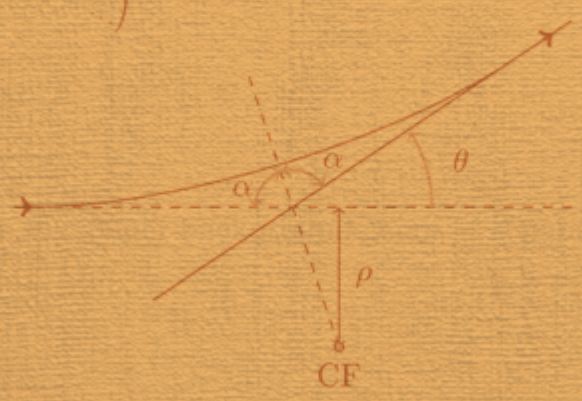
**Tópicos de Mecânica Clássica**



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$

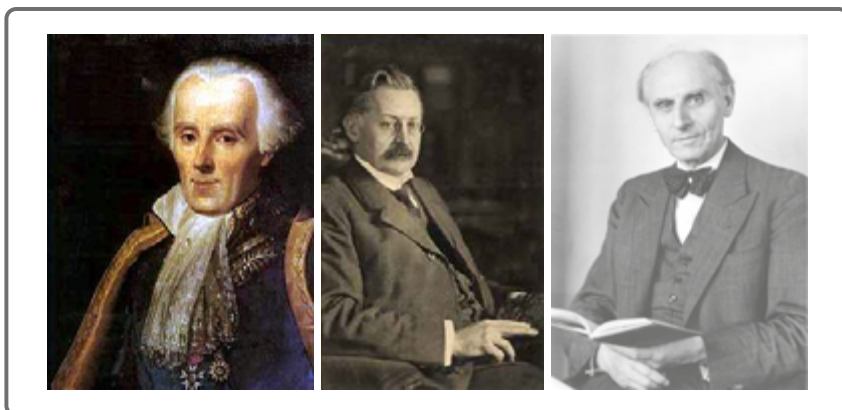
## Introdução à Parte A

Esta primeira parte do livro trata de certos problemas de Mecânica Clássica que merecem atenção especial no desenvolvimento de um curso. No primeiro capítulo é abordada a análise do vetor de Laplace-Runge-Lenz (LRL) no estudo do problema de Kepler, força central coulombiana. Nos livros clássicos usualmente é tratada apenas a conservação da Energia e do Momento Angular. Neste trabalho é feito o estudo mais detalhado do vetor LRL, uma outra constante de movimento ou invariante temporal desse problema, tal que permite descrever toda a dinâmica desse potencial coulombiano atrativo sem necessitar resolver a equação diferencial do problema. O problema de espalhamento de Rutherford é o tema do segundo capítulo, obtendo-se como principal resultado a seção eficaz diferencial de espalhamento; por meio da análise dessa magnitude é possível inferir sobre a estrutura dos núcleos atômicos. O terceiro capítulo aborda a teoria de Hamilton Jacobi. Trata-se da culminação das teorias da Mecânica Clássica por meio de um tratamento matemático muito elegante que, ao descrever a Física Clássica, possibilitou a formulação de uma das equações básicas da Mecânica Quântica. Em particular é abordado novamente o problema de Kepler por meio dessa formulação. Desta maneira, os três capítulos desta parte abordam diferentes aspectos relacionados a um mesmo e relevante potencial na Física.

# 1 Vetor de Laplace-Runge-Lenz e o problema de Kepler

*E pur si muove.*  
Galileo Galilei

**Imagem 1:** Pierre-Simon Laplace (França, 1749-1827), Carl David Tolmé Runge (Alemanha, 1856-1927), e Wilhelm Lenz (Alemanha, 1888-1957).



Fontes: [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Pierre-Simon\\_Laplace.jpg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Pierre-Simon_Laplace.jpg);  
<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:CarleRunge.jpg>;  
[https://academictree.org/photo/007/cache.071\\_037.Wilhelm\\_Lenz.jpg](https://academictree.org/photo/007/cache.071_037.Wilhelm_Lenz.jpg);

## 1.1 Definição e história

Em geral, em um problema de potencial central,  $V(r)$ , existem *a priori* as seguintes constantes de movimento: a energia  $E$  e o momento angular  $L$ . Como consequência, o movimento tem lugar no plano perpendicular a  $L$ . Um caso particular é o da lei de força inversamente proporcional ao quadrado da distância:

$$V(r) = -\frac{K}{r} \quad (1.1)$$

apresenta uma ulterior variável dinâmica *invariante temporal*, o vetor de Laplace-Runge-Lenz (LRL) que será introduzido na continuação. É



interessante fazer a conexão com o caso quântico onde, por exemplo, no átomo de hidrogênio temos degenerescências adicionais, isto é, autoestados com diferentes autovalores  $l$  do momento angular possuem a mesma energia. O vetor em questão é definido pela seguinte equação:

$$\mathbf{A} = \frac{\mathbf{r}}{r} + \frac{\mathbf{L} \times \mathbf{p}}{Km}, \quad (1.2)$$

onde  $\mathbf{r}$  é o vetor posição,  $r \equiv |\mathbf{r}|$  o módulo do vetor posição,  $\mathbf{p}$  é o momento linear e  $K$  é uma constante.

A história da designação do vetor LRL é muito interessante. Uma exposição do vetor de LRL é exposta por Heintz (1974). E, em continuação a essa exposição, um par de notas produzidas pelo professor Herbert Goldstein no *American Journal of Physics* (GOLDSTEIN, 1976) nos proveem dados históricos referidos a esse problema.

No final do século XVIII, Laplace et al. (1798-1799) demonstraram a existência das seguintes integrais de movimento para o problema que nos ocupa, sendo estas constantes: o momento angular  $\mathbf{L}$ , a energia e o vetor LRL. Os trabalhos posteriores de Hamilton (1847), Runge (1919) e Lenz (1924) mostraram também que as ditas variáveis dinâmicas eram invariantes temporais para uma lei de força atrativa inversamente proporcional ao quadrado da distância. É mister destacar que Pauli (1926) usou o vetor LRL para obter os níveis de energia do átomo de hidrogênio em Mecânica Quântica. Abers (2004) também apresentou o uso do vetor LRL para o tratamento dos níveis de energia do átomo de hidrogênio. Na literatura, é frequentemente usado o nome de Lenz para designar o vetor, sendo também comumente citado com o nome de Runge-Lenz.

### 1.1.1 Constante de movimento

O vetor LRL é uma constante de movimento além do momento angular  $\mathbf{L}$ , o qual permanece constante para qualquer problema de força central. A introdução do vetor LRL permite obter a trajetória de um corpo celeste sob a ação de uma força atrativa cuja energia potencial é dada pela equação (3.52).

Pela definição, ao se fazer a análise dimensional, verifica-se imediatamente que  $\mathbf{A}$  é uma quantidade adimensional. Além disso, é fácil mostrar que  $\mathbf{A}$  está no plano do movimento. Com efeito,  $\mathbf{L}$  é perpendicular ao plano da trajetória, portanto, fazendo o produto escalar  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{L}$ , temos:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{L} = \left( \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \cdot \mathbf{L} + \left[ \frac{\mathbf{L} \times \mathbf{p}}{Km} \right] \cdot \mathbf{L}, \quad (1.3)$$

os dois termos da direita são nulos, o primeiro termo por ser  $\mathbf{L}$  perpendicular ao plano, ou seja, ao vetor  $\mathbf{r}$ , o segundo termo pelo fato de o produto vetorial resultar em um vetor perpendicular ao momento angular.

Na continuação mostramos que  $\mathbf{A}$  é um invariante temporal, isto é,

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \mathbf{0}. \quad (1.4)$$

Efetuada a derivada temporal:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{A}}{dt} &= \frac{\mathbf{v}}{r} - \frac{\mathbf{r}}{r^2} \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{r})}{r} + \frac{\mathbf{L} \times \dot{\mathbf{p}}}{Km} \\ &= \frac{\mathbf{v}}{r} - \frac{\mathbf{r}}{r^2} \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{r})}{r} - \frac{\mathbf{L}}{Km} \times \frac{K\mathbf{r}}{r^3}, \end{aligned} \quad (1.5)$$

onde usamos que  $\dot{r} = \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}}{r}$  e o fato de que o momento angular é uma constante de movimento, então  $\dot{\mathbf{L}} = \mathbf{0}$ . Além disso, utilizamos a expressão para a força:

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \dot{\mathbf{p}} \\ &= -\frac{dV(r)}{dr} \hat{\mathbf{r}} \\ &= -\frac{K}{r^3} \mathbf{r}. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Utilizando a expressão para o produto vetorial duplo:

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} \times \mathbf{c} = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}), \quad (1.7)$$

finalmente encontramos que:

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{\mathbf{v}}{r} - \mathbf{r} \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{r})}{r^3} - \frac{\mathbf{v}}{r} + \mathbf{r} \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{r})}{r^3} = \mathbf{0}, \quad (1.8)$$

portanto o vetor LRL é uma constante de movimento (invariante temporal).

### 1.1.2 Conexão com a energia e a órbita da partícula

Na continuação veremos que o vetor de LRL possui a completa informação para determinar a órbita da partícula no plano. Primeiramente,

mostramos a conexão do módulo do vetor com a energia

$$\begin{aligned}
 \|\mathbf{A}\| &= A_x^2 + A_y^2 \\
 &= \left[ \frac{x}{r} - \frac{Lp_y}{Km} \right]^2 + \left[ \frac{y}{r} + \frac{Lp_x}{Km} \right]^2 \\
 &= 1 + \left( \frac{L}{Km} \right)^2 (p_x^2 + p_y^2) + \frac{2L}{rKm} (yp_x - xp_y).
 \end{aligned} \tag{1.9}$$

Como  $L = xp_y - yp_x$ , temos:

$$\|\mathbf{A}\| = 1 + \left( \frac{L}{Km} \right)^2 (p_x^2 + p_y^2) - \frac{2L^2}{rKm}. \tag{1.10}$$

Considerando a expressão:  $E = \frac{\|\mathbf{p}\|^2}{2m} - \frac{K}{r}$ , ou  $E + \frac{K}{r} = \frac{\|\mathbf{p}\|^2}{2m}$ , obtemos

$$\|\mathbf{A}\| = 1 + \frac{L^2}{K^2m^2} \left[ 2m \left( E + \frac{K}{r} \right) - \frac{2Km}{r} \right]. \tag{1.11}$$

Finalmente, temos a requerida relação entre o módulo do vetor LRL e a energia:

$$\|\mathbf{A}\| = 1 + \frac{2L^2E}{K^2m}. \tag{1.12}$$

Agora vamos encontrar a trajetória da partícula, fazendo o produto escalar entre o vetor  $\mathbf{A}$  e o vetor posição  $\mathbf{r}$ , então:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A} \cdot \mathbf{r} &= \left( \frac{\mathbf{r}}{r} + \frac{\mathbf{L} \times \mathbf{p}}{Km} \right) \cdot \mathbf{r} \\
 &= r + \frac{\mathbf{L} \times \mathbf{p}}{Km} \cdot \mathbf{r} \\
 &= r + \frac{L}{Km} (-xp_y + yp_x) \\
 &= r - \frac{L^2}{Km} \\
 &= Ar \cos(\theta).
 \end{aligned} \tag{1.13}$$

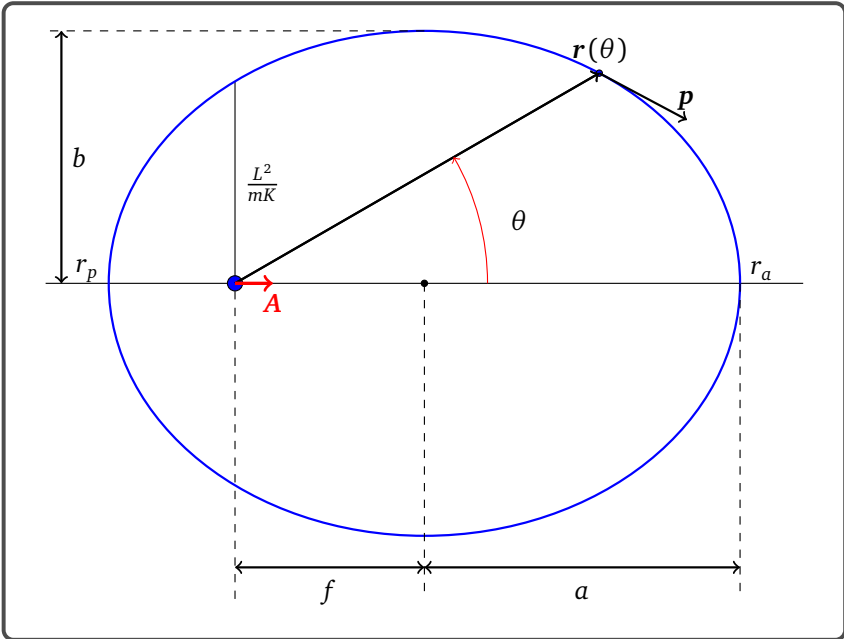
Isolando  $r$ , encontramos a trajetória da partícula, que é expressa por:

$$r = \frac{L^2/Km}{1 - A \cos(\theta)}, \tag{1.14}$$

temos assim uma trajetória descrita por uma elipse, onde um dos focos é o centro de força. Desse modo, queremos destacar que a trajetória foi obtida

sem precisar integrar as equações de movimento. Na Figura 1 é mostrado o vetor LRL e a trajetória da partícula.

**Figura 1:** Trajetória descrita pela partícula, em vermelho o vetor LRL;  $r_a$  e  $r_p$  indicam distância ao centro de força do afélio e periélio, respectivamente.



Fonte: elaboração própria

Vamos mostrar que a excentricidade da elipse é igual ao módulo do vetor  $\mathbf{A}$ . Hamilton chamou  $A$  de vetor excentricidade (*eccentricity vector*).

Levando em consideração a equação da trajetória (3.81), a distância máxima, *afélio*, ( $\theta = 0$ ) e mínima, *perihélio* ( $\theta = \pi$ ), ao centro de força, são dadas por:

$$r_a = \frac{L^2}{Km} \frac{1}{1-A} \quad (1.15)$$

e

$$r_p = \frac{L^2}{Km} \frac{1}{1+A}. \quad (1.16)$$

A excentricidade,  $\epsilon$ , é determinada pela seguinte relação:

$$\epsilon = \frac{r_a - r_p}{r_a + r_p}, \quad (1.17)$$

sendo

$$r_a + r_p = \frac{L^2}{Km} \left[ \frac{1}{1-A} + \frac{1}{1+A} \right] \quad (1.18)$$

e

$$r_a - r_p = \frac{L^2}{Km} \left[ \frac{1}{1-A} - \frac{1}{1+A} \right], \quad (1.19)$$

então

$$\epsilon = A. \quad (1.20)$$

Consideremos uma trajetória circular que corresponde à mínima energia clássica. Nesse caso,  $\dot{r} = 0$ , então vamos encontrar o valor de  $r$  que minimiza a energia, o qual denotaremos como  $r_0$ .

Sendo a expressão da energia:

$$E = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) - \frac{K}{r}, \quad (1.21)$$

a equação que a minimiza é

$$\frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{m}{2} r^2 \dot{\theta}^2 - \frac{K}{r} \right) = 0, \quad (1.22)$$

sendo  $L = mr^2\dot{\theta}$ , então  $r^2\dot{\theta} = \frac{L}{m}$  e  $\dot{\theta} = \frac{L}{mr^2}$ , temos que:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{2} \frac{L^2}{mr^2} - \frac{K}{r} \right) = -\frac{L^2}{mr^3} + \frac{K}{r^2} = 0. \quad (1.23)$$

Temos assim que

$$r_0 = \frac{L^2}{Km}, \quad (1.24)$$

e usando o teorema do Virial, isto é,  $\langle E \rangle = V(r_0)/2$ , que para nosso problema assume a expressão:

$$E(r_0) = -\frac{K}{2r_0} = -\frac{K^2 m}{2L^2}, \quad (1.25)$$

levando essa expressão à equação (1.12), resulta que a norma, que é a excentricidade da órbita, é identicamente nula, como corresponde a uma trajetória circular.



## 2 Espalhamento Clássico

*Disobedience, in the eyes of any one who has read history, is man's original virtue. It is through disobedience that progress has been made, through disobedience and through rebellion.*

Oscar Wilde

**Imagem 2:** Sir Joseph John Thomson (Inglaterra, 1856-1940) e Lord Ernest Rutherford (Nova Zelândia, 1871-1937)



Fonte: <https://www.sciencehistory.org/historical-profile/joseph-john-j-j-thomson>

### 2.1 Definição e história

Ao redor de 1910 já era conhecido o fato de os átomos conterem elétrons, partículas de carga negativa e massa muito pequena, desprezível

comparada com a massa do átomo. Como os átomos são neutros, devem possuir também uma carga positiva que neutraliza a carga devida aos elétrons. Em consequência, a massa do átomo deve estar associada a uma carga positiva. J. J. Thomson propôs um modelo atômico segundo o qual os elétrons estariam imersos dentro de uma densidade uniforme de carga positiva. Uma tal carga positiva contida numa esfera de raio aproximadamente  $10^{-14}$  m. Os elétrons no modelo de Thomson estavam inseridos na esfera de carga positiva como as uvas passas em um panetone.

O modelo de Thomson foi questionado por Ernest Rutherford, um ex-estudante dele que, experimentando com partículas  $\alpha$ , tinha evidência de que a carga positiva dentro de um átomo estava muito concentrada numa região, o *núcleo*, no centro do átomo. Assim teve nascimento esta importante área da Física: a *Física Nuclear*. Uma porcentagem muito pequena de partículas  $\alpha$  sofria espalhamento a grandes ângulos. Uma clara indicação do tamanho muito reduzido do núcleo.

Experimentos anteriores realizados em 1909 por Geiger e Marsden (1909) mostraram que aproximadamente uma em 8000 partículas  $\alpha$  sofria deflexão a grandes ângulos. Dois anos depois, Rutherford comprovou via teoria de espalhamento que a ideia de o núcleo atômico ser muito concentrado era o correto a ser assumido acerca da extensão espacial do mesmo.

Basicamente, todo experimento de Física envolve um experimento de espalhamento (*scattering*). Daí a importância decisiva que tem o estudo do espalhamento, tanto na Física Clássica, quanto na Física Quântica.

A determinação da natureza das forças entre partículas é o principal objetivo de um experimento de espalhamento. Isto é, a partir do experimento pode-se inferir as forças (esse é o problema inverso do potencial). Uma vez conhecidas as forças, podemos predizer o resultado de um dado experimento.

Como um dos experimentos mais importantes de espalhamento, deve-se destacar o realizado pelo Lord Rutherford, quando "atirava" partículas  $\alpha$  contra uma lâmina de ouro delgada e observava, assim, as partículas  $\alpha$  defletidas pelos átomos que constituíam a lâmina de ouro. Isso foi realizado em 1911 e levou à determinação da estrutura dos núcleos de raio  $r_o \lesssim 10^{-12}$  cm.

Portanto, esse foi um passo mais que decisivo para o entendimento do que, naquele momento da história, era considerado o "tijolo" elementar que constitui a matéria. Basicamente, um experimento de espalhamento consta de um fluxo de partículas que saem disparadas de uma fonte, possuem energia bem definida e são espalhadas por centros dispersivos.

Nesse contexto, analisaremos forças centrais, isto é, para um potencial central,  $V \equiv V(r)$ , a força é dada por:

$$\mathbf{F} = -\left(\frac{dV}{dr}\right)\hat{\mathbf{r}}. \quad (2.1)$$

Nesse caso, para forças centrais, o momento angular é uma constante de movimento, isto é,  $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{r} \times \mathbf{F} = 0 \implies L = Cte$ .

Além dessas condições, estão fixados:

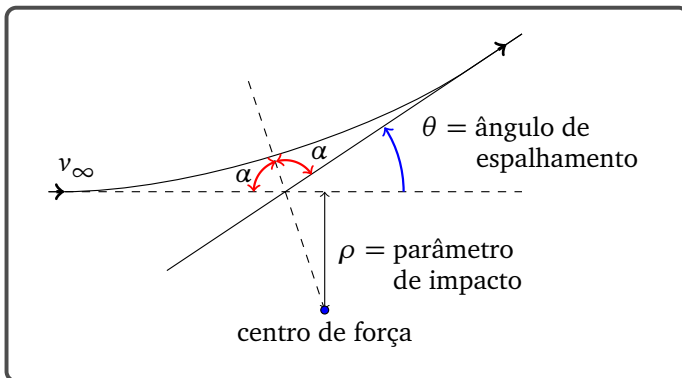
$$L = mv_{\infty}\rho \quad (2.2)$$

e

$$E = \frac{m}{2}v_{\infty}^2. \quad (2.3)$$

Sendo que o ângulo de espalhamento  $\theta$  depende, para uma dada energia  $E$  fixada, do parâmetro de impacto  $\rho$ . Quanto mais longe passa a partícula, menor é o desvio que ela sofre e, quanto mais perto, maior é o seu desvio. Em um tal experimento, colocam-se contadores ou placas fotográficas a distâncias grandes, de modo que  $V \approx 0$ , então registra-se o número de partículas espalhadas em função do ângulo de espalhamento. Como ilustração, veja a Figura 2:

**Figura 2:** Desvio de uma partícula incidente sob a ação de uma força central. A partícula vem de uma distância  $\rho$  do centro de força e desvia um ângulo  $\theta$  do mesmo.



Fonte: elaboração própria

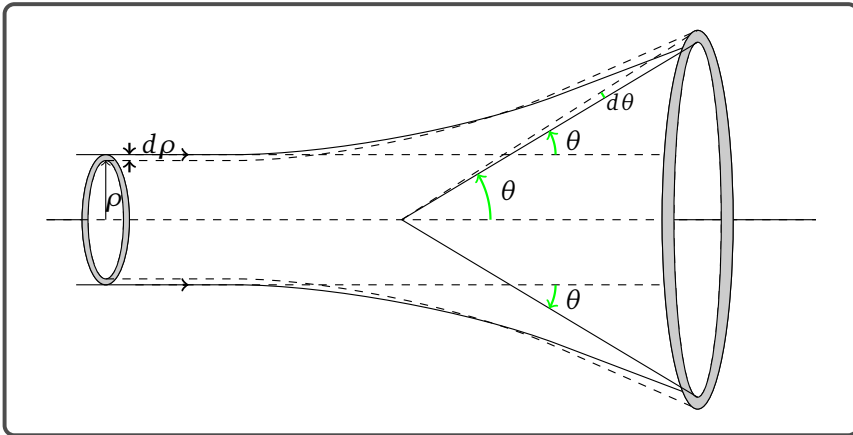
## 2.2 Seção eficaz diferencial de espalhamento

Vamos estabelecer a definição de seção eficaz diferencial de espalhamento da seguinte maneira: Seja  $J$  o fluxo de partículas incidentes, o número de partículas que atravessam, numa unidade de tempo, a unidade de área transversal à incidência das partículas. Assim, definimos:

$$d\sigma(\theta) = \frac{\text{N}^\circ \text{ PARTÍCULAS ESPALHADAS NO ÂNGULO SÓLIDO } (\theta, d\theta)}{\text{FLUXO INCIDENTE}}$$

As partículas espalhadas segundo o ângulo sólido  $(\theta, d\theta)$  são as que atravessam a coroa circular de superfície  $2\pi\rho d\rho$ . Veja a Figura 3

**Figura 3:** Seção eficaz diferencial de espalhamento.



Fonte: elaboração própria

Assim o número de partículas espalhadas é  $J2\pi\rho d\rho$ . Daí se deduz que

$$d\sigma(\theta) = 2\pi\rho d\rho. \quad (2.4)$$

Dependendo do tipo de forças, teremos  $\rho = \rho(\theta)$ , então

$$d\sigma(\theta) = 2\pi\rho \left| \frac{d\rho}{d\theta} \right| d\theta. \quad (2.5)$$

Portanto, o *espalhamento* clássico fica determinado quando conhecemos a equação

$$\rho = \rho(\theta), \quad (2.6)$$

que conecta o parâmetro de impacto com o ângulo de espalhamento.

A fórmula derivada (2.5) é completamente geral, para qualquer tipo de força, com a restrição de que se trate de força central. Isso determina o fato de ser a seção eficaz função somente de  $\theta$ , e não de  $\phi$  ( $\phi =$  ângulo azimutal).

### 2.2.1 Caso Coulombiano: fórmula de Rutherford

Temos de particularizar agora o Caso Coulombiano (veja Figura 4), que era o problema de Rutherford. No caso repulsivo, nós tínhamos as trajetórias hiperbólicas dadas por:

$$r = \frac{a(\epsilon^2 - 1)}{-1 + \epsilon \cos(\phi)}, \quad (2.7)$$

(vide equação 3.245 (SYMON, 1971))

A mínima distância ao centro de forças é

$$r_{min} = a + a\epsilon = a(\epsilon + 1). \quad (2.8)$$

$\alpha$  é o ângulo para qual o  $r \rightarrow \infty$ , então

$$\cos(\alpha) = \frac{1}{\epsilon}, \quad (2.9)$$

sendo

$$2\alpha + \theta = \pi, \quad (2.10)$$

isto é,

$$\frac{\theta}{2} = \frac{\pi}{2} - \alpha, \quad (2.11)$$

assim

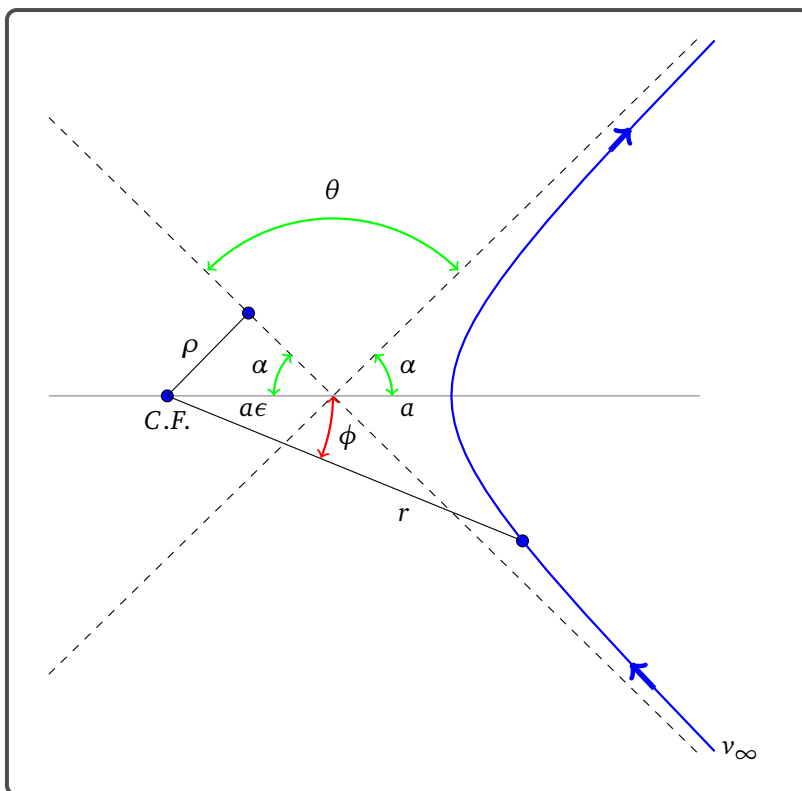
$$\operatorname{tg}\left(\frac{\theta}{2}\right) = \operatorname{cotg}(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 - 1}}. \quad (2.12)$$

Como

$$\epsilon = \sqrt{1 + \frac{2EL^2}{mK^2}}, \quad (2.13)$$

então

**Figura 4:** Espalhamento hiperbólico coulombiano.



Fonte: elaboração própria

$$\begin{aligned} \operatorname{tg}\left(\frac{\theta}{2}\right) &= \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2EL^2}{mK^2} - 1}} \\ &= \sqrt{\frac{mK^2}{2EL^2}}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Agora, é só substituir L pelas expressões que contêm  $\rho$ :

$$\begin{aligned} \operatorname{tg}\left(\frac{\theta}{2}\right) &= \sqrt{\frac{mK^2}{2Em^2v_\infty^2\rho^2}} \\ &= \frac{K}{2E\rho} \end{aligned} \quad (2.15)$$

ou

$$\rho = \frac{K}{2E} \cotg\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (2.16)$$

Daí, vemos que,

$$\text{se } \begin{cases} \rho \rightarrow 0, & \theta \rightarrow \pi(\text{frontal}) \\ \rho \rightarrow \infty, & \theta \rightarrow 0(\text{somente com } \rho = \infty \text{ não há espalhamento}). \end{cases}$$

Portanto, o *espalhamento* coulombiano é de muito longo alcance. Apliquemos agora a expressão geral (2.5):

$$\begin{aligned} d\sigma &= 2\pi\rho \left| \frac{d\rho}{d\theta} \right| d\theta \\ &= \frac{2\pi K}{2E} \left( \cotg\frac{\theta}{2} \right) \frac{K}{2E} \frac{1}{2} \frac{1}{\text{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} d\theta \\ &= \frac{\pi K^2}{4 E^2} \frac{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\text{sen}^3\left(\frac{\theta}{2}\right)} d\theta \\ &= \frac{\pi K^2}{4 E^2} \frac{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\text{sen}^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} d\theta \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$\therefore d\sigma(\theta) = \frac{\pi K^2}{8E^2} \frac{\text{sen}(\theta)}{\text{sen}^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} d\theta. \quad (2.18)$$

Uma forma mais familiar em que é apresentada a fórmula de Rutherford consiste na introdução do diferencial do ângulo sólido (LANDAU; LIFSCHITZ, 1969):

$$d\Omega = 2\pi \text{sen}(\theta) d\theta, \quad (2.19)$$

assim obtemos:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{K^2}{16E^2} \frac{1}{\text{sen}^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}. \quad (2.20)$$

No Caso Coulombiano (cgs),  $K = q_1 q_2$ . É mister destacar que essa expressão do espalhamento obtida em Mecânica Clássica coincide exatamente com o resultado em Mecânica Quântica (LANDAU; LIFSCHITZ, 1981).

Como é que o experimento de Rutherford nos conduz à ideia de que a carga nuclear é muito concentrada? Primeiramente, o fato de que a maioria das partículas sofre pequenos espalhamentos, de modo que somente algumas voltam com  $\theta \approx \pi$ ; ou seja, colisão frontal é pouco frequente, o

que implica concentração de carga. Se jogamos uma partícula com  $\rho = 0$ , ela penetra até uma distância  $r_o$  tal que

$$\frac{q_1 q_2}{r_o} = E. \quad (2.21)$$

Ao aumentarmos a energia  $E$ , essa distância diminui, ou seja, a partícula penetra no domínio nuclear; mas, ali, as forças são de natureza diferente das coulombianas e, conseqüentemente, para essas partículas deve haver um desvio da relação obtida. Assim, aumentamos  $E$  até que se observe esse desvio. Quando esse desvio aparecer, para uma energia  $E = E_c$ , a relação

$$E_c = \frac{q_1 q_2}{r_o} \quad (2.22)$$

nos dará uma ideia do tamanho do núcleo.

Uma aproximação do tamanho do núcleo do ouro pode ser obtida por meio da fórmula:

$$E_c = \frac{q_\alpha q_{Au}}{r_o}. \quad (2.23)$$

Usando os seguintes valores para as variáveis:  $m_\alpha = 6,644 \times 10^{-30}$  g,  $q_\alpha = 9,606 \times 10^{-10}$  esu,  $q_{Au} = 379 \times 10^{-10}$  esu e  $v_\infty = 2 \times 10^9$  cm/s, obtemos

$$r_o = 2,7 \times 10^{-12} \text{ cm} = 27 \text{ fm}. \quad (2.24)$$

Até esta energia incidente  $E_c \sim 13,288$  erg, não foram observados desvios da fórmula de Rutherford obtida para um potencial do tipo  $1/r$ , ou seja, o raio  $r_o$  deveria ser menor ainda. Partículas incidentes de maior energia ( $E \gg E_c$ ) poderão penetrar até "tocar" o núcleo.



## 3 Formulação de Hamilton-Jacobi da Mecânica Clássica

*Lo que es bueno no pertenece a nadie sino al lenguaje de la tradición.*

Jorge Luis Borges

**Imagem 3:** Isaac Newton (Inglaterra, 1643-1727), Joseph-Louis Lagrange (Itália, 1736-1813) e William Rowan Hamilton (Irlanda, 1805-1865).



Fontes:

<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:GodfreyKneller-IsaacNewton-1689.jpg>;

[https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Lagrange\\_portrait.jpg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Lagrange_portrait.jpg);

[https://commons.wikimedia.org/wiki/](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:William_Rowan_Hamilton_portrait_oval_combined.png)

[File:William\\_Rowan\\_Hamilton\\_portrait\\_oval\\_combined.png](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:William_Rowan_Hamilton_portrait_oval_combined.png);

### 3.1 Introdução

Após a Mecânica Clássica adquirir o *status* de ciência por meio do monumental trabalho de Isaac Newton (1687) *Principia mathematica*, criou-se a Mecânica Analítica por meio da publicação do livro de Joseph-Louis Lagrange (1811), *Méchanique analytique*, e os trabalhos de William Rowan Hamilton (1834), onde ele apresentou o assim chamado Princípio de Hamilton.

A Mecânica Analítica é uma formulação da Mecânica com um conteúdo matemático muito elegante que culmina nas equações conhecidas pelos nomes dos autores, as equações de Lagrange e Hamilton, respectivamente. As primeiras são equações diferenciais de segunda ordem, enquanto as equações de Hamilton são de primeira ordem, mas em número duplo, e são chamadas de equações canônicas. Nesse formalismo os momentos são considerados como variáveis independentes, assim, o número de variáveis é o dobro dos graus de liberdade. A vantagem do formalismo de Hamilton é que transformações canônicas podem ser usadas para simplificar as equações de movimento. Por exemplo, uma transformação pode fazer com que todas as variáveis possam ser ignoradas.

O método de Hamilton-Jacobi apresenta uma técnica pela qual são obtidas as transformações canônicas, sendo o objetivo do presente trabalho apresentar tal formulação.

Recentemente, chegou ao nosso conhecimento um excelente trabalho de Török (2000), que explora a temática com muita propriedade.

### 3.2 Transformações canônicas

Tratam-se de transformações que, partindo de um conjunto de variáveis  $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ , conduzem a outro conjunto de variáveis dinâmicas  $(\mathbf{Q}, \mathbf{P})$ , de forma que as equações canônicas de movimento ficam invariadas pela transformação, daí o nome transformações canônicas.

As equações de movimento de Hamilton nas novas variáveis:

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P_i} \quad (3.1)$$

e

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q_i}, \quad (3.2)$$

onde:

$$\mathcal{H}(\mathbf{Q}, \mathbf{P}; t) = H + \frac{dG}{dt} \quad (3.3)$$

é o novo Hamiltoniano como função das novas variáveis e o do tempo.

Pelo princípio de Hamilton a evolução temporal de um sistema físico satisfaz:

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i; t) dt = 0. \quad (3.4)$$

A transformação de Legendre implica que

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - \mathcal{H}, \quad (3.5)$$

então a equação (3.4) se escreve:

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} \left[ \left( \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i \right) - H \right] dt = 0, \quad (3.6)$$

onde  $n$  é o número de graus de liberdade do sistema.

A invariância das equações de movimento permite escrever:

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} \left[ \left( \sum_{i=1}^n P_i \dot{Q}_i \right) - \mathcal{H} \right] dt = 0. \quad (3.7)$$

As equações (3.6) e (3.7) devem ser satisfeitas simultaneamente, assim os integrandos podem diferir numa derivada total de uma função  $G(\mathbf{q}, \mathbf{Q}; t)$ . A função  $G$  é chamada de função geratriz da transformação, e deve satisfazer as seguintes condições para ser a geradora de uma transformação canônica:

$$\left( \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i \right) - H = \left( \sum_{i=1}^n P_i \dot{Q}_i \right) - \mathcal{H} + \frac{dG}{dt}. \quad (3.8)$$

Com efeito:

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} \frac{dG}{dt} dt = \delta [G(q_i, Q_i; t_1) - G(q_i, Q_i; t_0)] = 0, \quad (3.9)$$

sendo que as variações nos pontos extremos são nulas.

Fazendo a derivada total da função  $G$ :

$$\frac{dG}{dt} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial G}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_{i=1}^n \frac{\partial G}{\partial Q_i} \dot{Q}_i + \frac{\partial G}{\partial t}, \quad (3.10)$$

e levando essa expressão na equação (3.8), temos:

$$\sum_{i=1}^n \left( p_i - \frac{\partial G}{\partial q_i} \right) \dot{q}_i = \sum_{i=1}^n \left( P_i + \frac{\partial G}{\partial Q_i} \right) \dot{Q}_i + H - \mathcal{H} + \frac{\partial G}{\partial t}, \quad (3.11)$$

essa equação é satisfeita se:

$$p_i = \frac{\partial G}{\partial q_i}, \quad (3.12)$$

$$P_i = -\frac{\partial G}{\partial Q_i} \quad (3.13)$$

e

$$\mathcal{H} = H + \frac{\partial G}{\partial t}. \quad (3.14)$$

Essas equações obtidas por meio de uma transformação canônica são a base do tratamento de um sistema dinâmico usando o formalismo de Hamilton-Jacobi.

Se a transformação não depende do tempo, então:

$$\mathcal{H}(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) = H(\mathbf{q}, \mathbf{p}). \quad (3.15)$$

Se o determinante jacobiano:

$$D\left(\frac{\partial^2 G}{\partial q_i \partial Q_i}\right) \neq 0, \quad (3.16)$$

podemos obter a transformação que liga as novas e velhas variáveis, de modo que  $Q_i = Q_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)$  e  $P_i = P_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)$ .

### 3.2.1 Trabalhando com $G$

Por se tratar de uma transformação canônica, o novo,  $\mathcal{H}$ , e o velho,  $H$ , estão conectados pela equação (3.3).

Escrevendo a equação (3.11) em forma diferencial:

$$\sum_{i=1}^n P_i dQ_i - \sum_{i=1}^n p_i dq_i = (\mathcal{H} - H)dt - dG. \quad (3.17)$$

O membro da direita é um diferencial total de uma função  $\Phi$ , então

$$\sum_{i=1}^n P_i dQ_i - \sum_{i=1}^n p_i dq_i = d\Phi. \quad (3.18)$$

Esta é uma condição necessária para que a transformação seja canônica. Além disso, se a transformação é independente do tempo,  $\mathcal{H} = H$ .

Portanto,  $d\Phi = -dG$ , então

$$\Phi = -G. \quad (3.19)$$

### 3.2.2 Transformação que promove $\mathcal{H}$ constante

Consideremos uma transformação canônica para a qual as novas coordenadas ( $\mathbf{Q}$ ) são ignoráveis, nesse caso o novo Hamiltoniano é:

$$\mathcal{H}(p_1, \dots, p_n; t) = H(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n; t) + \frac{\partial G}{\partial t}. \quad (3.20)$$

Se a transformação canônica faz com que  $\mathcal{H} = Cte$ , pode-se, em particular, escolher uma constante nula, assim temos:

$$H(q_i, p_i; t) + \frac{\partial G}{\partial t} = 0. \quad (3.21)$$

Das equações de movimento de Hamilton, temos  $\dot{Q}_i = 0$  e  $\dot{P}_i = 0$ , ou seja,

$$Q_i = \alpha_i \quad (3.22)$$

e

$$P_i = \beta_i, \quad (3.23)$$

onde  $\alpha_i$  e  $\beta_i$  são constantes.

Nesse caso especial, a função geratriz  $G$  que promove a transformação  $\mathcal{H} = 0$  será denotada por  $S(q_i, Q_i; t)$ .

Então, essa nova função geratriz deve satisfazer:

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i} \quad (3.24)$$

e

$$P_i = -\frac{\partial S}{\partial Q_i}. \quad (3.25)$$

Chegamos assim à equação de Hamilton-Jacobi:

$$H\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}; t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0, \quad (3.26)$$

onde fizemos a substituição no Hamiltoniano, a partir da equação (3.21), dos momentos  $p_i$  por  $\frac{\partial S}{\partial q_i}$ .

Dado que as novas coordenadas são constantes, a função geratriz é expressa como  $S \equiv S(q_1, \dots, q_n; \alpha_1, \dots, \alpha_n; t)$ . Então, trata-se de uma função de  $n + 1$  variáveis e  $n$  parâmetros constantes. Introduzindo os momentos conjugados  $\beta_i$  às coordenadas  $\alpha_i$ :

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i} \quad (3.27)$$

e

$$\beta_i = -\frac{\partial S}{\partial \alpha_i}. \quad (3.28)$$

Resolvendo essas  $2n$  equações podemos obter as expressões das coordenadas e dos momentos originais em função das novas  $\alpha_i$  e  $\beta_i$ , ou seja,  $q_i \equiv q_i(\alpha_i, \beta_i; t)$  e  $p_i \equiv p_i(\alpha_i, \beta_i; t)$ , assim mesmo, podemos encontrar as novas coordenadas e momentos em função das coordenadas e momentos originais  $\alpha_i = \alpha_i(q_i, p_i; t)$  e  $\beta_i = \beta_i(q_i, p_i; t)$ .

Para um tempo inicial  $t_0$ , teremos, por exemplo, as  $2n$  constantes de movimento  $\alpha_i = \alpha_i(q_i, p_i; t_0)$  e  $\beta_i = \beta_i(q_i, p_i; t_0)$ .

### 3.2.3 Sistemas conservativos

Sistemas conservativos para os quais o Hamiltoniano é independente do tempo, sendo uma constante de movimento, então  $H = E$ .

Retornando à equação de Hamilton-Jacobi (3.26) e substituindo o Hamiltoniano pela energia  $E$ , a equação resultante é:

$$E + \frac{\partial S}{\partial t} = 0, \quad (3.29)$$

de onde obtemos a função geratriz da transformação, sendo:

$$S = W - Et, \quad (3.30)$$

onde  $W$  é independente do tempo. Desse modo,

$$\frac{\partial S}{\partial q_i} = \frac{\partial W}{\partial q_i}. \quad (3.31)$$

Obtemos a seguinte expressão da equação de Hamilton-Jacobi (3.26) para sistemas conservativos:

$$H\left(q_i, \frac{\partial W}{\partial q_i}\right) = E, \quad (3.32)$$

essa expressão é conhecida como a *equação reduzida* de H-J.

Identificando a constante  $\alpha_n$  como a energia  $E$ , teremos, para os momentos:

$$\beta_n = -\frac{\partial S}{\partial \alpha_n} = -\frac{\partial(W - Et)}{\partial E} = -\frac{\partial W}{\partial E} + t, \quad (3.33)$$

onde  $W \equiv W(q_1, \dots, q_n; \alpha_1, \dots, \alpha_n; E)$ .

Desse modo, temos

$$p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i} \quad (3.34)$$

e

$$\beta_i = -\frac{\partial W}{\partial \alpha_i}, \quad (3.35)$$

para  $i = 1, \dots, n-1$ , e para um  $n$ , temos

$$\beta_n = -\frac{\partial W}{\partial E} + t. \quad (3.36)$$

### 3.2.4 Separação de variáveis

A equação de H-J constitui o ponto de partida de um método geral para integrar as equações canônicas de movimento.

Para certos casos é possível aplicar o método de separação de variáveis que permite transformar uma equação diferencial parcial em um conjunto de equações diferenciais ordinárias.

Os sistemas conservativos satisfazem  $S = W - Et$ . Se  $W$  é uma função apenas das coordenadas  $W(q_1, \dots, q_n)$ , então a função admite esta forma:

$$W(q_1, \dots, q_n) = \sum_{r=1}^n W_r(q_r), \quad (3.37)$$

isto é, as variáveis são separáveis.

Isso é possível para os casos em que o Hamiltoniano for escrito da seguinte forma:

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \sum_{r=1}^n H_r(q_r, p_r). \quad (3.38)$$

A equação reduzida de H-J se escreve:

$$H_1\left(q_1, \frac{dW_1}{dq_1}\right) + \dots + H_n\left(q_n, \frac{dW_n}{dq_n}\right) = E. \quad (3.39)$$

Se fizermos

$$H_1\left(q_1, \frac{dW_1}{dq_1}\right) = E - \sum_{r=2}^n H_r\left(q_r, \frac{dW_r}{dq_r}\right) \quad (3.40)$$

e substituirmos  $q_1$  por  $\tilde{q}_1$ , o segundo membro permanece igual, sendo que  $\tilde{q}_1$  é produto de uma transformação canônica de  $q_1$ . Isso mostra que  $H_1\left(q_1, \frac{dW_1}{dq_1}\right)$ , assim como os demais termos, são constantes.

Chamando

$$\alpha_r = H_r\left(q_r, \frac{dW_r}{dq_r}\right), \quad (3.41)$$

obtemos para a energia:

$$\sum_r \alpha_r = E. \quad (3.42)$$

Desse modo, temos que resolver  $n$  equações diferenciais ordinárias de primeira ordem:

$$H_r\left(q_r, \frac{dW_r}{dq_r}\right) = \alpha_r, \quad (3.43)$$

com  $r = 1, \dots, n$ .

Temos assim para a geratriz da transformação:

$$S = \sum_r W_r(q_r, \alpha_r) - Et, \quad (3.44)$$

as respectivas derivadas parciais

$$\frac{\partial S}{\partial q_i} = \frac{\partial W}{\partial q_i} \quad (3.45)$$

e

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha_i} = \frac{\partial W}{\partial \alpha_i} - \frac{\partial E}{\partial \alpha_i} t, \quad (3.46)$$

utilizando a equação (3.42), temos:

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha_i} = \frac{\partial W}{\partial \alpha_i} - t. \quad (3.47)$$

Em síntese, obtemos:

$$p_i = \frac{\partial W_i}{\partial q_i}, \quad (3.48)$$

onde  $p_i \equiv p_i(q_i, \alpha_i)$  e



$$\beta_i = -\frac{\partial S}{\partial \alpha_i} = -\frac{\partial W_i}{\partial \alpha_i} + t, \quad (3.49)$$

onde  $\beta_i \equiv \beta_i(q_i, \alpha_i)$ .

### 3.2.5 Exemplos de campos conservativos

Como um primeiro exemplo da aplicação da teoria de Hamilton-Jacobi, consideramos o seguinte Hamiltoniano de uma partícula sujeita ao potencial  $\mathcal{V}$  em coordenadas esféricas:

$$H = \frac{1}{2m} \left[ p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\phi^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right] + \mathcal{V}(r, \theta, \phi), \quad (3.50)$$

onde  $H \equiv H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ , sendo que  $\mathbf{q}$  e  $\mathbf{p}$  são as posições e momentos generalizados.

Para encontrar a equação de Hamilton-Jacobi, consideramos:

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}, \quad (3.51)$$

sendo  $i = (r, \theta, \phi)$ , e  $S$  a função geratriz da transformação. O potencial  $\mathcal{V}$ , por sua vez, pode ser expresso da seguinte forma:

$$\mathcal{V}(r, \theta) = C(r) + \frac{B(\theta)}{r^2}, \quad (3.52)$$

potencial separável, onde a coordenada  $\phi$  é ignorável.

Substituindo no Hamiltoniano (3.50) a equação (3.51) e (3.52),

$$\begin{aligned} H\left(\mathbf{q}, \frac{\partial W}{\partial \mathbf{q}}\right) &= \frac{1}{2mr^2} \left[ \left( \frac{dW_\theta}{d\theta} \right)^2 + 2mB(\theta) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left( \frac{dW_\phi}{d\phi} \right)^2 \right] \\ &+ \frac{1}{2m} \left( \frac{dW_r}{dr} \right)^2 + C(r) = E, \end{aligned} \quad (3.53)$$

onde utilizamos que, para sistemas conservativos,  $S = W - Et$ , então  $\frac{\partial S}{\partial q_i} = \frac{\partial W}{\partial q_i}$ , equação (3.31).

Considerando que a quantidade entre colchetes é igual a uma constante que chamaremos de  $\beta$ , temos:

$$\left( \frac{dW_\theta}{d\theta} \right)^2 + 2mB(\theta) + \frac{1}{\sin^2 \theta} p_\phi^2 = \beta, \quad (3.54)$$

e

$$\frac{1}{2m} \left( \frac{dW_r}{dr} \right)^2 + C(r) - E = -\frac{\beta}{2mr^2}, \quad (3.55)$$

onde o momento angular  $p_\phi = \frac{dW_\phi}{d\phi}$  é constante. Desse modo, temos que resolver duas equações diferenciais ordinárias não lineares:

A parte radial pode ser reescrita como:

$$\frac{dW_r}{dr} = \sqrt{2m[E - C(r)] - \frac{\beta}{r^2}} \quad (3.56)$$

e

$$\frac{dW_\theta}{d\theta} = \sqrt{-2mB(\theta) - \frac{1}{\text{sen}^2\theta} p_\phi^2 + \beta}. \quad (3.57)$$

### 3.2.6 O problema de Kepler na formulação de Hamilton-Jacobi

Seja o Hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2m} \left[ p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2} \right] - \frac{K}{r}, \quad (3.58)$$

a equação de H-J é expressa por:

$$\frac{1}{2m} \left[ \left( \frac{dW_r}{dr} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left( \frac{dW_\phi}{d\phi} \right)^2 \right] - \frac{K}{r} = E, \quad (3.59)$$

podendo ser reescrita na forma:

$$\left( \frac{dW_r}{dr} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left( \frac{dW_\phi}{d\phi} \right)^2 = 2m \left[ E + \frac{K}{r} \right]. \quad (3.60)$$

Como  $\frac{dW_\phi}{d\phi} = p_\phi$ , sendo  $p_\phi$  uma constante, então  $W_\phi = p_\phi \phi$ .

Nesse problema, temos duas constantes de movimento: a energia e o momento angular, que denotaremos por  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$ , respectivamente.

Reescrevendo a equação (3.60) em termos das novas constantes, temos:

$$\left( \frac{dW_r}{dr} \right)^2 = 2m \left[ \alpha_1 + \frac{K}{r} \right] - \frac{(\alpha_2)^2}{r^2}, \quad (3.61)$$

isto é,

$$\frac{dW_r}{dr} = \sqrt{2m \left[ \alpha_1 + \frac{K}{r} \right] - \left( \frac{\alpha_2}{r} \right)^2}, \quad (3.62)$$

então

$$\int dW_r = \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{2m \left[ \alpha_1 + \frac{K}{r} \right] - \left( \frac{\alpha_2}{r} \right)^2} dr. \quad (3.63)$$

Dessa maneira, podemos obter a função geratriz  $S$ :

$$\begin{aligned} S &= W_r(r) + W_\phi(\phi) - Et \\ &= \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{2m \left[ \alpha_1 + \frac{K}{r} \right] - \left( \frac{\alpha_2}{r} \right)^2} dr + W_\phi(\phi) - Et. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Tomando a derivada de  $S$  com respeito a  $\alpha_2$ , temos:

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha_2} = \frac{\partial}{\partial \alpha_2} \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{2m\alpha_1 + 2m\frac{K}{r} - \left( \frac{\alpha_2}{r} \right)^2} dr + \frac{\partial W_\phi}{\partial \alpha_2} - \frac{\partial}{\partial \alpha_2}(Et). \quad (3.65)$$

Para encontrar a derivada de  $S$  com respeito a  $\alpha_2$ , vamos primeiro trabalhar na integral do lado direito. Realizando a derivada pela regra da cadeia, encontramos que:

$$\begin{aligned} I &= \frac{\partial}{\partial \alpha_2} \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{2m\alpha_1 + 2m\frac{K}{r} - \left( \frac{\alpha_2}{r} \right)^2} dr \\ &= \int_{r_0}^{r_1} -\frac{\alpha_2}{r^2} \left[ 2m\alpha_1 + 2m\frac{K}{r} - \left( \frac{\alpha_2}{r} \right)^2 \right]^{-1/2} dr. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Vamos realizar uma mudança de variável, chamando  $x = \frac{1}{r}$  e  $dx = -\frac{1}{r^2} dr$ , então

$$\begin{aligned} I &= \alpha_2 \int_{x_0}^{x_1} \frac{1}{\sqrt{2m\alpha_1 + 2mKx - (\alpha_2 x)^2}} dx \\ &= \int_{x_0}^{x_1} \frac{1}{\sqrt{\frac{2m\alpha_1}{\alpha_2^2} + \frac{2mK}{\alpha_2^2} x - x^2}} dx. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Para resolver a integral acima, vamos reescrevê-la na forma:

$$I = \int_{x_0}^{x_1} \frac{1}{\sqrt{(x-a)(b-x)}} dx, \quad (3.68)$$

de modo que  $(x-a)(b-x) = -x^2 + (a+b)x - ab$ , então, por comparação, temos:

$$ab = -\frac{2m\alpha_1}{\alpha_2^2} \quad (3.69)$$

e

$$a + b = \frac{2mK}{\alpha_2^2}. \quad (3.70)$$

Vamos promover mais uma mudança de variável, fazendo

$$x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}u, \quad (3.71)$$

então

$$dx = \frac{b-a}{2} du, \quad (3.72)$$

e quanto aos limites de integração, por enquanto consideremos que  $u_0 = x_0$  e  $u_1 = x_1$ , então a integral fica:

$$\begin{aligned} \beta &= \int_{x_0}^{x_1} \frac{1}{\sqrt{(x-a)(b-x)}} dx \\ &= \int_{u_0}^{u_1} \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}u - a\right)\left(b - \frac{a+b}{2} - \frac{b-a}{2}u\right)}} \frac{b-a}{2} du \\ &= \int_{u_0}^{u_1} \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{4}(b-a)^2(1-u^2)}} \frac{b-a}{2} du \\ &= \int_{u_0}^{u_1} \frac{1}{\frac{1}{2}(b-a)\sqrt{1-u^2}} \frac{b-a}{2} du \\ &= \int_{u_0}^{u_1} \frac{1}{\sqrt{1-u^2}} du \\ &= \arcsen(u)|_{u_0}^{u_1}. \end{aligned} \quad (3.73)$$

Escolhendo o limite inferior de integração  $u_0 = -1$  e o superior  $u_1 = u$ , então

$$\begin{aligned} \beta &= \arcsen(u) - \arcsen(-1) \\ &= \arcsen(u) - \left(-\frac{\pi}{2}\right) \\ &= \arcsen(u) + \frac{\pi}{2}, \end{aligned} \quad (3.74)$$

segue que

$$\arcsen(u) = \beta - \frac{\pi}{2}, \quad (3.75)$$

logo,  $u$  é expresso por:

$$\begin{aligned} u &= \text{sen}\left(\beta - \frac{\pi}{2}\right) \\ &= -\cos(\beta). \end{aligned} \quad (3.76)$$

Dessa maneira, a variável  $x$ , equação (3.71), fica:

$$x = \frac{a+b}{2} - \frac{b-a}{2} \cos(\beta). \quad (3.77)$$

Sendo assim, podemos encontrar os valores máximos e mínimos de  $x$ , sendo  $x_{\max} = a$  ( $\beta = 0$ ) e  $x_{\min} = b$  ( $\beta = \pi$ ). Consequentemente, temos que a distância máxima  $r_{\max} = \frac{1}{a}$  e a mínima  $r_{\min} = \frac{1}{b}$ .

A excentricidade da órbita,  $\epsilon$ , é determinada pela seguinte relação:

$$\begin{aligned} \epsilon &= \frac{r_{\max} - r_{\min}}{r_{\max} + r_{\min}} \\ &= \frac{\frac{1}{a} - \frac{1}{b}}{\frac{1}{a} + \frac{1}{b}} \\ &= \frac{b-a}{b+a}. \end{aligned} \quad (3.78)$$

Considerando que

$$\begin{aligned} x &= \frac{a+b}{2} - \frac{b-a}{2} \cos(\beta) \\ &= \frac{a+b}{2} \left(1 - \frac{b-a}{a+b} \cos(\beta)\right) \\ &= \frac{a+b}{2} (1 - \epsilon \cos(\beta)), \end{aligned} \quad (3.79)$$

pela equação (3.70) sabemos que  $a+b = \frac{2mK}{\alpha_2^2}$ , então

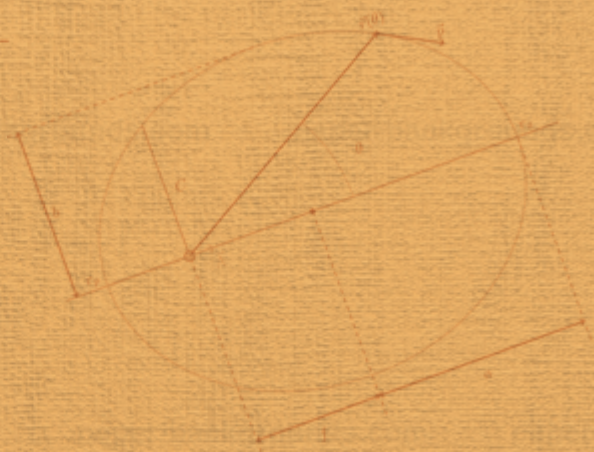
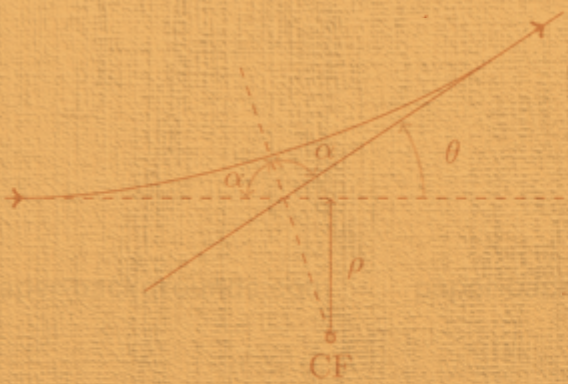
$$\begin{aligned} x &= \frac{mK}{\alpha_2^2} (1 - \epsilon \cos(\beta)) \\ &= \frac{mK}{p_\phi} (1 - \epsilon \cos(\beta)), \end{aligned} \quad (3.80)$$

como  $r = \frac{1}{x}$ , obtemos finalmente a expressão para a trajetória da partícula:

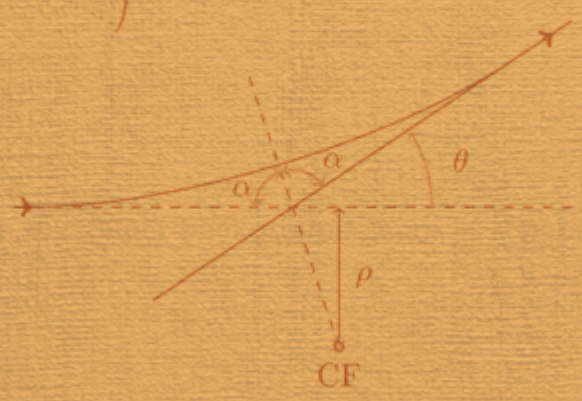
$$r = \frac{p_\phi^2 / Km}{1 - \epsilon \cos(\beta)}. \quad (3.81)$$



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$

**Parte B**

---

# **Teoria de Grupos**

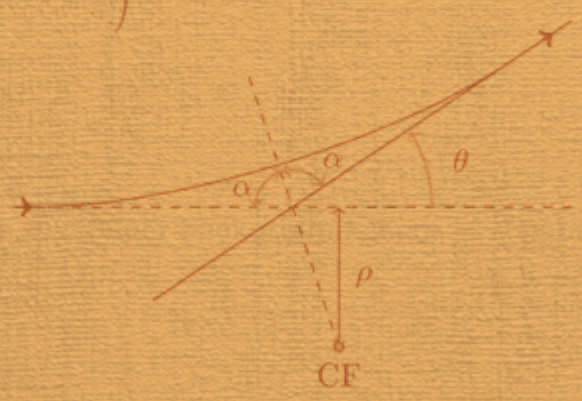




$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$

## Introdução à Parte B

Na segunda parte do livro é apresentada a Teoria de Grupos e sua aplicação a sistemas cristalinos. A ideia principal dessa teoria é explorar as simetrias presentes na natureza e particularmente nos sistemas físicos. É precisamente por meio da análise das simetrias que certos problemas nas áreas das ciências exatas podem ser resolvidos elegantemente e com menor esforço.

É apresentada a definição de grupo em que os elementos do grupo são operadores, além de exemplos de grupos abelianos, cíclicos e não abelianos. A notação de Schoenflies é usada como usualmente. Conceitos de subgrupo invariante e grupo fator são introduzidos, assim como homomorfismo e isomorfismo. O tema central gira em torno da teoria de representações, na qual são analisadas as representações redutíveis e irredutíveis. Essa teoria é aplicada na obtenção dos estados eletrônicos em sistemas cristalinos, utilizando-se a técnica de operadores de projeção nas diferentes representações irredutíveis do sistema físico. A solução do problema da obtenção dos estados eletrônicos é facilitada grandemente quando é realizada uma análise das simetrias do sistema. A teoria promove uma determinação clara dos níveis de energia e da simetria das funções de onda. Assim, as autoenergias são classificadas pela representação irredutível a qual pertencem.

## 4 Tópicos de Teoria de Grupos e sua aplicação a estados eletrônicos em sistemas cristalinos<sup>†</sup>

*Symmetry, as wide or as narrow as you may define its meaning, is one idea by which man through the ages has tried to comprehend and create order; beauty and perfection.*

Hermann Weyl

**Imagem 4:** Roman Smoluchowski (Polônia, 1910-1996) e Eugene Paul Wigner (Hungria, 1902-1995).



Fontes: <https://web2.ph.utexas.edu/utphysicshistory/RomanSmoluchowski.html>; e [https://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1963/wigner-bio.html](https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1963/wigner-bio.html)

A proposta deste tópico é mostrar de forma sucinta as definições e conceitos de Teoria de Grupos, com o intuito de unificar a notação.

O objetivo central é ensinar como as técnicas da Teoria de Grupos (TG) se aplicam a problemas em Mecânica Quântica para sistemas que apresentam certas simetrias.

Em particular, tratando-se de um problema de autovalores, a TG promove uma determinação clara dos níveis de energia e da simetria das funções de onda, uma vez que simplifica notavelmente os cálculos.

<sup>†</sup> Curso ministrado por H. N. Nazareno na Universidad de Concepcion, Chile.

Em especial, enfatiza-se a utilização de operadores de projeção para a construção de funções de onda de simetria adaptada. É citada a aplicação a moléculas e sólidos.

## 4.1 Definição de grupo

Devemos destacar a existência da excelente literatura que trata exaustivamente da Teoria de Grupos, na qual destacamos: Bouckaert, Smoluchowski e Wigner (1936), Heine (1960), Tinkham (1964), Koster et al. (1966) e Luehrmann (1968). As simetrias cristalinas e bandas de energia possuem excelente tratamento em Slater (1965).

Dada uma coleção de objetos  $A, B, C, \dots$ , designados os *elementos* que formam um *grupo*, se entre eles é definida uma operação de multiplicação tal que a um par de elementos  $A, B$  é associado um terceiro elemento,  $C$ , que satisfaz os seguintes postulados:

1. O produto está contido no grupo. Isto é, o conjunto é *fechado* sob a multiplicação.
2. O produto é *associativo*  $A(BC) = (AB)C$ .
3. Existe o elemento identidade  $E$  tal que  $EA = AE = A$ .
4. Para cada elemento do grupo existe sua inversa  $A^{-1}$ , verificando  $AA^{-1} = A^{-1}A = E$ .

A seguir trataremos especificamente de grupos que contêm um número finito de elementos, os quais são denominados *grupos finitos*.

O número de elementos do grupo é chamado de *ordem do grupo*. Os elementos em geral serão *operadores*.

## 4.2 Grupos abelianos

O grupo é chamado *abeliano* se para todo par  $A, B$  o produto for comutativo, isto é,  $A \times B = B \times A$ . Exemplos de grupos abelianos:

a) o conjunto dos números inteiros, sendo o produto a soma dos elementos e a identidade, o zero.

$$A \times 0 = 0 \times A = A \quad \text{com efeito} \quad n + 0 = 0 + n = n,$$

claramente este grupo é um grupo infinito.

b) O conjunto das translações em um cristal, que denotaremos  $T(\mathbf{R}_l)$ , trata-se de um operador que realiza uma translação ao longo do vetor  $\mathbf{R}_l$ . Se realizamos uma translação em  $\mathbf{R}_m$ , esta produzirá o mesmo efeito que realizar essas operações em ordem inversa

$$T(\mathbf{R}_l)T(\mathbf{R}_m) = T(\mathbf{R}_m)T(\mathbf{R}_l). \quad (4.1)$$

O elemento identidade é uma translação no vetor nulo:

$$T(\mathbf{0}) \equiv E. \quad (4.2)$$

### 4.3 Grupos não-abelianos

Os grupos não-abelianos são aqueles em que o produto não é comutativo.

Um exemplo de grupo não-abeliano é o conjunto de matrizes  $n \times n$  de ordem infinita. Aqui a multiplicação se entende em um sentido de produto matricial. Claramente, para que as matrizes formem um grupo, o determinante de cada uma delas deve ser não nulo,  $\det M \neq 0$ , para a existência de sua inversa.

O elemento identidade do grupo de matrizes  $n \times n$  é

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & 0 \\ & 1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & 1 \end{pmatrix}.$$

### 4.4 Rotações e a notação de Schoenflies

Além das translações devemos considerar as simetrias rotacionais, dada a existência de sistemas físicos que permanecem inalterados ante uma rotação, como é o caso de moléculas e sólidos. Em particular na física dos sólidos, é de interesse considerar as operações combinadas de rototranslação. No caso da química, a simetria presente nas moléculas é a rotacional, ou seja, operações que deixam fixo um ponto do espaço.

Para descrever as rotações usamos a seguinte notação proposta por Schoenflies: associado à rotação de ângulo  $\frac{2\pi}{n}$  é introduzido o operador

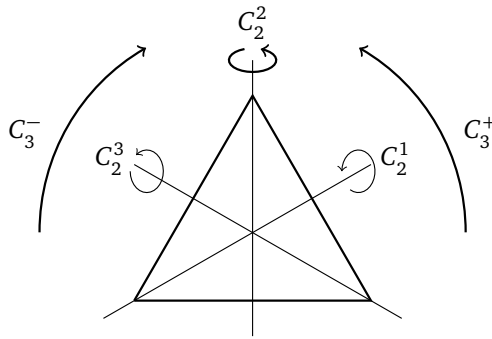
$C_n$ . Assim uma rotação em  $180^\circ$  é indicada pelo operador  $C_2$ . Uma rotação em  $120^\circ$  por  $C_3$ , uma de  $90^\circ$  por  $C_4$ , etc.

Para distinguir o sentido da rotação, a uma rotação no sentido anti-horário adiciona-se um sobrescrito +, e para rotação no sentido horário, um índice -. Dessa forma, a notação  $C_n^+$  é associada à rotação no sentido anti-horário de ângulo  $\frac{2\pi}{n}$ . Analogamente,  $C_n^-$  representa uma rotação em  $\frac{2\pi}{n}$  no sentido horário.

Evidentemente,

$$C_n^+ C_n^- = C_n^- C_n^+ = E. \quad (4.3)$$

Como exemplo de grupo não-abeliano consideremos o triângulo equilátero abaixo:



As operações que deixam invariante o triângulo são:

- $E$  a identidade;
- $C_3^+$  e  $C_3^-$  rotações em torno de um eixo perpendicular ao plano e passando pelo centro da figura;
- $C_2^1$ ,  $C_2^2$  e  $C_2^3$  três eixos  $C_2$  no plano e passando pelo centro do triângulo.

Temos aqui um grupo de ordem 6, não-abeliano, identificado pelo símbolo  $\mathcal{D}_3$ .

Outro exemplo de um grupo de ordem 6 é composto pelas seguintes matrizes:

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

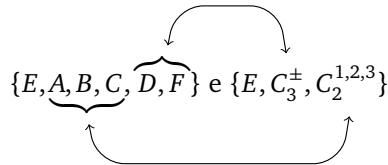
$$D = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix} \qquad F = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix},$$

que satisfazem a tabela a seguir de multiplicação do grupo.

	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
A	A	E	D	F	B	C
B	B	F	E	D	C	A
C	C	D	F	E	A	B
D	D	C	A	B	F	E
F	F	B	C	A	E	D

Associando as matrizes  $A$ ,  $B$  e  $C$  com as operações  $C_2^{1,2,3}$ , respectivamente, e as operações  $D$  e  $F$  com  $C_3^\pm$ , obteremos a mesma tabela de multiplicação para o grupo de operações no triângulo.

Isto é,



grupos que possuem Tabelas de Multiplicação semelhantes são denominados *isomórficos*.

## 4.5 Grupos cíclicos

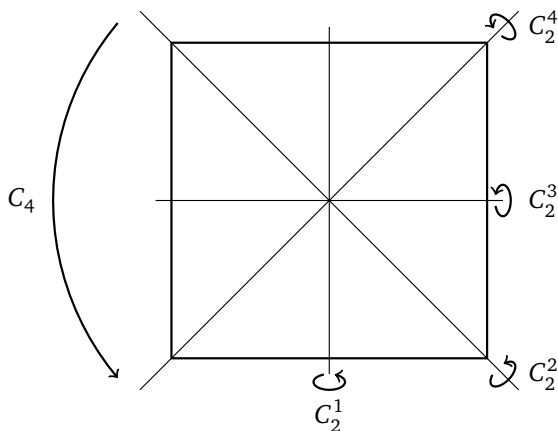
Trata-se de um grupo de ordem  $n$  gerado por sucessivas potências de um elemento dado:

$$X, X^2, X^3, \dots, X^{n-1}, X^n = E. \tag{4.4}$$

Obviamente é um grupo abeliano. Analisando o triângulo observamos que, ao tomar as diferentes potências do operador  $C_3^-$ , formamos um grupo cíclico de ordem 3. Com efeito:  $(C_3^-)^2 = C_3^+$  e  $(C_3^-)^3 = C_3^- C_3^+ = E$ . Assim, os elementos  $E$ ,  $C_3^-$  e  $C_3^+$  formam um *subgrupo* cíclico do grupo  $\mathcal{D}_3$ , desde que as operações representem rotações em ângulo  $\frac{2\pi}{3}$ .

Considerando o quadrado como exemplo, temos as seguintes operações de simetria:

- $C_4^{1,2,3}$  sendo que  $C_4^4 = E$ , rotações de  $90^\circ$  em torno do eixo perpendicular ao centro do quadrado.
- 4 rotações  $C_2$ , rotações de  $180^\circ$  em torno dos eixos indicados na figura abaixo:



O grupo  $\mathcal{D}_4$  é constituído pelo subgrupo cíclico das rotações e o conjunto das 4 operações  $C_2$ .

## 4.6 Subgrupos e classes laterais

É mister aclarar que, na literatura inglesa, classe lateral é chamada de *Coset*. Com a seguinte notação indicaremos uma coleção de objetos pertencentes a um grupo  $\mathcal{G}$ . Assim, com o símbolo  $\mathcal{S}$ , indicaremos um subgrupo de ordem  $g$  constituído por

$$\mathcal{S} = \{E, S_2, S_3, \dots, S_g\}. \quad (4.5)$$

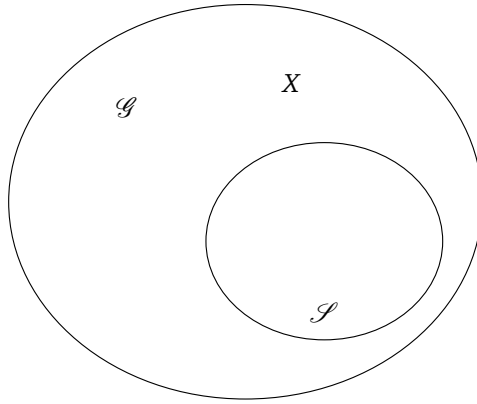
Definimos uma *classe lateral à direita* de  $\mathcal{S}$ , formando os produtos

$$\{EX, S_2X, S_3X, \dots, S_gX\} = \mathcal{S}X, \quad (4.6)$$

onde o elemento  $X$  não pertence ao subgrupo  $\mathcal{S}$ . Como ilustração, veja a figura abaixo:

Se  $X$  pertence a  $\mathcal{S}$ , neste caso  $\mathcal{S}X = \mathcal{S}$ .





Uma classe lateral à esquerda é definida assim:

$$\{X, XS_2, XS_3, \dots, XS_g\} = XS. \quad (4.7)$$

Uma classe lateral não é um subgrupo por não conter a identidade. Além do mais,  $SX$  não contém elementos de  $S$ .

Com efeito, assumindo que  $S_kX = S_lY$ , chega-se à seguinte relação,  $XY^{-1} = S_k^{-1}S_l$ , o que implica que  $XY^{-1}$  pertence ao subgrupo  $S$ , contrariando a definição de classe lateral.

Dois classes laterais à direita (ou esquerda) ou são idênticas ou não possuem nenhum elemento em comum. Com efeito, sejam  $SX$  e  $S'Y$ , e supondo que exista um elemento em comum,  $S_kX = S_l'Y$ , isto implica a relação  $XY^{-1} = S_k^{-1}S_l'$ ; o segundo membro impõe que  $XY^{-1}$  pertence a  $S$ , então  $SXY^{-1}$  pertence a  $S$ , o que permite escrever a relação  $SXY^{-1} = S$ , que por sua vez implica  $SX = S'Y$ . Ou seja, é suficiente ter um elemento em comum para que todos sejam idênticos.

Esse resultado é muito importante pois nos conduz ao seguinte teorema:

A ordem  $g$  de um subgrupo deve ser um divisor de ordem  $h$  do grupo total  $G$ . Assim, deve cumprir a relação  $h/g=l$  com  $l$  sendo inteiro. Prova-mos da seguinte maneira: Todo elemento de  $G$  deve estar em  $S$  ou nas diferentes classes laterais que formemos a partir dele, isto é,

$$G = \{S, SX_2, SX_3, \dots, SX_l\}. \quad (4.8)$$

Cada classe lateral  $SX_n$  possui uma coleção de  $g$  elementos, todos eles diferentes, mas que devem ser iguais à ordem do grupo total, assim,  $h = g \cdot l$ .

## 4.7 Exemplos de grupos finitos

- Ordem 2:  $E, A$ ;  $A^2 = E$  é um grupo abeliano, podendo tratar-se dos elementos, identidade e reflexão, ou identidade e intercambio de duas partículas.
- Ordem 3:  $E, A, B$ ; Pelo teorema anterior não pode haver um subgrupo de ordem 2, assim  $A^2 = B \neq E$ . Se  $A^2 = E$ , temos um subgrupo de ordem 2, sendo 3 não divisível por 2. Trata-se do grupo dos seguintes elementos:  $E, A, A^2$ .
- Ordem 4: Neste caso existem dois grupos abelianos:
  1. um grupo cíclico formado pelas rotações  $C_4$ , com elementos  $E, C_4^{1,2,3}$ .
  2. o grupo que satisfaz a seguinte tabela:

	E	A	B	C
E	E	A	D	C
A	A	E	C	B
B	B	C	E	A
C	C	B	A	E

- Grupos de ordem primo: Devem ser grupos cíclicos e, por conseguinte abelianos, não podendo nesses casos ter subgrupos, já que a ordem de tal subgrupo deveria ser um divisor de um número primo.
- Grupo das permutações: De importância no estudo de partículas idênticas na mecânica quântica. As permutações de  $n$  objetos formam um grupo de ordem  $n!$ , chamado de grupo simétrico.

## 4.8 Elementos conjugados e classes

Por definição, o elemento  $B$  é dito *conjugado* de  $A$  se:

$$B = XAX^{-1} \quad \text{ou} \quad X^{-1}BX = A, \quad (4.9)$$

se  $B$  e  $C$  são conjugados de  $A$ , ambos o são entre si, então

$$\begin{aligned} B &= XAX^{-1} \\ C &= YAY^{-1} \end{aligned} \quad \implies \quad A = Y^{-1}CY. \quad (4.10)$$

Substituindo  $A$  na primeira equação, temos:

$$B = XY^{-1}CYX^{-1} = (XY^{-1})C(XY^{-1})^{-1}, \quad (4.11)$$

isto é,  $B$  é conjugado de  $C$ . Para mostrar essa identidade se fez uso da propriedade  $(RS)^{-1} = S^{-1}R^{-1}$ .

Uma classe é o conjunto de elementos conjugados de um dado elemento do grupo de ordem  $h$ , por exemplo, se o elemento é  $A_i$  a classe é formada por:

$$EA_iE, A_2A_iA_2^{-1}, A_3A_iA_3^{-1}, \dots, A_hA_iA_h^{-1}, \quad (4.12)$$

claramente alguns elementos aparecem repetidos.

Um caso especial é a identidade, já que se trata de uma classe em si mesma:

$$A_kEA_k^{-1} = E, \quad (4.13)$$

para todo  $A_k$ .

Trata-se, além do mais, da única classe que possui a identidade, assim as outras classes não formam um subgrupo.

Outro caso a destacar são os grupos abelianos onde cada elemento é uma classe:

$$A_kA_iA_k^{-1} = A_i. \quad (4.14)$$

*Concluimos que em um grupo abeliano existem tantas classes quantos elementos no grupo.*

Se temos um grupo de matrizes, os traços dos elementos de uma mesma classe são iguais, isto é:

$$Tr(ABA^{-1}) = Tr(BA^{-1}A) = Tr(B). \quad (4.15)$$

Exemplo de classes no grupo  $\mathcal{D}_3$ , são as três classes  $E$ ,  $C_3^\pm$  e  $C_2^{1,2,3}$ , ou seja, além da identidade, as classes estão formadas por duas rotações  $C_3^\pm$ , e as três rotações  $C_2^{1,2,3}$ .

## 4.9 Subgrupo invariante e grupo fator

Um subgrupo  $\mathcal{S}$  é chamado de subgrupo invariante ou normal divisor se ele é constituído inteiramente por classes. Isso implica que se  $\mathcal{S}$  é um

subgrupo invariante, um elemento qualquer dele,  $A$ , por exemplo, satisfaz  $X^{-1}AX$ , que também pertence ao  $\mathcal{S}$  para todo  $X$  que pertence ao grupo total  $\mathcal{G}$ .

Em notação condensada dizemos que  $\mathcal{S}$  é um subgrupo quando se verifica que

$$X^{-1}\mathcal{S}X = \mathcal{S} \quad \forall \quad X \in \mathcal{G}. \quad (4.16)$$

De onde resulta a seguinte propriedade relativa a um subgrupo:  $\mathcal{S}X = X\mathcal{S}$ , em outras palavras, se as classes laterais à direita e à esquerda são idênticas, então trata-se de um *subgrupo invariante*.

Decompondo  $\mathcal{G} = \{\mathcal{S}, \mathcal{S}X_2, \mathcal{S}X_3, \dots, \mathcal{S}X_l\}$  em  $\mathcal{S} + (l - 1)$  classes laterais, formamos um grupo de ordem  $l = h/g$ , onde cada elemento, por sua vez, é um conjunto de  $g$  elementos.

A identidade desse grupo é  $\mathcal{S}$ , sendo chamado de *grupo fator* de  $\mathcal{G}$ , com respeito ao normal divisor o subgrupo invariante  $\mathcal{S}$ .

Cada elemento do grupo fator é representado com  $\mathcal{K}_i = \mathcal{S}K_i = K_i\mathcal{S}$  por ser  $\mathcal{S}$  um subgrupo invariante.

Mostramos agora que  $\mathcal{S}$  é o elemento identidade, fazendo

$$\mathcal{S}\mathcal{K}_i = \mathcal{S}(\mathcal{S}K_i) = (\mathcal{S}\mathcal{S})K_i = \mathcal{S}K_i = \mathcal{K}_i, \quad (4.17)$$

o que mostra que  $\mathcal{S}$  é a identidade,  $\mathcal{S} = E$ . Além disso, usamos o fato de que  $\mathcal{S}\mathcal{S} = \mathcal{S}$ .

Fazendo agora o produto dos elementos do grupo fator

$$\mathcal{K}_i \times \mathcal{K}_j = \mathcal{S}K_i\mathcal{S}K_j = K_i\mathcal{S} \times \mathcal{S}K_j = K_i\mathcal{S}K_j = \mathcal{S}K_iK_j, \quad (4.18)$$

onde é mostrado que o produto  $\mathcal{K}_i \times \mathcal{K}_j$  é a classe lateral associada ao produto  $K_iK_j$ .

## 4.10 Isomorfismo e homomorfismo

Quando analisamos o grupo  $\mathcal{D}_3$ , introduzimos o conceito de isomorfismo ao considerarmos duas representações que conduzem a uma mesma tabela de multiplicação. Mais especificamente, o isomorfismo entre dois grupos de elementos  $A, B, C, \dots$  e  $A', B', C', \dots$  implica a existência de uma correspondência *biunívoca* entre os elementos de ambos os grupos.

Por exemplo, o produto  $AB = C$  deve ter como contrapartida a relação  $A'B' = C'$  e reciprocamente. Trata-se de uma relação 1 a 1.

Enquanto o homomorfismo estabelece uma relação de vários a um, que simbolizamos assim:

$$A \longleftarrow A'_1, A'_2, \dots, A'_k, \quad (4.19)$$

tal que ao produto  $AB = C$ , o correspondente é  $A'_i A'_k = C'_l$ .

Um homomorfismo trivial é estabelecido entre o grupo que só contém a identidade e quaisquer outros grupos. Encontramos homomorfismo quando introduzimos o grupo fator, cada elemento deste grupo fator  $\mathcal{K}_i$  é posto em correspondência com  $g$  elementos do grupo  $\mathcal{G}$  por meio da definição:  $\mathcal{K}_i = \mathcal{S}K_i$ . O primeiro membro consta de um elemento, o segundo de  $g$  elementos.

## 4.11 Teoria de representações

Esta seção da teoria de grupos é central no que se refere às aplicações da teoria a problemas físicos e/ou químicos, por exemplo. A representação de um grupo estabelece uma relação de homomorfismo entre um grupo de matrizes e os elementos do grupo em questão. A operação produto consiste no produto matricial. Para poder definir sempre os produtos, as matrizes da representação devem ser quadradas. Com  $\Gamma$  indicamos as matrizes da representação, assim associamos o elemento  $A$  à matriz  $\Gamma(A)$ . Simbolicamente,  $A \longleftarrow \Gamma(A)$ . A representação impõe que

$$\Gamma(A)\Gamma(B) = \Gamma(AB). \quad (4.20)$$

Obviamente as matrizes  $\Gamma$  devem satisfazer a tabela de multiplicação. A identidade é representada pela matriz unidade  $\mathbf{1} = \Gamma(E)$ . O grau das matrizes é a *dimensão* da representação. Se cada matriz é diferente, ou seja, se o homomorfismo se transforma em um isomorfismo, diz-se que a representação é *fiel*. Isso foi apresentado no caso das matrizes associadas ao grupo  $\mathcal{D}_3$ . Nesse caso temos 6 matrizes para representar igual número de operadores.

Podemos considerar outra representação do grupo  $\mathcal{D}_3$ , a que consiste em presumir que cada elemento  $A$  seja representado pelo valor do determinante da matriz  $|\Gamma(A)|$ . Assim,

$$|\Gamma(A)||\Gamma(B)| = |\Gamma(A)\Gamma(B)| = |\Gamma(AB)|, \quad (4.21)$$

neste caso trata-se de uma representação unidimensional, com os valores dos determinantes sendo  $\pm 1$ . Então é uma representação infiel, não existe correspondência 1 a 1.

Outra representação do grupo  $\mathcal{D}_3$  é a chamada representação idêntica, que consiste em associar o número 1 a todo elemento do grupo. Esta satisfaz os requisitos de uma representação. Temos apresentado três representações diferentes desse grupo. Veremos mais adiante que elas são todas as diferentes representações que podemos tomar do grupo  $\mathcal{D}_3$ .

Para sermos mais explícitos, devemos esclarecer o significado de classificar as representações como *diferentes*. Essa condição é caracterizada quando *não* se obtém uma da outra por meio de uma transformação de semelhança. Partimos de uma representação  $\Gamma(A)$  e fazemos uma transformação de semelhança:

$$S^{-1}\Gamma(A)S = \Gamma'(A), \quad (4.22)$$

na nova representação consideramos o produto

$$\begin{aligned} \Gamma'(A)\Gamma'(B) &= [S^{-1}\Gamma(A)S][S^{-1}\Gamma(B)S] \\ &= S^{-1}\Gamma(A)\Gamma(B)S \\ &= S^{-1}\Gamma(AB)S \\ &= \Gamma'(AB). \end{aligned} \quad (4.23)$$

A conclusão a que chegamos é que se as matrizes  $\Gamma$  formam uma representação do grupo, igualmente acontece com as matrizes  $\Gamma'$  obtidas por meio de uma transformação de semelhança. Ambas as representações são ditas *equivalentes*, podendo ser consideradas *idênticas*.

## 4.12 Representações Redutíveis e Irredutíveis

É preciso definir com precisão os conceitos de redutibilidade e irredutibilidade. Consideremos duas representações  $\Gamma^{(1)}$  e  $\Gamma^{(2)}$  de um grupo  $\mathcal{G}$  de dimensões  $l_1$  e  $l_2$ , respectivamente. Todo elemento do grupo é representado por matrizes quadradas  $l_1 \times l_1$  e  $l_2 \times l_2$ , respectivamente. Uma nova representação é obtida considerando as supermatrizes de dimensão  $(l_1 + l_2) \times (l_1 + l_2)$ , associadas aos elementos do grupo:

$$\Gamma(A) = \begin{pmatrix} \Gamma^{(1)}(A) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Gamma^{(2)}(A) \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

Essa nova representação  $\Gamma(A)$  se diz *reduzível* por sua estrutura em blocos diagonais. Aplicando uma transformação de semelhança podemos obter uma nova representação de dimensão  $l_1 + l_2$  que não apresente essa estrutura diagonal em blocos. Nesse caso não é evidente que estamos na presença de uma representação reduzível. Se aplicamos uma mesma transformação de semelhança, sendo obtida uma nova representação em forma diagonal em blocos, com a mesma estrutura em blocos, então dizemos que a representação é reduzível. Dito de outra maneira, irreduzibilidade significa não poder encontrar uma representação de menor dimensão que a dada.

Nós obtivemos uma representação reduzível  $\Gamma$  a partir das representações  $\Gamma^1$  e  $\Gamma^2$ . Uma vez reduzida a representação, é costumeiro usar a notação:  $\Gamma \sim \Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)}$ . O sinal  $\sim$  é uma notação simbólica. Em geral, uma vez reduzida uma representação, escrevemos:

$$\Gamma \sim \sum_i a_i \Gamma^{(i)}, \quad (4.25)$$

onde os inteiros  $a_i$  são os números que expressam quantas vezes uma particular representação irreduzível  $\Gamma^{(i)}$  está contida em  $\Gamma$ .

## 4.13 Lemas fundamentais da teoria de representações

### 4.13.1 Lema 1

Toda representação por matrizes com determinante diferente de 0 é equivalente a uma representação por *matrizes unitárias*.

De fato, desde que por meio de uma transformação de semelhança posamos obter as matrizes da representação em forma unitária, não devemos nos preocupar se ditas matrizes são ou não unitárias.

Promovendo uma mudança na notação para simplificar a escrita:  $\Gamma(A_i) = A_i$ . Somando todos os elementos do grupo:

$$\mathbf{H} = \sum_i A_i A_i^\dagger, \quad (4.26)$$

onde  $\mathbf{H}^\dagger$  é a conjugada hermitiana da  $\mathbf{H}$ . Assim,  $H_{ij} = H_{ji}^*$ . Desde que  $\mathbf{H}$  seja uma matriz hermitiana, então essa matriz pode ser diagonalizada por meio de uma transformação unitária, sendo a matriz diagonal denotada pela matriz  $\mathbf{d}$ :

$$\mathbf{d} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{H}\mathbf{U} = \sum_i \mathbf{U}^{-1}\mathbf{A}_i\mathbf{A}_i^\dagger\mathbf{U} = \sum_i \mathbf{U}^{-1}\mathbf{A}_i\mathbf{U}\mathbf{U}^{-1}\mathbf{A}_i^\dagger\mathbf{U} = \sum_i \mathbf{A}'_i\mathbf{A}'_i{}^\dagger, \quad (4.27)$$

onde  $\mathbf{A}'_i = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{A}_i\mathbf{U}$ , sendo  $\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^\dagger$ .

A matriz  $\mathbf{d}$ , além de ser diagonal, tem por elementos números *reais e positivos*. Assim, o elemento diagonal  $d_{kk}$  é

$$d_{kk} = \sum_i \sum_l (A'_i)_{kl} (A'_i)_{kl}^* = \sum_{i,l} |(A'_i)_{kl}|^2. \quad (4.28)$$

Podemos tomar as potências  $\pm 1/2$  e definir as matrizes diagonais como elementos positivos:

$$\mathbf{d}^{1/2} \quad \text{e} \quad \mathbf{d}^{-1/2}.$$

A matriz identidade  $\mathbf{1} = \mathbf{d}^{-1/2}\mathbf{d}\mathbf{d}^{-1/2} = \mathbf{d}^{-1/2} \sum_i \mathbf{A}'_i\mathbf{A}'_i{}^\dagger \mathbf{d}^{-1/2}$ .

Temos feito uma transformação unitária nas matrizes  $\mathbf{A}_i$  passando a novas matrizes que chamamos  $\mathbf{A}'_i$ , a partir das quais queremos obter uma nova representação por matrizes *unitárias* que chamaremos de  $\mathbf{A}''_i$ . Para isso, fazemos uma transformação de semelhança:

$$\mathbf{A}''_i = \mathbf{d}^{-1/2}\mathbf{A}'_i\mathbf{d}^{1/2}. \quad (4.29)$$

Resta mostrar que as novas matrizes são unitárias. Fazendo o produto

$$\begin{aligned} \mathbf{A}''_j\mathbf{A}''_j{}^\dagger &= \mathbf{d}^{-1/2}\mathbf{A}'_j\mathbf{d}^{1/2}[\mathbf{1}]\mathbf{d}^{1/2}\mathbf{A}'_j{}^\dagger\mathbf{d}^{-1/2} \\ &= \mathbf{d}^{-1/2} \sum_i \mathbf{A}'_j\mathbf{A}'_i\mathbf{A}'_i{}^\dagger\mathbf{A}'_j{}^\dagger \mathbf{d}^{-1/2} \\ &= \mathbf{d}^{-1/2} \sum_i \mathbf{A}'_j\mathbf{A}'_i(\mathbf{A}'_i\mathbf{A}'_i)^\dagger \mathbf{d}^{-1/2} \\ &= \mathbf{d}^{-1/2} \sum_k \mathbf{A}'_k\mathbf{A}'_k{}^\dagger \mathbf{d}^{-1/2} \\ &= \mathbf{1}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Finalmente, chegamos ao ponto em que queríamos, isto é, obter uma representação unitária do grupo mediante uma transformação

$$\mathbf{A}''_j = \mathbf{d}^{-1/2}\mathbf{U}^{-1}\mathbf{A}'_j\mathbf{U}\mathbf{d}^{1/2}, \quad (4.31)$$

onde  $\mathbf{U}$  diagona a matriz hermitiana  $\mathbf{H} = \sum_i \mathbf{A}_i\mathbf{A}_i^\dagger$ , cuja forma diagonal é  $\mathbf{d}$ .



### 4.13.2 Lema 2 (Lema de Schur)

Uma matriz que comuta com todas as matrizes de uma representação irredutível deve ser uma matriz constante, isto é, deve ser um múltiplo da identidade  $\mathbf{1}$ .

Por hipótese,  $\mathbf{M}$  é uma matriz que satisfaz:

$$[\mathbf{M}, \mathbf{A}_i] = 0 \quad \forall \mathbf{A}_i \quad (4.32)$$

de uma representação irredutível, logo  $\mathbf{M} = C\mathbf{1}$ , onde  $C$  é uma constante.

A demonstração do lema segue ao longo do seguinte raciocínio: Se existe uma tal matriz que é diferente da matriz constante, a representação é *reduzível*, porém, se não existe uma tal matriz, a representação é *irreduzível*, como estabelece o lema de Schur.

Para a demonstração, assumimos de agora para a frente que as matrizes  $\mathbf{A}_i$  são unitárias. Se  $\mathbf{M}$  satisfizer a hipótese do lema, equação (4.32), verifica-se que  $\mathbf{A}_i\mathbf{M} = \mathbf{M}\mathbf{A}_i$  para todos os elementos do grupo de ordem  $h$ . Tomando a conjugada hermitiana desta equação:

$$\mathbf{M}^\dagger \mathbf{A}_i^\dagger = \mathbf{A}_i^\dagger \mathbf{M}^\dagger, \quad (4.33)$$

multiplicando a esquerda e depois a direita por  $\mathbf{A}_i$ , tem-se

$$\mathbf{A}_i \mathbf{M}^\dagger = \mathbf{M}^\dagger \mathbf{A}_i, \quad (4.34)$$

assim chegamos que: se  $\mathbf{M}$  comuta com as matrizes da representação, então  $\mathbf{M}^\dagger$  também comuta.

Pode-se construir, a partir de  $\mathbf{M}$  e  $\mathbf{M}^\dagger$ , duas matrizes hermitianas  $\mathbf{H}_1 = \mathbf{M} + \mathbf{M}^\dagger$  e  $\mathbf{H}_2 = i(\mathbf{M} - \mathbf{M}^\dagger)$ , as quais comutam com os  $\mathbf{A}_i$ . Agora basta mostrar que essas matrizes hermitianas que comutam são constantes, porque se isso for verificado, é mostrado que  $\mathbf{M}$  é uma matriz constante, desde que

$$\mathbf{M} = \left( \frac{\mathbf{H}_1 - i\mathbf{H}_2}{2} \right). \quad (4.35)$$

Agora devemos nos preocupar apenas com as matrizes hermitianas. Vamos denotar  $\mathbf{N}$  a essa matriz, isto é,  $\mathbf{N} = \mathbf{N}^\dagger$ . Uma tal matriz sempre pode ser levada à forma diagonal por uma transformação unitária

$$\mathbf{d} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{N}\mathbf{U}. \quad (4.36)$$

Se transformamos nossas matrizes, temos:

$$\mathbf{A}'_i = \mathbf{U}^{-1} \mathbf{A}_i \mathbf{U}. \quad (4.37)$$

Por outro lado, teríamos que  $\mathbf{N} \mathbf{A}_i = \mathbf{A}_i \mathbf{N}$ , o mesmo se dá com as matrizes transformadas por semelhança, ou seja,

$$\mathbf{d} \mathbf{A}'_i = \mathbf{A}'_i \mathbf{d}. \quad (4.38)$$

Consideremos o elemento  $\mu \nu$  desta equação matricial

$$d_{\mu\mu} (\mathbf{A}'_i)_{\mu\nu} = (\mathbf{A}'_i)_{\mu\nu} d_{\nu\nu}, \quad (4.39)$$

que resulta em

$$(\mathbf{A}'_i)_{\mu\nu} (d_{\mu\mu} - d_{\nu\nu}) = 0, \quad (4.40)$$

isto para  $i = 1, 2, \dots, h$  e  $\mu \nu = 1, 2, \dots, l$ .

Aqui temos que se  $d_{\mu\mu} \neq d_{\nu\nu}$ , então  $(\mathbf{A}'_i)_{\mu\nu} = 0$ , ou seja, os elementos fora da diagonal são iguais a zero. Desta maneira, a representação foi reduzida. Por outro lado, se a representação é irredutível, então  $(\mathbf{A}'_i)_{\mu\nu} \neq 0$ , assim  $d_{\mu\mu} = d_{\nu\nu}$ , sendo  $\mathbf{d}$  igual a uma constante.

Dessa forma, provamos o lema de Schur que diz que, se existe  $[\mathbf{M}, \mathbf{A}_i] = 0 \quad \forall \mathbf{A}_i$  de uma dada representação, logo  $\mathbf{M} = C \mathbf{1}$ , diz-se que a representação é irredutível. Por outro lado, se a matriz  $\mathbf{M}$  é distinta de constante, a representação é redutível. Esse resultado fornece um critério para estabelecer a redutibilidade e irredutibilidade de uma dada representação.

Além disso, dizemos que as representações são equivalentes, ou seja, aquelas que são obtidas umas das outras por transformação de semelhança serão consideradas idênticas.

De forma resumida, foi provado que:

- a) Toda representação é passível de ser levada à forma unitária, assim

$$[\Gamma(\mathbf{A})]^\dagger = [\Gamma(\mathbf{A})]^{-1} = \Gamma(\mathbf{A}^{-1}), \quad (4.41)$$

então, para representações unitárias:

$$[\Gamma(\mathbf{A})]^\dagger = \Gamma(\mathbf{A}^{-1}). \quad (4.42)$$

- b) Se  $[\mathbf{M}, \mathbf{A}_i] = 0 \quad \forall \quad i \quad \implies \quad \mathbf{M} = C \mathbf{1}$  se  $\mathbf{A}_i$  é irredutível.  
 Se  $[\mathbf{M}, \mathbf{A}_i] = 0$  com  $\mathbf{M} \neq C \mathbf{1} \implies \mathbf{A}_i$  é redutível.

### 4.13.3 Lema 3

Dadas duas representações irredutíveis  $\Gamma^{(1)}(A_i)$  e  $\Gamma^{(2)}(A_i)$  de dimensões  $l_1$  e  $l_2$ , respectivamente, e considerando a existência de uma matriz retangular  $\mathbf{M}$  tal que

$$\mathbf{M}\Gamma^{(1)}(A_i) = \Gamma^{(2)}(A_i)\mathbf{M}, \quad (4.43)$$

para todo  $i$  os seguintes casos devem ser considerados:

- a) Se  $l_1 \neq l_2$  então  $\mathbf{M} = 0$ , trata-se de uma matriz nula.
- b) Se  $l_1 = l_2$ , dois resultados são obtidos:

b<sub>1</sub>)  $\mathbf{M} = 0$  (matriz nula).

b<sub>2</sub>) Se o  $\det(\mathbf{M}) \neq 0$ , então existe  $\mathbf{M}^{-1}$ , de modo que podemos escrever:

$$\Gamma^{(1)}(A_i) = \mathbf{M}^{-1}\Gamma^{(2)}(A_i)\mathbf{M}, \quad (4.44)$$

o que implica que as duas representações são *equivalentes*.

Para que os produtos entre matrizes tenham sentido,  $\mathbf{M}$  deve ser uma matriz de ordem  $l_1 \times l_2$ . Sem perda de generalidade, podemos considerar  $l_1 \leq l_2$ .

Vejam os caso b),  $l_1 = l_2$ . Fazendo a conjugada hermitiana da primeira equação:

$$\Gamma^{(1)}(A_i)^\dagger \mathbf{M}^\dagger = \mathbf{M}^\dagger \Gamma^{(2)}(A_i)^\dagger. \quad (4.45)$$

Por tratar-se de representações unitárias, podemos escrever:

$$\Gamma^{(1)}(A_i)^{-1} \mathbf{M}^\dagger = \mathbf{M}^\dagger \Gamma^{(2)}(A_i), \quad (4.46)$$

sendo essa equação válida para todo  $i$ , portanto, podemos escrever

$$\Gamma^{(1)}(A_i)\mathbf{M}^\dagger = \mathbf{M}^\dagger \Gamma^{(2)}(A_i). \quad (4.47)$$

Multiplicando a esquerda por  $\mathbf{M}$ , temos:

$$\mathbf{M}\Gamma^{(1)}(A_i)\mathbf{M}^\dagger = \mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger \Gamma^{(2)}(A_i), \quad (4.48)$$

substituindo na equação inicial, obtemos:

$$\Gamma^{(2)}(A_i)\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger = \mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger \Gamma^{(2)}(A_i). \quad (4.49)$$

Assim estamos na presença de uma matriz hermitiana  $\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger$  que comuta com todas as matrizes de uma representação irredutível. De acordo com o

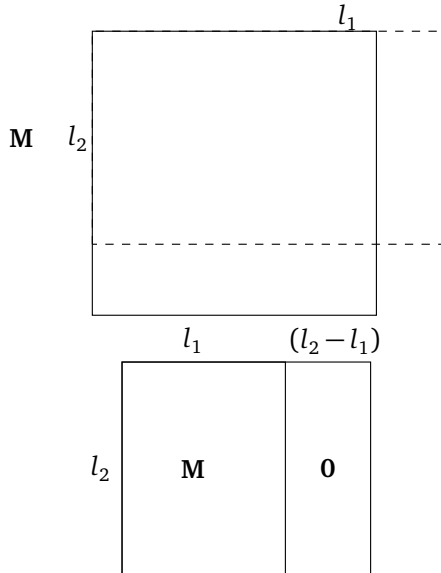
lema de Schur, dita matriz deve ser múltipla da matriz identidade,  $\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger = C\mathbf{1}$ , e o  $\det(\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger) = (C)^{l_1}$ , sendo a matriz identidade  $\mathbf{1}$ , é de ordem  $l_1 \times l_1$ .

No presente caso,  $l_1 = l_2$ , devemos obter o resultado indicado com  $b_1$ ), isto é,  $\mathbf{M} = 0$ , a matriz nula.  $C = 0$  implica  $\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger = 0$ . Um elemento diagonal  $(\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger)_{jj} = \sum_k M_{jk}M_{jk}^* = \sum_k |M_{jk}|^2 = 0$  que indica que todo elemento  $M_{jk} = 0$ , ou seja,  $\mathbf{M}$  é matriz nula.

No caso,  $b_2$ ),  $C \neq 0$  implica que o  $\det(\mathbf{M}) \neq 0$ ; mostramos que as duas representações irreduzíveis são *equivalentes*.

Analisamos agora o caso a) para  $l_1 < l_2$ :

Podemos formar uma matriz quadrada de dimensão  $n = l_2 \times l_2$  adicionando uma matriz nula de dimensão  $l_2 \times (l_2 - l_1)$ , como se indica na figura abaixo:



Chamamos de  $\mathbf{N}$  esta nova matriz. Fazendo o produto  $\mathbf{N}\mathbf{N}^\dagger$ , obtemos o mesmo resultado que para  $\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger$ . Sendo  $\det(\mathbf{N}) = 0$  segue que  $\det(\mathbf{N}\mathbf{N}^\dagger) = |\mathbf{N}|^2 = 0$ .

Recordemos que tínhamos  $\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger = C\mathbf{1} \implies \det(\mathbf{M}) = C^{l_1}$  como aqui  $\det(\mathbf{N}\mathbf{N}^\dagger) = \det(\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger) = |\mathbf{M}|^2 = 0 \implies C = 0$ , então  $\det(\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger) = 0$ . Calculando um elemento diagonal, temos que todos os elementos de matriz são nulos, isto é,  $\mathbf{M} = 0$ .

**Rescapitulando:** Se existe uma matriz  $\mathbf{M}$  e duas representações irreduzíveis  $\Gamma^{(1)}$  e  $\Gamma^{(2)}$  tal que  $\mathbf{M}\Gamma^{(1)}(A_i) = \Gamma^{(2)}(A_i)\mathbf{M}$  para todo  $i$ , a única chance para que  $\mathbf{M} \neq 0$  é que as duas representações irreduzíveis sejam *representações equivalentes*.

## 4.14 Grande Teorema de Ortogonalidade

Trata-se de mostrar que os elementos de matriz das Representações Irreduzíveis (RI) não equivalentes formam um conjunto ortogonal de vetores no espaço de dimensão  $h$  dos elementos do grupo  $\mathcal{G}$ .

Em fórmulas, queremos provar que no caso de se ter duas RIs,  $i$  e  $j$  não equivalentes, se verifica, para os elementos de matriz, a seguinte equação:

$$\sum_{(R)} \Gamma^{(i)}(R)_{\mu\nu} \Gamma^{(j)}(R^{-1})_{\nu'\mu'} = \frac{h}{l_i} \delta_{ij} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'}. \quad (4.50)$$

Para o caso de representações por matrizes unitárias, tem-se

$$\Gamma^\dagger(R) = \Gamma(R^{-1}),$$

então

$$\sum_{(R)} \Gamma^{(i)}(R)_{\mu\nu} \Gamma^{(j)}(R)_{\mu'\nu'}^* = \frac{h}{l_i} \delta_{ij} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'}, \quad (4.51)$$

onde  $h$  é a ordem de  $\mathcal{G}$ ,  $l_i$  é a dimensão da  $i$ -ésima RI e a  $\sum_{(R)}$  se estende sobre todo elemento  $R$  em  $\mathcal{G}$ .

Primeiro vamos mostrar: a  $\delta_{ij}$ , ou seja, a ortogonalidade com respeito as RIs não equivalentes. Vamos considerar uma matriz  $\mathbf{X}$  arbitrária de  $l_2 \times l_1$  por meio da qual introduzimos uma matriz  $\mathbf{M}$

$$\mathbf{M} = \sum_{(R)} \Gamma^{(2)}(R) \mathbf{X} \Gamma^{(1)}(R^{-1}). \quad (4.52)$$

Podemos mostrar imediatamente que  $\mathbf{M}$  verifica as condições do lema anterior:

$$\Gamma^{(2)}(R) \mathbf{M} = \mathbf{M} \Gamma^{(1)}(R). \quad (4.53)$$

Podemos provar diretamente,

$$\begin{aligned} \Gamma^{(2)}(S) \mathbf{M} &= \Gamma^{(2)}(S) \sum_{(R)} \Gamma^{(2)}(R) \mathbf{X} \Gamma^{(1)}(R^{-1}) \\ &= \sum_{(R)} \Gamma^{(2)}(SR) \mathbf{X} \Gamma^{(1)}(R^{-1}). \end{aligned} \quad (4.54)$$

Na forma final, temos:

$$\Gamma^{(1)}(S^{-1}) \Gamma^{(1)}(S) = \mathbf{1} \quad (4.55)$$

e

$$\Gamma^{(2)}(S)\mathbf{M} = \sum_{(R)} \Gamma^{(2)}(SR)\mathbf{X}\Gamma^{(1)}[(SR)^{-1}]\Gamma^{(1)}(S), \quad (4.56)$$

sendo  $\mathbf{M} = \sum_{(R)} \Gamma^{(2)}(SR)\mathbf{X}\Gamma^{(1)}[(SR)^{-1}]$ , então

$$\Gamma^{(2)}(R)\mathbf{M} = \mathbf{M}\Gamma^{(1)}(R). \quad (4.57)$$

Pelo que mostramos anteriormente,  $\mathbf{M}$  poderia ser distinto de zero somente se as representações fossem equivalentes; neste caso, eles não são, o que implica que  $\mathbf{M} = 0$ . Recordemos que  $\mathbf{X}$  era uma matriz arbitrária qualquer. Um elemento de  $\mathbf{M}$

$$M_{\alpha\beta} = 0 = \sum_{(R)} \sum_{k,\lambda} \Gamma^{(2)}(R)_{\alpha k} X_{k\lambda} \Gamma^{(1)}(R^{-1})_{\lambda\beta}. \quad (4.58)$$

Podemos eleger todos os  $X_{kl} = 0$  exceto  $X_{\gamma\delta} = 1$ , então

$$0 = \sum_{(R)} \Gamma^{(2)}(R)_{\alpha\gamma} \Gamma^{(1)}(R^{-1})_{\delta\beta}. \quad (4.59)$$

Assim está provado para RIs não-equivalentes, ou seja,  $i \neq j$ . No entanto, podemos ter  $i = j$ , e ainda pode-se mostrar a ortogonalidade dentro da mesma RI.

Para  $i = j$  formamos novamente a matriz  $\mathbf{M}$ , assim

$$\mathbf{M} = \sum_{(R)} \Gamma^{(i)}(R)\mathbf{X}\Gamma^{(i)}(R^{-1}), \quad (4.60)$$

como vimos, se verifica que

$$\mathbf{M}\Gamma^{(i)}(R) = \Gamma^{(i)}(R)\mathbf{M} \quad \forall R \in \mathcal{G}, \quad (4.61)$$

pelo lema de Schur segue  $\mathbf{M} = C\mathbf{1}$ , já que por hipótese a representação  $i$  é irredutível.

Tomando o elemento  $\mu\mu'$  de  $\mathbf{M}$ :

$$\mathbf{M}_{\mu\mu'} = C\delta_{\mu\mu'} = \sum_{(R)} \sum_{k,\lambda} \Gamma^{(i)}(R)_{\mu k} X_{k\lambda} \Gamma^{(i)}(R^{-1})_{\lambda\mu'}, \quad (4.62)$$

e assumindo que todos os elementos de matriz  $X_{k\lambda}$  são nulos exceto  $X_{\nu\nu'} = 1$ , temos

$$C_{(\nu\nu')}\delta_{\mu\mu'} = \sum_{(R)} \Gamma^i(R)_{\mu\nu} \Gamma^i(R^{-1})_{\nu'\mu'}, \quad (4.63)$$

onde os índices em  $C$  indicam a particular escolha feita sobre a matriz  $\mathbf{X}$ .

Na última equação, fazendo  $\mu = \mu'$  e somando sobre  $\mu$ :

$$\begin{aligned}
 C_{(\nu\nu')} l_i &= \sum_{(R)} \sum_{\mu} \Gamma^{(i)}(R)_{\mu\nu} \Gamma^{(i)}(R^{-1})_{\nu'\mu} \\
 &= \sum_{(R)} \Gamma^{(i)}(RR^{-1})_{\nu'\nu} \\
 &= \sum_{(R)} \mathbf{1}_{\nu\nu'} \\
 &= \delta_{\nu\nu'} h.
 \end{aligned} \tag{4.64}$$

Isso nos conduz à seguinte igualdade:

$$C_{(\nu\nu')} = \frac{h}{l_i} \delta_{\mu\mu'}. \tag{4.65}$$

Fazendo a soma sobre os elementos do grupo:

$$\sum_{(R)} \Gamma^{(i)}(R)_{\mu\nu} \Gamma^{(i)}(R^{-1})_{\nu'\mu'} = (h/l_i) \delta_{\nu\nu'} \delta_{\mu\mu'}, \tag{4.66}$$

de outra forma:

$$\sum_{(R)} \Gamma^{(i)}(R)_{\mu\nu} \Gamma^{(i)}(R)_{\mu'\nu'}^* = (h/l_i) \delta_{\nu\nu'} \delta_{\mu\mu'}. \tag{4.67}$$

Podemos enunciar da seguinte maneira o *Grande Teorema de Ortogonalidade*: No espaço de  $h$  dimensões dos operadores do grupo, a componente do vetor complexo na "direção"  $R$  é a matriz  $\Gamma(R)$ . Concluimos com a existência de  $(l_i)^2$  vetores, um para cada par de índices  $\mu\nu$ :

$$\Gamma_{\mu\nu}^{(i)} = \begin{pmatrix} \Gamma_{\mu\nu}^{(i)}(E) \\ \Gamma_{\mu\nu}^{(i)}(R_2) \\ \vdots \\ \Gamma_{\mu\nu}^{(i)}(R_{h-1}) \\ \Gamma_{\mu\nu}^{(i)}(R_h) \end{pmatrix}. \tag{4.68}$$

O produto escalar será definido por

$$\begin{aligned}
 \langle \Gamma | \Gamma \rangle &= \Gamma^\dagger \Gamma \\
 &= (\Gamma^{(i)*}(R) \dots) \begin{pmatrix} \Gamma^{(i)}(R) \\ \vdots \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{4.69}$$

Um espaço de dimensão  $h$  possui somente  $h$  vetores linearmente independentes. Aqui temos algo muito importante:

Para cada representação irredutível temos  $(l_i)^2$  vetores linearmente independentes.

Somando todas as RIs esse número de vetores deve permanecer menor ou igual a  $h$ , isto é,

$$\sum_i l_i^2 \leq h, \quad (4.70)$$

mas veremos em seguida que vale o sinal de igual.

Agora sim temos o primeiro resultado importante:

a soma dos quadrados das dimensões das RIs de um grupo é igual à ordem do grupo.

**Exercício:** Mostrar que de acordo com isto não existe um grupo de ordem 4 que possui RIs bidimensionais.

Em efeito, uma representação que temos que é irredutível é a idêntica

$$\begin{array}{c|c|c|c} E & A_2 & A_3 & A_4 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \end{array}$$

Portanto,

$$1 + \sum_{i \neq 1} l_i^2 = 4 \quad (4.71)$$

4 RIs unidimensionais. *Construir as outras.*

Para um grupo de ordem 6, temos

$$1 + \sum_i l_i^2 = 6, \quad (4.72)$$

então temos 2 representações unidimensionais e uma bidimensional, ou seja,  $1 + 1^2 + 2^2 = 6$ .



## 4.15 Caráter de uma representação

Dada uma representação  $\Gamma$ , ao introduzir uma transformação de semelhança obtemos uma *nova* representação do grupo,  $\Gamma'$ . É assim que existe uma certa arbitrariedade na eleição das matrizes de uma dada representação. A quantidade que permanece constante após uma transformação de semelhança é o traço das matrizes envolvidas. Em outras palavras: o traço de uma matriz é invariante frente a uma transformação de semelhança. Define-se o *caráter* da  $j$ -ésima representação por meio dos traços das matrizes que indicaremos com

$$\chi^{(j)}(R) = \sum_{\mu=1}^{l_j} \Gamma^{(j)}(R)_{\mu\mu}. \quad (4.73)$$

Assim, o caráter de uma representação consiste no conjunto de  $h$  números:

$$\chi^{(j)}(E), \chi^{(j)}(R_2), \dots, \chi^{(j)}(R_h). \quad (4.74)$$

Assim é que o traço da matriz que representa a identidade  $E$  do grupo é igual à dimensão da RI:

$$\chi^{(j)}(E) = \sum_{\mu=1}^{l_j} (1) = l_j. \quad (4.75)$$

As matrizes que representam elementos de uma mesma classe podem ser obtidas por meio de transformações de semelhança; como possuem o mesmo traço, têm o mesmo caráter. Concluímos, desse modo, que o caráter é representativo das classes de cada RI. Assim com  $\chi^{(j)}(\mathcal{C}_k)$ , indicamos o caráter da  $k$ -ésima classe da  $i$ -ésima RI. Dito número é comum a todos os elementos da classe  $\mathcal{C}_k$ .

Se no grande Teorema de Ortogonalidade igualamos os subíndices em cada elemento de matriz:

$$\sum_{(R)} \Gamma^{(i)*}(R)_{\mu\mu} \Gamma^{(j)}(R)_{\alpha\alpha} = \frac{h}{l_j} \delta_{ij} \delta_{\mu\alpha}, \quad (4.76)$$

e somamos sobre  $\mu$  e  $\alpha$ , então temos

$$\sum_{(R)} \chi^{(i)*}(R) \chi^{(j)}(R) = \frac{h}{l_j} \delta_{ij} \sum_{\mu,\alpha} \delta_{\mu\alpha} = h \delta_{ij}. \quad (4.77)$$

Portanto, os caracteres formam um conjunto de vetores ortogonais no espaço dos elementos de grupo. Chamando de  $N_k$  o número de elementos em  $\mathcal{C}_k$ , chegamos à seguinte igualdade:

$$\sum_k \chi^{(i)*}(\mathcal{C}_k) \chi^{(j)}(\mathcal{C}_k) N_k = h \delta_{ij}. \quad (4.78)$$

A partir desse resultado concluímos que os caracteres das diferentes RIs formam um conjunto ortogonal no espaço das classes  $\mathcal{C}_k$ . É importante observar o fator peso  $N_k$ . Com isso, mostramos que o número de RIs é menor ou igual ao número de classes, isto é, vale o sinal de igual. Sendo assim:

Número de classes = Número de RIs não equivalentes

Com esse resultado podemos realizar grandes coisas. Aqui começa a ser frutífero este curso. Voltando ao exemplo do grupo  $\mathcal{D}_3$ : Ele possui 3 classes, logo temos 3 RIs diferentes de dimensões  $l_i$ , que satisfazem esta relação:

$$1 + l_2^2 + l_3^2 = 6. \quad (4.79)$$

Portanto, deve cumprir-se  $l_2 = 1$  e  $l_3 = 2$ . Duas representações unidimensionais e uma bidimensional. A primeira é a RI idêntica; a segunda atribui os números  $\pm 1$  e a terceira são as matrizes que mostramos precedentemente.

## 4.16 Tabela de caracteres

Os caracteres das distintas RIs de um grupo  $\mathcal{G}$  são dispostos numa tabela chamada *tabela de caracteres*. As colunas indicam as classes  $\mathcal{C}_k$  precedidas pelo número de elementos que possuem. Assim, no grupo  $\mathcal{D}_3$  as colunas se indicam com:  $\mathcal{C}_1$ ,  $3\mathcal{C}_2$  e  $2\mathcal{C}_3$ . As linhas vêm indicadas pela RI:  $\Gamma^{(i)}$ . Em nosso caso, constrói-se a seguinte tabela:

	$\mathcal{C}_1$	$3\mathcal{C}_2$	$2\mathcal{C}_3$
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1
$\Gamma^{(2)}$	1	-1	1
$\Gamma^{(3)}$	2	0	-1

Assim, a primeira coluna indica a dimensão da RI. A primeira linha consiste em todos os números iguais a 1. As demais linhas e colunas são preenchidas de acordo com os Teoremas de Ortogonalidade, isto é:

$$\sum_{(R)} \Gamma^{(i)*}(R)_{\mu\nu} \Gamma^{(j)}(R)_{\mu'\nu'} = \frac{h}{l_j} \delta_{ij} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'} \quad (4.80)$$

e

$$\sum_k \chi^{(j)*}(\mathcal{C}_k) \chi^{(i)}(\mathcal{C}_k) N_k = h \delta_{ij}. \quad (4.81)$$

A equação (4.81) é verificada para este exemplo. Com efeito,

$$\langle \chi^i | \chi^j \rangle = \sum_k N_k \chi^{(i)*}(\mathcal{C}_k) \chi^{(j)}(\mathcal{C}_k). \quad (4.82)$$

Como exemplo, segue:

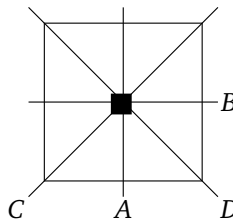
$$\langle \chi^1 | \chi^2 \rangle = 1 - 3 + 2 = 0,$$

$$\langle \chi^3 | \chi^3 \rangle = 4 + 2 = 6,$$

$$\langle \chi^1 | \chi^3 \rangle = 2 - 2 = 0,$$

$$\langle \chi^2 | \chi^2 \rangle = 6.$$

Qualquer outra eleição do requadro inferior  $2 \times 2$  viola as regras de ortogonalidade. Outro exemplo a considerar é o grupo  $\mathcal{D}_4$ , formado pelo conjunto de transformações que deixam o quadrado invariante. O grupo consta de 8 elementos:  $E$ ,  $C_4^\pm$ ,  $C_2$  e  $4C_2^{A,B,C,D}$  e 5 classes. A figura abaixo nos orienta na determinação das classes.



Temos assim:  $\mathcal{C}_1 = E$ ,  $\mathcal{C}_2 = C_4^+, C_4^-$ ,  $\mathcal{C}_3 = C_2$  (eixo  $z$ ),  $\mathcal{C}_4 = C_2^{A,B}$  e  $\mathcal{C}_5 = C_2^{C,D}$ . O número de elementos do grupo deve ser igual à soma dos quadrados das dimensões das RIs:

$$8 = \sum_i l_i^2 = 1 + l_2^2 + l_3^2 + l_4^2 + l_5^2.$$

Necessariamente deve ser  $l_2 = l_3 = l_4 = 1$  e  $l_5 = 2$ . O grupo  $\mathcal{D}_4$  possui 4 RIs de dimensão 1 e uma RI bidimensional. Deixamos como um exercício a construção da tabela de caracteres do grupo  $\mathcal{D}_4$ .

### 4.17 Segunda relação de caracteres

As relações de ortogonalidade entre caracteres indicam que as linhas da tabela são ortogonais, sempre que se tem em conta os pesos  $N_k$ . Mostraremos a seguir que as colunas são ortogonais:

$$\sum_{(i)} \chi^{(i)*}(\mathcal{C}_k) \chi^{(i)}(\mathcal{C}_l) = \frac{h}{N_k} \delta_{kl}. \quad (4.83)$$

Observe-se que a soma é efetuada sobre as distintas RIs. Para o grupo  $\mathcal{D}_3$  essa equação é verificada imediatamente:

primeira coluna consigo mesma	1 + 1 + 4 = 6	$N_k = 1$	$h/N_k = 6$
segunda " " "	1 + 1 = 2	$N_k = 3$	$h/N_k = 2$
terceira " " "	1 + 1 + 1 = 3	$N_k = 2$	$h/N_k = 3$

Outro exercício trivial consiste em mostrar a ortogonalidade entre as classes  $\mathcal{C}_1$ ,  $\mathcal{C}_2$  e  $\mathcal{C}_3$ .

Para mostrar que a equação anterior tem validade geral, formamos a matriz quadrada a partir da tabela de caracteres e que chamaremos de  $\mathbf{Q}$ :

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \chi^{(1)}(\mathcal{C}_1) & \chi^{(1)}(\mathcal{C}_2) & \dots & \chi^{(1)}(\mathcal{C}_n) \\ \chi^{(2)}(\mathcal{C}_1) & \chi^{(2)}(\mathcal{C}_1) & \dots & \\ \vdots & \vdots & & \\ \chi^{(n)}(\mathcal{C}_1) & \dots & \dots & \chi^{(n)}(\mathcal{C}_n) \end{pmatrix}. \quad (4.84)$$

A matriz é quadrada desde que as colunas estejam referidas às classes e as linhas às distintas RIs. É importante lembrar que o número de classes é igual ao número de RIs não equivalentes. Definimos agora uma nova matriz  $\mathbf{Q}'$ , a qual se assemelha à matriz complexa e conjugada da  $\mathbf{Q}$ , mas na qual introduzimos fatores  $N_i/h$  em cada linha  $i$ :

$$\mathbf{Q}' = \begin{pmatrix} \chi^{(1)}(\mathcal{C}_1)^* \frac{N_1}{h} & \chi^{(2)}(\mathcal{C}_1)^* \frac{N_1}{h} & \dots & \chi^{(n)}(\mathcal{C}_1)^* \frac{N_1}{h} \\ \chi^{(1)}(\mathcal{C}_2)^* \frac{N_2}{h} & \chi^{(2)}(\mathcal{C}_2)^* \frac{N_2}{h} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (4.85)$$

Formamos o elemento  $ij$  da matriz produto  $\mathbf{Q}\mathbf{Q}'$

$$(\mathbf{Q}\mathbf{Q}')_{ij} = \sum_k \chi^{(i)}(\mathcal{C}_k) \chi^{(j)}(\mathcal{C}_k)^* \frac{N_k}{h} = \frac{h}{h} \delta_{ij} = \delta_{ij}, \quad (4.86)$$

o que implica que  $\mathbf{Q}' = \mathbf{Q}^{-1}$ . Por conseguinte, deve-se cumprir  $(\mathbf{Q}'\mathbf{Q})_{ij} = \delta_{ij}$ . Obtemos finalmente a importante relação que queríamos mostrar:

$$\sum_{\substack{(i) \\ \text{sobre RI}}} = \chi^{(i)}(\mathcal{C}_k)^* \chi^{(i)}(\mathcal{C}_l) = \frac{h}{N_k} \delta_{kl}. \quad (4.87)$$

o que ajuda na construção da tabela de caracteres.

A ortogonalidade entre os elementos de matriz das RIs não equivalentes implica que a soma dos elementos de matriz de qualquer RI, soma efetuada sobre os elementos do grupo, resulta em zero, exceto no caso da representação idêntica. Ao considerar a tabela de caracteres, a cancelação é obtida levando em conta os fatores de peso  $N_k$ .

## 4.18 Construção de tabelas de caracteres

Enfrentados com o problema de construir a tabela de caracteres de um grupo, podemos colocar no jogo as seguintes regras de ordem prática que foram dadas até o presente momento na forma de teoremas e que nos permitem consolidar a tabela sem precisar construir as matrizes da RI. A lei do mínimo esforço. Temos assim as seguintes regras:

1. O número das RIs não equivalentes é igual ao número de classes. O primeiro para se construir a tabela é verificar quantas classes tem o nosso grupo e, portanto, quantas RIs possui.
2. Dado o teorema  $\sum l_i^2 = h$ , visto em (4.14), um grupo de ordem 4 possui 4 RIs unidimensionais. Como já dissemos, a matriz identidade representa o elemento identidade  $\implies \chi^{(j)}(E) = l_j$  e, temos assim a primeira coluna. A primeira linha da tabela sai da representação idêntica que designa +1 a todos os elementos do grupo:  $\chi^{(1)}(\mathcal{C}_k) = 1 \quad \forall \quad \mathcal{C}_k$ .
3. As linhas são ortogonais e normalizadas por  $h$ , com fator de peso  $N_k$ :

$$\sum_{\substack{(k) \\ \text{classes}}} = \chi^{(i)}(\mathcal{C}_k)^* \chi^{(j)}(\mathcal{C}_k) N_k = h \delta_{ij}. \quad (4.88)$$

4. As colunas da tabela são vetores ortogonais normalizados a  $\frac{h}{N_k}$ , isto é,

$$\sum_{(i)}^{\text{RI}} \chi^{(i)}(\mathcal{C}_k)^* \chi^{(i)}(\mathcal{C}_l) N_k = \frac{h}{N_k} \delta_{kl}. \quad (4.89)$$

## 4.19 Decomposição de representações redutíveis

Assumindo o conceito de redutibilidade de uma representação, o qual diz que, se temos uma representação  $\Gamma$  de um grupo e que, ao passar por uma mesma transformação de semelhança, transforma as  $h$  matrizes  $\Gamma(R_i)$  em uma forma de blocos diagonais com a mesma estrutura, podemos dizer que a representação  $\Gamma'$  é redutível.

$$\Gamma \implies S^{-1} \Gamma(R) S = \begin{pmatrix} \square & & & & \\ & \square & & & \\ & & \square & & \\ & & & \square & \\ & & & & \square \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix} = \Gamma'(R).$$

Em cada bloco se tem matrizes irredutíveis agora de dimensão  $l_i$ , que se repetem  $a_i$  vezes ao longo da diagonal, em geral, nem todas as RIs aparecem.

Como a transformação de semelhança não altera os caracteres, então

$$\text{Tr } \Gamma(R) \equiv \chi(R) = \text{Tr } \Gamma'(R) = \sum_i a_i \chi^{(i)}(R). \quad (4.90)$$

Por razões que veremos muito em breve é vital o conhecimento destes números  $a_i$ , assim chamamos de *números de frequência*. Vejamos como determiná-los.

Se tomamos o produto escalar com  $\chi^{(i)}(R)$ , temos

$$\begin{aligned} \sum_{(R)} \chi^{(i)}(R)^* \chi(R) &= \sum_R^h \sum_j^{\text{RI}} \chi^{(i)}(R)^* a_j \chi^{(j)}(R) \\ &= \sum_j a_j h \delta_{ij} = a_i h, \end{aligned} \quad (4.91)$$

logo,

$$a_i = \frac{1}{h} \sum_R \chi^{(i)}(R)^* \chi(R) = \frac{1}{h} \sum_{\substack{(k) \\ \text{classes}}} N_k \chi^{(i)}(\mathcal{C}_k)^* \chi(\mathcal{C}_k). \quad (4.92)$$

Esta fórmula nos diz que ditos números de frequência podem ser obtidos a partir do conhecimento do caráter da representação redutível  $\Gamma$ . Escrevemos assim:

$$\Gamma \sim \sum a_j \Gamma^{(j)}. \quad (4.93)$$

## 4.20 A representação regular

Vamos introduzir uma representação do grupo de ordem  $h$  por meio das matrizes  $h \times h$ , que podem ser obtidos da seguinte maneira. Escreve-se a tabela de multiplicação do grupo, mas ordenando de sorte que as linhas vão com as inversas das colunas,

	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
$A^{-1}$	A	E	D	F	B	C
$B^{-1}$	B	F	E	D	C	A
$C^{-1}$	C	D	F	E	A	B
$D^{-1}$	F	B	C	A	E	D
$F^{-1}$	D	C	A	B	F	E

Assim, a tabela de multiplicação do grupo contém  $E$  somente na diagonal principal.

Obtém-se a representação regular para o R-elemento colocando  $l$  no lugar em que aparece  $R$  e 0 em todos os outros lados. Dessa maneira, existe somente 1 em cada linha e coluna, isto é,

$$\Gamma^{(\text{reg})}(C) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.94)$$

Com exceção de  $\Gamma^{(\text{reg})}(E)$ , todas as matrizes nessa representação possuem o traço identicamente nulo. Para a identidade, surge  $\chi^{(\text{reg})}(E) = h$  (ordem do grupo).

Ainda não dissemos que essas matrizes constituem uma representação do grupo.

O que temos que mostrar é que essas matrizes cumprem:

$$\Gamma^{(\text{reg})}(B)\Gamma^{(\text{reg})}(C) = \Gamma^{(\text{reg})}(BC), \quad (4.95)$$

em componentes, seria:

$$\Gamma^{(\text{reg})}(BC)A_k^{-1}A_i = \sum_{A_j} \Gamma^{(\text{reg})}(B)A_k^{-1}A_j\Gamma^{(\text{reg})}(C)A_j^{-1}A_i, \quad (4.96)$$

onde os índices das linhas estão referidos às inversas dos operadores, sendo as colunas referidas pelos operadores  $A_i$ .

Mas por construção de representação regular,

$$\Gamma^{(\text{reg})}(R)A_k^{-1}A_j = \begin{cases} 1 & \text{se } A_k^{-1}A_j = R \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}, \quad (4.97)$$

logo, ao somar sobre  $A_j$ , essa soma será 0 a menos que simultaneamente  $\Gamma^{(\text{reg})}(B)A_k^{-1}A_j$  e  $\Gamma^{(\text{reg})}(C)A_j^{-1}A_i$  sejam distintos de 0.

Isso ocorre para algum  $j = l$ , então

$$BC = \underbrace{(A_k^{-1}A_l)}_B \underbrace{(A_l^{-1}A_i)}_C = A_k^{-1}A_i, \quad (4.98)$$

em cujo caso a equação (4.96) dará a identidade, como queríamos provar, pois nesse caso coincide com a definição  $\Gamma^{(\text{reg})}(BC)A_k^{-1}A_i$ .

Logo, a representação regular é uma representação. Recordemos que essa representação tem uma dimensão igual à ordem do grupo. Logo, será redutível.

Ainda vamos apresentar o assim chamado de *celebrado teorema*. Ele determina que a representação regular contenha as RIs do grupo na proporção da dimensão da representação. Em fórmulas, isso diz que  $a_i = l_i$ , ou seja, na representação regular, uma RI de dimensão 1 está contida 1 vez, as bidimensionais 2 vezes, e assim sucessivamente.

Para mostrar isso aplicamos a fórmula que nos dava os números de frequência ao decompor uma representação redutível. Tínhamos que



$$a_j = \frac{1}{h} \sum_R \chi^{(i)}(R)^* \chi^{(\text{reg})}(R) = \frac{1}{h} l_j h = l_j, \quad (4.99)$$

portanto,

$$a_j = l_j. \quad (4.100)$$

Vamos agora, com esse teorema, mostrar que  $\sum_i l_i^2 = h$ . Nós tínhamos que  $\sum_i l_i^2 \leq h$ .

A dimensão da representação regular é  $h$ .  $\Gamma^{(\text{reg})}(E) = h$ , temos, além disso, reduzido uma representação

$$\chi(R) = \sum_j a_j \chi^{(j)}(R) = \sum_j l_j \chi^{(j)}(R), \quad (4.101)$$

tomando  $R = E$ , tem-se

$$h = \sum l_j l_j = \sum l_j^2. \quad (4.102)$$

O que acontece com os grupos *abelianos*? Cada elemento é uma classe em si mesma, portanto, o número de classes é igual a  $h$ , que, por sua vez, é igual ao número de RIs não equivalentes.

Da expressão

$$\sum_{i=1}^h l_i^2 = h \implies l_i = 1 \quad \forall i = 1, 2, \dots, h \quad (4.103)$$

ou seja, que os grupos abelianos somente possuem representações irredutíveis unidimensionais.

Até aqui o que fizemos foi construir a base da teoria de representações e levantar os pilares com os lemas mostrados. Queremos levar isso à física, onde enfrentamos o problema de resolver uma equação de autovalores,

$$H_{\text{eff}} \Psi = E \Psi, \quad (4.104)$$

onde, se tivermos sorte,  $H_{\text{eff}}$  possui algumas propriedades de simetria. Com isso queremos dizer que existem sistemas físicos manipulados por um certo Hamiltoniano efetivo que resulta invariante frente a certas operações, tais como rotações, translações, permutações de partículas idênticas, etc.

As implicações dessas invariâncias são o que vamos a tratar em seguida. Veremos que ainda no caso de não podermos resolver exatamente

a equação de autovalores, coisa por outra parte muito frequente, já que os únicos sistemas de solução exata são o oscilador harmônico e o átomo de hidrogênio, podemos ao menos dizer que a função de onda deve se comportar de uma maneira bem definida.

Deve-se enfatizar que a Teoria de Grupos não nos dá os números finais, ou seja, as energias e as *corretas autofunções*, mas nos diz como devem ser essas autofunções sem ter que fazer nenhuma conta. Esta é uma das coisas que podemos extrair dos grupos. Será necessário dar agora uma formulação matemática do problema das simetrias, isto é, as operações que deixam o nosso  $H_{\text{eff}}$  invariante.

Assim, entramos na aplicação dessas coisas à Mecânica Quântica, sendo naturalmente nosso interesse primordial.

## 4.21 Operadores de transformação

Associado com cada problema físico temos um operador  $H_{\text{eff}}$  que apresenta certas simetrias, em outras palavras, existe um grupo de operações que deixam invariante nosso Hamiltoniano. Vamos discutir o problema das rotações sem perda de generalidade. Simplesmente precisamos ver como operar com essas coisas.

Nos interessam as matrizes  $\mathbf{R}$  que descrevem rotações próprias ou impróprias, ou seja, rotações puras ou roto-inversão. Tais matrizes que operam em  $\mathcal{R}_3$  são ortogonais, caso particular de matrizes unitárias, isto é, o mesmo que dizer que  $\mathbf{R}$  é uma tal matriz que sua transposta coincide com  $\mathbf{R}^{-1}$ , então

$$\mathbf{R}\tilde{\mathbf{R}} = \tilde{\mathbf{R}}\mathbf{R} = \mathbf{1}, \quad (4.105)$$

ou seja,  $(R^{-1})_{ij} = R_{ji}$ .

Ante  $\mathbf{R}$

$$\mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{x}' = \mathbf{R}\mathbf{x}, \quad (4.106)$$

ou melhor,

$$x'_i = \sum_j R_{ij} x_j. \quad (4.107)$$

A transformação inversa dá  $\mathbf{x}$  a partir de  $\mathbf{x}'$ ;

$$\mathbf{x} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{x}' = \tilde{\mathbf{R}}\mathbf{x}' \quad (4.108)$$

ou

$$\begin{aligned} x_i &= \sum (R^{-1})_{ij} x'_j \\ &= \sum R_{ji} x'_j. \end{aligned} \quad (4.109)$$

Portanto, as expressões (4.107) e (4.109) proporcionam a transformação de coordenadas.

Temos aqui um grupo de matrizes que operam em  $\mathcal{R}_3$ . Vamos introduzir um grupo de operadores que são isomorfos a esse grupo de matrizes. Existe uma correspondência 1 a 1 entre cada matriz e cada operador de transformação.

Esses operadores atuam sobre nossas funções que estão em algum espaço vetorial, por exemplo, o espaço de *Hilbert*. Introduzimos o isomorfismo:  $\{\mathbf{R}\} \longleftrightarrow \{R\}$ , isto é,

$$(\text{matriz}) \{\mathbf{R}\} \longleftrightarrow \{R\} (\text{operador}).$$

A ação do operador sobre a função de onda deve ser isomórfica ao grupo de matrizes que transformam as coordenadas  $\mathbf{R}$ . Para que tal aconteça, definimos operador  $R$  assim:

$$Rf(\mathbf{x}) \equiv f(\mathbf{R}^{-1}\mathbf{x}), \quad (4.110)$$

sendo que este grupo de transformações é isomorfo ao  $\{\mathbf{R}\}$ .

Devemos mostrar que ao produto  $\mathbf{SR} \longrightarrow$  o operador  $SR$ , ou seja,

$$SRf(\mathbf{x}) = Sf(\mathbf{R}^{-1}\mathbf{x}) = Sg(\mathbf{x}) = g(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{x}), \quad (4.111)$$

sendo

$$g(\mathbf{x}) \equiv f(\mathbf{R}^{-1}\mathbf{x}) \quad \therefore \quad g(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{x}) = f(\mathbf{R}^{-1}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{x}), \quad (4.112)$$

portanto,

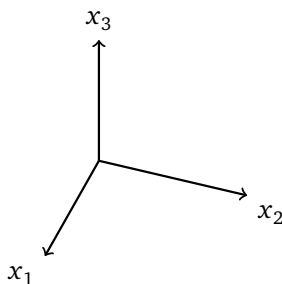
$$SRf(\mathbf{x}) = f[(\mathbf{SR})^{-1}\mathbf{x}]. \quad (4.113)$$

Ao operador produto  $SR$  corresponde a transformação de coordenadas  $\mathbf{SR}$ , como queremos mostrar. As vantagens da definição (4.110) se mostram ao se trabalhar com o espaço recíproco. Se em  $\mathcal{R}_3$  é preciso realizar a rotação  $\mathbf{R}^{-1}$ , em  $\mathbf{k}$  a rotação é a inversa

$$\mathbf{Rk} = \mathbf{k}'. \quad (4.114)$$

Vejam como operar com isso. Se você tem uma rotação do eixo  $x_1$  em  $\pi/2$ , então a matriz é dada por:

$$\mathbf{R}_X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$



e da equação (4.107), temos:

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_1 \\ x'_2 &= x_3 \\ x'_3 &= -x_2, \end{aligned} \quad (4.115)$$

em notação matricial:

$$\mathbf{R}_X \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ z \\ -y \end{pmatrix} \quad (4.116)$$

e

$$\tilde{\mathbf{R}}_X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.117)$$

sendo  $\mathbf{R}_X \tilde{\mathbf{R}}_X = \mathbf{1}$ , logo

$$\tilde{\mathbf{R}}_X \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ -z \\ y \end{pmatrix}. \quad (4.118)$$

Dessa maneira a transformação  $\tilde{\mathbf{R}} = \mathbf{R}^{-1}$  satisfaz a equação (4.107) do operador transformação.

Interessa ver como se transformam os orbitais atômicos, por exemplo, em estudo de moléculas e de sólidos.

Nos estudos de moléculas e sólidos temos que construir funções de onda a partir de orbitais atômicos, sendo que na química molecular se fala, por exemplo, MO (*Molecular Orbital*) e em sólidos de LCAO (*Linear Combination of Atomic Orbitals*).

Em particular, podemos considerar os três orbitais  $p$ :

$$p_x = x\varphi(r), \quad p_y = y\varphi(r), \quad \text{e} \quad p_z = z\varphi(r), \quad (4.119)$$

onde  $\varphi(r)$  depende do módulo  $r$ , sendo por consequência invariante frente a qualquer operação pontual. Para saber como se transformam esses orbitais é necessário somente ver como se transformam as componentes  $x$ ,  $y$  e  $z$ .

Vamos aplicar a rotação indicada por  $Rf(\mathbf{x}) \equiv f(\mathbf{R}^{-1}\mathbf{x})$ , logo

$$Rp_x = p_x, \quad Rp_y = -p_z, \quad e \quad Rp_z = p_y. \quad (4.120)$$

### 4.21.1 Grupo da Equação de Schrödinger

Como já sabemos, os sistemas físicos são governados por um certo  $H_{\text{eff}}$ , o qual apresentava certas propriedades de simetria, tal como a de ser invariante frente a um grupo de operações  $\mathcal{G}$ . Agora estamos em melhores condições de entender isso, pois já sabemos como atuam os operadores.

Se o potencial é central, ou seja, depende somente do módulo do vetor  $\mathbf{r}$ , é claro que qualquer rotação deixa inalterado  $V(r)$ , já que aplicando a definição do operador, temos:

$$RV(r) = V(\mathbf{R}^{-1}\mathbf{r}) = V(r). \quad (4.121)$$

**Exemplos:** Átomo de hidrogênio, oscilador harmônico tridimensional isotrópico, entre outros.

O mesmo acontece com o operador Energia Cinética:

$$T \equiv - \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}. \quad (4.122)$$

Assim, para um Hamiltoniano que é invariante frente a um grupo de operações de rotações, pode-se afirmar que os operadores do grupo comutam com o Hamiltoniano:

$$[\mathcal{G}, H] = 0. \quad (4.123)$$

O tal grupo de operadores que comuta com o Hamiltoniano de nosso sistema físico chama-se *Grupo da Equação de Schrödinger*.

Vejamos as consequências da existência de um tal grupo da Equação de Schrödinger. Se tenho a equação estacionária

$$H\varphi_n = E_n\varphi_n, \quad (4.124)$$

e aplicamos qualquer operador de  $\mathcal{G}$ , se tem que a função de  $R\varphi_n$  é também um autoestado de  $H$  degenerado com o  $\varphi_n$ . Em efeito,

$$R(H\varphi_n) = H(R\varphi_n) = E_n(R\varphi_n). \quad (4.125)$$

Assim é que nós, a partir de um autoestado e por aplicação dos operadores do grupo, podemos gerar as autofunções degeneradas correspondentes a um dado autovalor e selecionar, dentre elas, as que são linearmente independentes.

Por exemplo, o que acontece com o átomo de hidrogênio se  $n = 2$ . Temos as funções  $p_x$ ,  $p_y$  e  $p_z$  degeneradas entre si e podemos obter umas das outras por rotações, neste caso, em  $\pi/2$  em torno de cada um dos eixos.

Lembrar que as autofunções correspondentes aos números quânticos:  $n = 2$  e  $l = +1, 0, -1$  são os orbitais  $p_z$  e  $p_x \pm ip_y$ . Mas também o nível  $2S$ , que é totalmente inalterado pelas rotações, possui a mesma energia. Os casos em que todos os níveis degenerados são obtidos a partir das transformações  $R$ , tratam-se de uma degenerescência normal.

O caso do hidrogênio é acidental, apesar de possuir distintas propriedades de simetria, os orbitais  $2s$  e  $2p$  são degenerados. O que ocorre é que nesse problema, existem outras simetrias além daquelas indicadas pela separação do problema em coordenadas esféricas.

## 4.22 Funções de base para representações irredutíveis

Suponhamos ter um nível  $\varphi_n$  degenerado com degenerescência  $l_n$ , isso quer dizer que existem  $l_n$  funções linearmente independentes, todas correspondentes ao autovalor  $E_n$ .

O que acontece quando aplicamos os operadores do grupo  $\mathcal{G}$ ? Produzimos outras funções degeneradas entre si, as quais serão expressas como combinações lineares das  $l_n$  funções.

Sendo assim, a ação de  $\mathcal{G}$  sobre as  $\varphi_n$  pode ser uma mistura conveniente, dependendo do que se quer enfatizar nestas novas funções  $\varphi_n$  misturadas. Então, tem-se um espaço de dimensão  $l_n$ , que é um subespaço do espaço de Hilbert subentendido pelas autofunções de  $H$ . Para esse subespaço, dizemos que permanece invariante frente a  $\mathcal{G}$ . Assim, temos uma mistura de funções quando atuamos com algum  $R$ :

$$R\varphi_\nu = \sum_{k=1}^{l_n} \varphi_k \Gamma_{k\nu}(R). \quad (4.126)$$

As matrizes  $\Gamma$  dão a combinação linear das autofunções degeneradas quando aplicamos  $R \in \mathcal{G}$ .

Para fazer uma distinção apropriada entre essas operações, precisamos introduzir: (a) um superíndice  $n$  nestas matrizes e nas funções de onda, referidas ao nível  $E_n$ ; (b) subíndices, que por sua vez, indicam de qual das  $l_n$  funções se trata;

$$R\varphi_\nu^{(n)} = \sum_{k=1}^{l_n} \varphi_k^{(n)} \Gamma_{k\nu}^{(n)}(R). \quad (4.127)$$

No entanto, é melhor introduzir uma linguagem matricial, onde introduzimos um vetor linha de  $l_n$  componentes  $\varphi^{(n)}$ :

$$\varphi^{(n)} \equiv (\varphi_1^{(n)}, \varphi_2^{(n)}, \dots, \varphi_{l_n}^{(n)}), \quad (4.128)$$

e matrizes  $\Gamma^{(n)}(R)$  de dimensão  $l_n \times l_n$ , então as  $l_n$  equações podem ser escritas de forma mais semelhante:

$$R\varphi^{(n)} = \varphi^{(n)}\Gamma^{(n)}(R). \quad (4.129)$$

Essas matrizes  $\Gamma$  formam uma representação que é também uma representação irredutível do grupo  $\mathcal{G}$ . Infere-se que é uma representação irredutível se, ao se aplicar os operadores do grupo sobre algumas delas, elas se misturem. Isso diz que elas não podem ser mais redutíveis do que as matrizes  $\Gamma$  introduzidas por meio de (1) e (1').

Continua a ser provado que o produto  $SR$  corresponde à matriz:

$$\Gamma(S)\Gamma(R) = \Gamma(SR). \quad (4.130)$$

É muito fácil mostrar em notação condensada:

$$SR\varphi = S(R\varphi) = S(\varphi\Gamma(R)) = (S\varphi)\Gamma(R) = \varphi\Gamma(S)\Gamma(R), \quad (4.131)$$

logo,

$$SR\varphi = \varphi\Gamma(SR) = \varphi\Gamma(S)\Gamma(R). \quad (4.132)$$

Concluimos assim: As  $l_n$  funções degeneradas  $\varphi^n \equiv (\varphi_1^{(n)}, \varphi_2^{(n)}, \dots, \varphi_{l_n}^{(n)})$  correspondentes ao autovalor  $E_n$  formam uma base de funções para uma representação irredutível de dimensão  $l_n$  do grupo  $\mathcal{G}$  da equação de Schrödinger.

*Corolário: Se a base é ortogonal, as matrizes da representação são unitárias.*

Como podemos ver novamente as vantagens da notação matricial:  $\{\varphi_y^{(n)}\}$  é ortogonal, então

$$\int \varphi^\dagger \varphi d\mathbf{x} = \mathbf{1}, \quad (4.133)$$

sendo a dimensão  $(l_n \times l_n)$  e

$$\varphi^\dagger \equiv \begin{pmatrix} \varphi_1^{(n)*} \\ \vdots \\ \varphi_{l_n}^{(n)*} \end{pmatrix}, \quad (4.134)$$

já que  $\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$ . Então, temos que mostrar que, por unitariedade dos operadores de rotação,

$$\Gamma(R)\Gamma^\dagger(R) = \mathbf{1} \quad \forall R. \quad (4.135)$$

Partindo da ortogonalidade das funções  $\varphi$

$$\int [R\varphi]^\dagger [R\varphi] d\mathbf{x} = \int \varphi^\dagger \varphi d\mathbf{x} = \mathbf{1}, \quad (4.136)$$

elaborando o primeiro membro da igualdade:

$$\begin{aligned} \int [\varphi\Gamma(R)]^\dagger \varphi\Gamma(R) d\mathbf{x} &= \int \Gamma^\dagger(R)\varphi^\dagger\varphi\Gamma(R) d\mathbf{x} = \mathbf{1} \\ &= \Gamma^\dagger(R)\mathbf{1}\Gamma(R), \end{aligned} \quad (4.137)$$

temos como consequência que

$$\Gamma^\dagger(R)\Gamma(R) = \mathbf{1}. \quad (4.138)$$

Vejamos como a Teoria de Grupo nos fornece bons números quânticos. Da base  $\varphi^{(n)}$ , passamos à nova base  $\varphi'$ , tal que

$$\varphi' = \varphi\alpha, \quad (4.139)$$

ou em componentes  $\varphi'_y = \sum_k \varphi_k \alpha_k$ , pode-se deduzir que

$$\varphi = \varphi'\alpha^{-1}. \quad (4.140)$$

Vejamos como se transforma a nova base frente aos operadores do grupo:



$$R\varphi' = R\varphi\alpha = \varphi\Gamma(R)\alpha = \varphi'\alpha^{-1}\Gamma(R)\alpha, \quad (4.141)$$

se definimos

$$\Gamma'(R) = \alpha^{-1}\Gamma(R)\alpha, \quad (4.142)$$

resulta:

$$R\varphi' = \varphi'\Gamma'(R). \quad (4.143)$$

A mudança de base nos faz passar a outra representação da  $\Gamma'$ , a qual é equivalente à velha.

Dessa maneira, podemos dizer que exceto por uma transformação de semelhança, para cada autovalor da equação de Schrödinger há uma representação única do grupo de  $\mathcal{H}$ . Assim, um conjunto de autofunções pode ser classificado de maneira única de acordo com a RI à qual pertence. É dessa maneira que a teoria nos fornece bons números quânticos, ao mesmo tempo que a análise da dimensão  $l_j$  da RI nos fornece a degenerescência do nível. Assim é que podemos fazer estimativas sem a necessidade de efetuar cálculos sobre a remoção da degenerescência, fato que ocorrerá em geral se reduzirmos a simetria, ou seja, reduzirmos a ordem do grupo; isso faz com que o  $l_i$  (para algum  $l_i$ ) seja menor para o novo grupo de menor simetria.

**Vejamos o seguinte exemplo:** sejam três prótons e um elétron. Supondo que o grupo de interesse seja o  $\mathcal{D}_3$  somente, a inclusão da reflexão pelo plano não vai interferir nessa análise. Temos representações irredutíveis de dimensão 1 e 2, portanto, a degenerescência será no máximo de ordem 2. O que acontece com as autofunções? Sabemos que se cumpre:

$$R\varphi^{(n)} = \varphi^{(n)}\Gamma^{(n)}(R). \quad (4.144)$$

Para as representações unidimensionais, temos simplesmente que

$$R\varphi = \varphi \underbrace{\Gamma(R)}_{n^\circ}. \quad (4.145)$$

Assim a função correspondente à representação idêntica é inalterada, já que

$$\forall R \quad \Gamma^{(1)}(R) = 1 \quad \text{e} \quad R\varphi^{(1)} = \varphi^{(1)}.$$

Para a representação que chamamos de  $\Gamma^{(2)}$ , teríamos

$$\Gamma^{(2)} \left| \begin{array}{ccc} \mathcal{C}_1 & 3\mathcal{C}_2 & 2\mathcal{C}_3 \\ 1 & -1 & 1 \end{array} \right.$$

Assim é que a função de onda correspondente a essa simetria troca de sinal ao efetuar quaisquer das rotações  $\mathcal{C}_2$ :

$$\begin{aligned} R = C_2^{A,B,C} &\implies R\varphi^{(2)} = -\varphi^{(2)}, \\ R = E, C_3^\pm &\implies R\varphi^{(2)} = \varphi^{(2)}. \end{aligned} \quad (4.146)$$

As funções de base que podem apresentar alguma complicação são as que correspondem a  $\Gamma^{(3)}$ . Ali temos matrizes  $(2 \times 2)$ ,  $\Gamma(R)$ , e consequentemente,  $\varphi$  é um vetor linha  $(1 \times 2)$

$$\varphi^{(3)} \equiv (\varphi_1^{(3)}, \varphi_2^{(3)}). \quad (4.147)$$

Consideremos, por exemplo, o operador  $B$ . Como vimos anteriormente, a matriz que o representa é:

$$\Gamma(B) = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}. \quad (4.148)$$

Já estamos em condição de solucionar

$$\begin{aligned} B\varphi^{(3)} &= (\varphi_1^{(3)}, \varphi_2^{(3)}) \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix} \\ &= \left( -\frac{1}{2}\varphi_1^{(3)} + \frac{\sqrt{3}}{2}\varphi_2^{(3)}, \frac{\sqrt{3}}{2}\varphi_1^{(3)} + \frac{1}{2}\varphi_2^{(3)} \right), \end{aligned} \quad (4.149)$$

logo

$$B\varphi_1^{(3)} = -\frac{1}{2}\varphi_1^{(3)} + \frac{\sqrt{3}}{2}\varphi_2^{(3)} \quad (4.150)$$

e

$$B\varphi_2^{(3)} = \frac{\sqrt{3}}{2}\varphi_1^{(3)} + \frac{1}{2}\varphi_2^{(3)}. \quad (4.151)$$

São evidentes as vantagens de se usar a notação matricial. Vemos assim que as propriedades da transformação das funções são dadas pela RI à qual pertence. Isso se refere a quando se fala sobre a simetria da função de onda.

## 4.23 Grupos abelianos

Havíamos visto que as RIs para um tal grupo eram todas unidimensionais, o que implica que não existem níveis degenerados para um sistema

governado por um Hamiltoniano tal que resulta invariante frente às transformações do grupo abeliano  $\mathcal{G}$ .

Vejamos uma classe particular dos grupos abelianos, os *cíclicos*:

$$\{\mathcal{G}\} = E, R_2, \dots, R_n, \quad (4.152)$$

tal que  $R_2 = A, R_3 = A^2 \dots A^h = E$  ou

$$\{\mathcal{G}\} = A^h A A^2, \dots, A^{h-1}.$$

Chamando  $\Gamma(A) = r$ , um número puro, já que a RI é de dimensão 1, além disso, como  $A^h = E \implies [\Gamma(A)]^h = r^h = 1$ . Portanto, existem  $h$  valores distintos de  $r$  que formam as  $h$  raízes da identidade

$$r = e^{\frac{2\pi i p}{h}}, \quad p = 0, 1, \dots, h-1, \quad (4.153)$$

cada um desses distintos valores de  $\Gamma(A)$  está associado às distintas representações irredutíveis do grupo cíclico ( $h$  representações):

$$\Gamma^{(p)}(A) = e^{\frac{2\pi i p}{h}}. \quad (4.154)$$

## 4.24 Estrutura cristalinas e o Teorema de Bloch

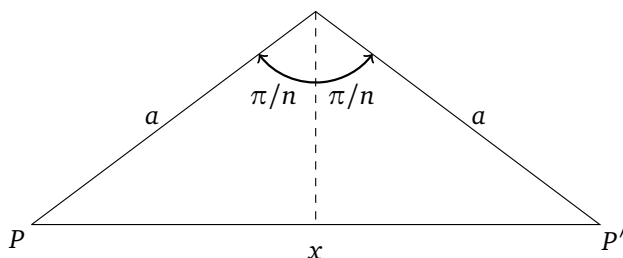
A seguir trataremos da aplicação das técnicas da teoria de grupos a sistemas cristalinos, isto é, sistemas governados por potenciais periódicos. O grupo de simetria associado a dito potencial resulta do produto direto de um grupo pontual das rotações com o grupo das translações. Este grupo é chamado de *grupo espacial*. Existem, no total, 230 grupos espaciais (KOSTER et al., 1966; SLATER, 1965).

Dada uma certa simetria cristalina, ela determina o tipo de rotações compatíveis com as translações do cristal. Assim, por exemplo, se aplicamos uma rotação  $C_n$  a um segmento que conecta dois pontos da rede distantes em  $a$ , teremos que o ponto rotacionado não pode estar a uma distância menor que  $a$ .

Isso é, se chamamos  $x$  o segmento que une os pontos  $P$  e  $P'$ , temos

$$2x = 2a \operatorname{sen}(\pi/n) \geq a. \quad (4.155)$$

Isto implica que  $\operatorname{sen}(\pi/n) \geq 1/2$ . Como ilustração, veja a figura abaixo:



Essa condição exclui rotações com  $n > 6$ . O caso ( $n = 5$ ) é incompatível com a simetria cristalina pelo fato de que, com pentágonos, não é possível preencher todo o espaço. Ver, por exemplo, na página 7 da referência (KITTEL, 1971).

### 4.24.1 Teorema de Bloch

O Teorema de Bloch foi introduzido na segunda década do século 20 (BLOCH, 1929), isto é, nos alvares da Mecânica Quântica. Refere-se às autofunções de um Hamiltoniano que é periódico, tal como ocorre em um cristal perfeito. Em uma tal estrutura, definimos três vetores ( $\mathbf{t}_1$ ,  $\mathbf{t}_2$  e  $\mathbf{t}_3$ ) que, por simples repetição, nos recorre toda a estrutura. A periodicidade do Hamiltoniano acontece em função da estrutura do potencial:

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l), \quad (4.156)$$

onde  $\mathbf{R}_l = \sum l_i \mathbf{t}_i$ , com  $l_i$  sendo números inteiros.

Definimos agora os operadores de translação por meio de:

$$T(\mathbf{R}_l)f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l). \quad (4.157)$$

Estes operadores estão no grupo de H, de modo que:

$$[T, H] = 0. \quad (4.158)$$

Em princípio, temos  $\infty^3$  operadores, mas se aplicamos condições periódicas de Born-von Karman,

$$f(\mathbf{r} + N_1 \mathbf{t}_1) = f(\mathbf{r} + N_2 \mathbf{t}_2) = f(\mathbf{r} + N_3 \mathbf{t}_3), \quad (4.159)$$

com  $N_i \gg 1$  (inteiro).

Portanto, vamos ter em total um conjunto de  $N$  operadores =  $N_1 N_2 N_3$  que saem de

$$[T(\mathbf{t}_1)]^{N_1} = [T(\mathbf{t}_2)]^{N_2} = [T(\mathbf{t}_3)]^{N_3} = E. \quad (4.160)$$

Temos assim um grupo abeliano, *não cíclico* (seria cíclico no caso unidimensional).

Os operadores de translação são unitários e isso implica que os números que dão as distintas RIs são de módulo 1.

Em efeito, se calculamos

$$\langle f|f \rangle = \langle f|T^\dagger T|f \rangle = \langle Tf|Tf \rangle. \quad (4.161)$$

Por outro lado, chamando de  $\mathbf{a}$  a matriz da transformação, então

$$T(\mathbf{R}_l)f = \mathbf{a}f, \quad (4.162)$$

logo  $\langle f|f \rangle = \mathbf{a}^*\mathbf{a} \langle f|f \rangle$ , somente se  $\mathbf{a}^*\mathbf{a} = |\mathbf{a}|^2 = 1$ , sendo  $\mathbf{a} = e^{i\theta}$ .

Fisicamente, se aplicamos uma transformação em  $\mathbf{R}_l$  na função de onda devemos esperar que, como o potencial no ponto transladado é o mesmo, a probabilidade de encontrá-la nesse ponto seja igual a encontrá-la em  $\mathbf{r}$ :

$$|\varphi(\mathbf{r})|^2 = |\varphi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l)|^2 = |\mathbf{a}|^2 |\varphi(\mathbf{r})|^2, \quad (4.163)$$

mas como  $|\mathbf{a}|^2 = 1$ , verifica-se que a probabilidade nos diferentes pontos do espaço será a mesma.

O autovalor do operador de translação ou a matriz da representação deve estar caracterizada pela translação  $\mathbf{R}_l$ , além disso, deve-se cumprir que

$$T(\mathbf{R}_l)T(\mathbf{R}_n) = T(\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_l). \quad (4.164)$$

Definindo que

$$T(\mathbf{R}_l) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}, \quad (4.165)$$

então

$$T(\mathbf{R}_l)f(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}f(\mathbf{r}), \quad (4.166)$$

onde o vetor  $\mathbf{k}$  denota as distintas RIs, todas unidimensionais contidas em  $\{\mathbf{T}\}$ , grupo de ordem  $N = N_1N_2N_3$ . Por conseguinte, agregamos à função de onda um índice  $\mathbf{k}$ , isto é,

$$T(\mathbf{R}_l)f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (4.167)$$

sendo  $[k] = L^{-1}$ .

Vamos obter as distintas RIs. Para isso, introduzimos a base do espaço recíproco, sendo uma terna de vetores  $\{\mathbf{b}_i\}$  tal que

$$\mathbf{b}_1 = \frac{\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3}{\Omega_0}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{\mathbf{t}_3 \times \mathbf{t}_1}{\Omega_0} \quad \text{e} \quad \mathbf{b}_3 = \frac{\mathbf{t}_1 \times \mathbf{t}_2}{\Omega_0}, \quad (4.168)$$

onde  $\Omega_0$  é o volume da célula unitária, definido por:

$$\Omega_0 = \mathbf{t}_1 \cdot (\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3). \quad (4.169)$$

Além disso, é fácil verificar que  $t_j \cdot b_j = \delta_{ij}$ , sendo  $[b_i] = L^{-1}$ .

Expressamos assim nesta base os vetores do chamado *espaço recíproco*:

$$\mathbf{k} = 2\pi \sum_{i=1}^3 \xi_i \mathbf{b}_i. \quad (4.170)$$

As condições de periodicidade de Born-von Karman conduzem às seguintes expressões:

$$e^{i\mathbf{k} \cdot N_i \mathbf{t}_i} = e^{2\pi i \xi_i N_i} = 1, \quad (4.171)$$

para  $i = 1, 2, 3$ . Isso determina os seguintes valores permitidos das variáveis  $\xi_i$ :

$$\xi_i^j = \frac{j}{N_i} \quad j = 0, \dots, N_i - 1. \quad (4.172)$$

Temos assim as componentes do vetor  $\mathbf{k}$  dadas por:

$$k_1^j = \frac{2\pi j}{N_1}, \quad k_2^l = \frac{2\pi l}{N_2} \quad \text{e} \quad k_3^m = \frac{2\pi m}{N_3},$$

sendo ( $j = 0, \dots, N_1 - 1$ ), ( $l = 0, \dots, N_2 - 1$ ) e ( $m = 0, \dots, N_3 - 1$ ).

Em total temos  $N = N_1 N_2 N_3$  distintos valores de  $\mathbf{k}$  que caracterizam as  $N$  diferentes RIs do grupo das translações.

Temos assim um resultado muito importante: temos tantos valores de  $\mathbf{k}$  como número de células no volume de Born-von Karman.

O Teorema de Bloch se escreve:

$$T(\mathbf{R}_l) f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (4.173)$$

## Rede recíproca

Os vetores

$$\mathbf{K} = 2\pi \sum_{i=1}^3 h_i \mathbf{b}_i \quad (4.174)$$

descrevem a *rede recíproca* da estrutura cristalina, sendo  $h_i$  números inteiros. Fazendo o produto escalar com vetores da rede direta:

$$\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{R}_l = 2\pi \sum_{i=1}^3 h_i l_i = 2\pi M, \quad (4.175)$$

onde  $M$  é um número inteiro. Partindo de uma função  $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  e adicionando um vetor  $\mathbf{K}_h$  à função, vejamos como ela se transforma:

$$\begin{aligned} T(\mathbf{R}_l)\varphi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_h}(\mathbf{r}) &= e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_h)\cdot\mathbf{R}_l} \varphi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_h}(\mathbf{r}) \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} e^{i\mathbf{K}_h\cdot\mathbf{R}_l} \varphi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_h}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (4.176)$$

Mas pela propriedade do produto escalar, temos:

$$T(\mathbf{R}_l)\varphi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_h}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} \varphi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_h}(\mathbf{r}), \quad (4.177)$$

isto é, a onda com  $\mathbf{k}+\mathbf{K}_h$  se transforma de maneira idêntica à onda  $\mathbf{k}$ . Daqui podemos definir tudo em termos do vetor  $\mathbf{k}$ . Esse vetor em um problema periódico caracteriza a RI, sendo definitivamente um bom número quântico.

Portanto, a função de uma dada RI passará a ser escrita assim:

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}); \quad (4.178)$$

aplicando uma translação em  $\mathbf{R}_l$ , temos  $e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R}_l)} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}_l)$ , o qual deve ser igual a  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  e, portanto, a função  $u_{\mathbf{k}}$  deve ser periódica, isto é,

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l). \quad (4.179)$$

Portanto, a função de Bloch é uma função periódica modulada como uma onda plana.

Analisamos como se transforma uma onda de Bloch frente às translações. Agora vamos mostrar as propriedades de transformação da onda de Bloch frente às rotações  $R$  do grupo de simetria cristalina. Definimos a aplicação de um operador do grupo sobre uma função de onda da seguinte maneira:

$$R\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(R^{-1}\mathbf{r}). \quad (4.180)$$

Considerando  $S = R^{-1}$  os vetores de base do espaço direto que se transformam como:  $S\mathbf{t}_j = \mathbf{t}'_j$ ; temos que o produto escalar  $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{t}_j$  se transforma assim:

$$\mathbf{b}_i \cdot S\mathbf{t}_j = S^{-1}\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{t}_j; \quad (4.181)$$

a igualdade é consequência da ortogonalidade dos operadores de rotação:  $SS^{-1} = E$ . Essa relação demonstra o fato de que uma rotação no espaço direto é equivalente a uma rotação *inversa* no espaço recíproco. Temos

assim duas opções para analisar as transformações das funções de onda: a) utilizando a equação da transformação da onda no espaço direto ou b) realizando a operação inversa no espaço  $\mathbf{k}$ . Utilizando a segunda opção equivalente, o vetor  $\mathbf{k}$  se transforma de acordo com  $\mathbf{k}' = S^{-1}\mathbf{k} = R\mathbf{k}$ . Aplicando este resultado às ondas de Bloch, temos:

$$Rf_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = f_{R\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (4.182)$$

### O grupo do vetor de onda

Esse importante resultado demonstra com ênfase as vantagens da definição da ação do operador  $R$  sobre uma função de onda. Com efeito, para construir funções simetrizadas a partir de ondas de Bloch, é suficiente conhecer as transformações dos vetores (pontos) no espaço recíproco frente às operações  $R$  do grupo de simetria do Hamiltoniano. Vimos que o vetor  $\mathbf{k}$  é um bom número quântico que caracteriza as diferentes RIs. O conjunto de operadores que deixam  $\mathbf{k}$  invariante é um subgrupo do grupo do cristal, que chamamos de *grupo do vetor de onda*  $\mathcal{G}_{\mathbf{k}}$ . Na construção dos operadores de projeção sobre as diferentes RIs, são os operadores do grupo  $\mathcal{G}_{\mathbf{k}}$  que devem ser incluídos, desde que eles deixem o vetor de onda  $\mathbf{k}$  invariante.

### Zona de Brillouin

Havíamos introduzido as RIs e as funções de base para essas RIs do grupo abeliano de ordem  $N$ , constituído pelas translações  $T(\mathbf{R}_l)$ , por meio de

$$T(\mathbf{R}_l)f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (4.183)$$

sendo

$$\kappa_1^j = \frac{2\pi j}{N_1}, \quad \kappa_2^l = \frac{2\pi l}{N_2}, \quad e \quad \kappa_3^m = \frac{2\pi m}{N_3} \quad \begin{cases} j = 0, \dots, N_1 - 1 \\ l = 0, \dots, N_2 - 1 \\ m = 0, \dots, N_3 - 1 \end{cases} \quad (4.184)$$

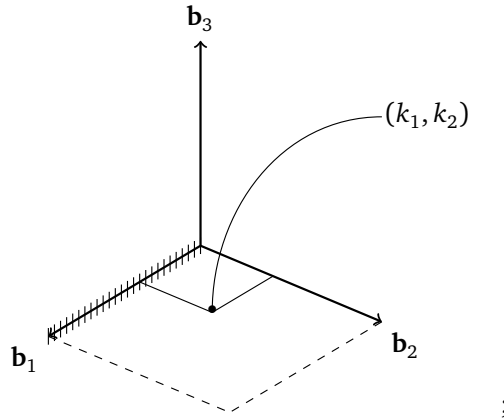
então

$$\mathbf{k} = \sum \kappa_i \mathbf{b}_i. \quad (4.185)$$

Assim é que o vetor  $\mathbf{k}$  no espaço recíproco caracteriza as distintas RIs do nosso grupo.

Temos assim no espaço recíproco:





este ponto no plano é um dos  $N_1 \times N_2$  distintos valores que se pode tomar para  $\kappa_3 = 0$ .

Construímos assim a célula unitária no espaço recíproco ou *primeira zona de Brillouin*. Aqui é conveniente fazer um par de reflexões sobre os pontos equivalentes.

Havíamos observado que as propriedades de transformação frente às translações foram determinadas pelo vetor dentro dessa zona, já que ao somar algum  $\mathbf{k}_h$  ao vetor  $\mathbf{k}$  se obtém o mesmo autovalor do operador de translação:  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}$ . Por exemplo, o extremo de  $\mathbf{b}_1$  (ou  $\mathbf{b}_2$ , ou  $\mathbf{b}_3$ , ou  $\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$ ) e sua origem estão nessa situação, são pontos equivalentes e representam a mesma coisa.

Por outro lado, poderíamos considerar a célula unitária de mesmo volume, ou seja,  $\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3) = \frac{1}{\Omega_0}$ , no espaço recíproco, realizando o seguinte: une-se a origem com os primeiros pontos vizinhos da rede recíproca (aquela formada pelos  $\mathbf{k}_h$ ) e depois bissecta-se os vetores que conectam o centro com os vizinhos; assim será delimitada uma zona de volume  $\frac{1}{\Omega_0}$  que cerca a origem.

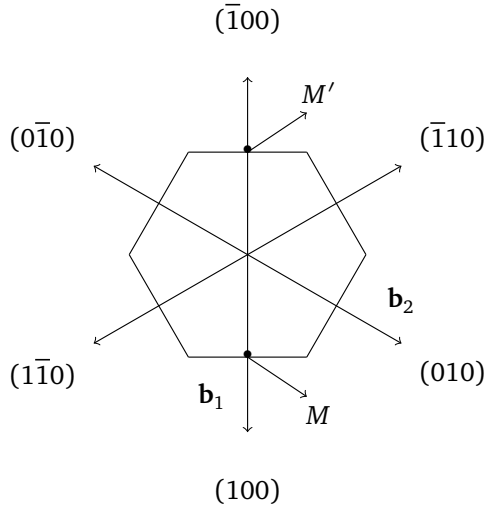
Por exemplo, para uma estrutura hexagonal os vetores da base direta são:

$$\mathbf{t}_1 = \left( \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - \frac{1}{2} \hat{j} \right) a, \quad \mathbf{t}_2 = a \hat{j} \quad \text{e} \quad \mathbf{t}_3 = c \hat{k}, \quad (4.186)$$

o volume da célula é  $\Omega_0 = \mathbf{t}_1 \cdot (\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3) = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$ . A partir das equações (4.168) obtemos os vetores da rede recíproca:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2}{a\sqrt{3}} \hat{i}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{1}{a} \left( \hat{j} + \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{i} \right) \quad \text{e} \quad \mathbf{b}_3 = \frac{1}{c} \hat{k}. \quad (4.187)$$

Realizando o procedimento indicado se obtém a seguinte figura no plano  $\kappa_3 = 0$ :



Agora consideremos aqui os diferentes  $\mathbf{k}$ . Observe, por exemplo, que os pontos  $M$  e  $M'$  são equivalentes, já que deduzem um do outro para algum  $\mathbf{k}_n$  e, portanto, os consideramos como idênticos.

Essa construção foi introduzida por Wigner e Seitz no espaço direto.

Antes de continuar, voltemos a um grupo importante, *também cíclico*, aquele formado pelas rotações de um *dado* eixo, por exemplo, o eixo  $z$ . Nesse caso, é claro que nosso grupo não somente é abeliano, mas também é cíclico. Pode-se tratar de um grupo finito ou infinito, o qual pode ser manipulado. Como o grupo é abeliano, as matrizes das RIs são simplesmente números e, por se tratar de operadores unitários, esses números possuem módulo 1. Além disso, devem satisfazer que

$$\Gamma(\varphi_1)\Gamma(\varphi_2) = \Gamma(\varphi_1 + \varphi_2) \quad \implies \quad \Gamma(\varphi) = e^{im\varphi}, \quad (4.188)$$

onde  $m$  caracterizará a RI de que se trata. Como deveria ser

$$\Gamma(\varphi + 2\pi) = \Gamma(\varphi), \quad (4.189)$$

logo

$$e^{im2\pi} = 1, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.190)$$

onde  $m$  é inteiro.

Se temos uma função de  $(r, \theta, \varphi)$  e aplicamos uma rotação de um ângulo  $\varphi_0$ , então

$$R(\varphi_0)\Psi(r, \theta, \varphi) = e^{im\varphi_0}\Psi(r, \theta, \varphi), \quad (4.191)$$

se  $\Psi$  é uma função de base para m-RI do grupo. Mas isso, por definição, é

$$R(\varphi_0)\Psi(r, \theta, \varphi) = \Psi(r, \theta, \varphi + \varphi_0) = e^{im\varphi_0}\Psi(r, \theta, \varphi), \quad (4.192)$$

sendo que a dependência em  $\varphi$  deve ser da forma  $e^{im\varphi}$ . Portanto, uma função de base para m-RI do grupo de rotações deve ser

$$\Psi_m(r, \theta, \varphi) = f(r, \theta)e^{im\varphi}, \quad (4.193)$$

onde introduzimos o número quântico  $m$ .

## 4.25 Funções de base e operadores de projeção

Em seguida apresentamos o emprego da técnica de operadores de projeção, a qual nos fornece as autofunções de base para as diferentes RIs do grupo da equação de Schrödinger. O tal grupo satisfaz

$$[\mathcal{G}, H] = 0. \quad (4.194)$$

No entanto, as autofunções  $\varphi_n$  satisfazem  $H\varphi_n = E_n\varphi_n$  e, como mostramos precedentemente, o conjunto das funções  $\{R\varphi_n\}$  também satisfaz a mesma equação de autovalores. Portanto, temos um conjunto degenerado de autofunções.

Uma dada RI de dimensão  $l_i$  do grupo da equação de Schrödinger possui uma base de autofunções linearmente independentes que satisfazem

$$R\varphi^{(n)} = \varphi^{(n)}\Gamma^{(n)}(R). \quad (4.195)$$

Além disso, dissemos que se essa base é ON, as matrizes da RI devem ser unitárias, ou seja, se

$$\int \varphi^\dagger \varphi d\mathbf{x} = \mathbf{1} \quad \Longrightarrow \quad \Gamma^\dagger(R)\Gamma(R) = \mathbf{1}. \quad (4.196)$$

Se realizamos uma mudança de base  $\varphi \longrightarrow \varphi'$ , então

$$\varphi' = \varphi\alpha \quad \Longrightarrow \quad \Gamma \longrightarrow \Gamma' = \alpha^{-1}\Gamma(R)\alpha, \quad (4.197)$$

portanto, temos a mesma representação.

Vejam os operadores de projeção sobre as RIs de um grupo. Pela aplicação de um operador, vamos construir funções de simetria adaptada, isto é, que se transformam de acordo com (4.195).

Definiremos o operador  $\mathcal{P}_{\mu\nu}^{(j)}$  da seguinte maneira:

$$\mathcal{P}_{\mu\nu}^{(j)} = \sum_{(R)} \frac{l_j}{h} \Gamma^{(j)}(R)_{\nu\mu}^* R, \quad (4.198)$$

a soma se faz sobre todos os operadores  $R$  do grupo, sendo que  $l_j$  é a dimensão da  $j$ -RI. Observe que no segundo membro os índices estão nesta ordem,  $\nu\mu$ , e eles definem o operador  $\mathcal{P}_{\mu\nu}$ . *Deve-se tomar cuidado, pois é uma fonte de erro.*

Aplicando esse operador a uma função  $f$ , obtemos a onda

$$f_{\mu\nu}^{(j)} \equiv \mathcal{P}_{\mu\nu}^{(j)} f = \frac{l_j}{h} \sum_{(R)} \Gamma^{(j)}(R)_{\nu\mu}^* R f, \quad (4.199)$$

sendo  $f$  uma função arbitrária.

Queremos ver como se transforma essa onda frente aos operadores de  $\mathcal{G}$ . Aplicamos um operador  $R$  e obtemos

$$R f_{\mu\nu}^{(j)} = \frac{l_j}{h} \sum_{(S)} \Gamma^{(j)}(S)_{\nu\mu}^* R S f, \quad (4.200)$$

já que  $R$  é um operador linear; então fazemos  $RS = \mathcal{T}$ , isso implica que  $S = R^{-1}\mathcal{T}$ , então a expressão acima fica:

$$R f_{\mu\nu}^{(j)} = \frac{l_j}{h} \sum_{(\mathcal{T})} \Gamma^{(j)}(R^{-1}\mathcal{T})_{\nu\mu}^* \mathcal{T} f, \quad (4.201)$$

mas

$$\Gamma^{(j)}(R^{-1}\mathcal{T})_{\nu\mu}^* = \sum_k \Gamma^{(j)}(R^{-1})_{\nu k}^* \Gamma^{(j)}(\mathcal{T})_{k\mu}^* = \sum_k \Gamma^{(j)}(R)_{k\nu} \Gamma^{(j)}(\mathcal{T})_{k\mu}^*, \quad (4.202)$$

então

$$R f_{\mu\nu}^{(j)} = \frac{l_j}{h} \sum_k \Gamma^{(j)}(R)_{k\nu} \sum_{(\mathcal{T})} \Gamma^{(j)}(\mathcal{T})_{k\mu}^* \mathcal{T} f = \sum_k \Gamma^{(j)}(R)_{k\nu} f_{\mu k}, \quad (4.203)$$

portanto,

$$R f_{\mu\nu}^{(j)} = \sum_k f_{\mu k} \Gamma^{(j)}(R)_{k\nu}. \quad (4.204)$$

Assim temos um resultado importante. Cabe, primeiro, recordar o que tínhamos antes:

$$R\varphi^{(j)} = \varphi^{(j)}\Gamma^{(j)}(R) \quad \Longrightarrow \quad R\varphi_{\nu}^{(j)} = \sum_k \varphi_k^{(j)}\Gamma_{k\nu}^{(j)}, \quad (4.205)$$

essa expressão define a base para uma RI do grupo. No entanto, a expressão (4.204) satisfaz precisamente essa relação. Dizemos assim que a função  $f_{\mu\nu}^{(j)}$  se transforma de acordo com a  $\nu$ -ésima coluna da (j)-ésima RI do grupo.

Passando para a linguagem matricial, definimos um vetor:

$$\mathbf{f}^{(j)} \equiv (f_{\mu_1}^{(j)}, f_{\mu_2}^{(j)}, \dots, f_{\mu_{l_j}}^{(j)}), \quad (4.206)$$

de  $l_j$  componentes ( $\nu = 1, \dots, l_j$ ) tais que se transformam assim:

$$R\mathbf{f}_{\mu}^{(j)} = \mathbf{f}_{\mu}^{(j)}\Gamma^{(j)}(R), \quad (4.207)$$

cada uma dessas  $f_{\mu_i}$  são companheiras na representação. Quantos desses vetores temos? Tantos quantos há  $\mu$ , o que implica que existem  $l_j$  diferentes vetores. Em outras palavras, temos diferentes funções,  $f_{\mu\nu}^{(j)}$ , em número igual a  $(l_j)^2$  funções que poderíamos construir com os  $(l_j)^2$  operadores  $\mathcal{P}_{\mu\nu}^{(j)}$ .

Se as representações forem unitárias, teremos outra forma alternativa para as funções de base:

$$\begin{aligned} f_{\mu\nu}^{(j)} &= \frac{l_j}{h} \sum_{(R)} \Gamma^{(j)}(R)_{\nu\mu}^* Rf \\ &= \frac{l_j}{h} \sum_{(R)} \Gamma^{(j)}(R^{-1})_{\mu\nu} Rf, \end{aligned} \quad (4.208)$$

chamando  $R^{-1} = \mathcal{T}$  ou  $\mathcal{T}^{-1} = R$ , então

$$f_{\mu\nu}^{(j)} = \frac{l_j}{h} \sum_{\mathcal{T}} \Gamma^{(j)}(\mathcal{T})_{\mu\nu} \mathcal{T}^{-1}f. \quad (4.209)$$

Essa expressão tem o par de índices matriciais à direita e à esquerda na mesma ordem, mas com o operador  $\mathcal{T}^{-1}$  no lugar de  $\mathcal{T}$ . Geramos isso a partir de uma função arbitrária  $f$ , chamada de onda *progenitora* da onda simetrizada  $f_{\mu\nu}^{(j)}$ , um conjunto de funções que se transformam irreduzivelmente frente aos operadores do grupo. Obteve-se isso por meio da aplicação do seguinte operador, chamado *full-projection operator*:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_{\mu\nu}^{(j)} &= \frac{l_j}{h} \sum_{(R)} \Gamma^{(j)}(R)_{\nu\mu}^* R \\
&= \frac{l_j}{h} \sum_{(R)} \Gamma^{(j)}(R)_{\mu\nu} R^{-1}.
\end{aligned} \tag{4.210}$$

De fato estes não são operadores de projeção, pois um operador de projeção deve satisfazer:

$$\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}. \tag{4.211}$$

Diferentemente, esses operadores satisfazem a seguinte relação:

$$\mathcal{P}_{\alpha\beta}^{(i)} \mathcal{P}_{\gamma\delta}^{(j)} = \delta^{(ij)} \delta_{\alpha\delta} \mathcal{P}_{\gamma\beta}. \tag{4.212}$$

Os únicos operadores de projeção são os diagonais. Como caso particular da última equação, temos:

$$\mathcal{P}_{\alpha\beta}^{(i)} \mathcal{P}_{\gamma\alpha}^{(i)} = \mathcal{P}_{\gamma\beta}^{(i)}. \tag{4.213}$$

Passaremos a demonstrar a relação geral (4.212):

$$\mathcal{P}_{\alpha\beta}^{(i)} \mathcal{P}_{\gamma\delta}^{(j)} = \frac{l_i l_j}{h^2} \sum_R \sum_S \Gamma^{(i)}(R)_{\beta\alpha}^* \Gamma^{(j)}(S)_{\delta\gamma}^* RS, \tag{4.214}$$

fazendo  $RS = \mathcal{T}$  ou  $R = \mathcal{T}S^{-1}$ , então

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_{\alpha\beta}^{(i)} \mathcal{P}_{\gamma\delta}^{(j)} &= \frac{l_i l_j}{h^2} \sum_{S\mathcal{T}} \Gamma^{(i)}(\mathcal{T}S^{-1})_{\beta\alpha}^* \Gamma^{(j)}(S)_{\delta\gamma}^* \mathcal{T} \\
&= \frac{l_i l_j}{h^2} \sum_{S\mathcal{T},\nu} \Gamma^{(i)}(\mathcal{T})_{\beta\nu}^* \Gamma^{(i)}(S^{-1})_{\nu\alpha}^* \Gamma^{(j)}(S)_{\delta\gamma}^* \mathcal{T} \\
&= \frac{l_i l_j}{h^2} \sum_{S\mathcal{T},\nu} \Gamma^{(i)}(\mathcal{T})_{\beta\nu}^* \Gamma^{(i)}(S)_{\alpha\nu} \Gamma^{(j)}(S)_{\delta\gamma}^* \mathcal{T},
\end{aligned} \tag{4.215}$$

mas

$$\sum_S \Gamma^{(i)}(S)_{\alpha\nu} \Gamma^{(j)}(S)_{\delta\gamma}^* = \delta_{ij} \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\nu\gamma} \frac{h}{l_j}, \tag{4.216}$$

então

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_{\alpha\beta}^{(i)}\mathcal{P}_{\gamma\delta}^{(j)} &= \frac{l_i}{h} \sum_{\mathcal{T},v} \Gamma^{(i)}(\mathcal{T})_{\beta v}^* \delta_{ij} \delta_{\alpha\gamma} \delta_{v\gamma} \mathcal{T} \\
&= \frac{l_i}{h} \delta_{ij} \delta_{\alpha\gamma} \sum_{\mathcal{T}} \Gamma^{(i)}(\mathcal{T})_{\beta\gamma}^* \mathcal{T} \\
&= \delta_{ij} \delta_{\alpha\gamma} \mathcal{P}_{\alpha\beta}.
\end{aligned} \tag{4.217}$$

Para os operadores diagonais e para a mesma RI, naturalmente temos

$$\mathcal{P}_{\alpha\alpha}^{(i)2} = \mathcal{P}_{\alpha\alpha}^{(i)}; \tag{4.218}$$

voltamos agora às nossas funções de base, elas satisfazem

$$R\varphi^{(i)} = \varphi^{(i)}\Gamma^{(i)}(R). \tag{4.219}$$

Dizemos que  $\mathcal{P}_{\alpha\alpha}^{(i)}$  é um operador de projeção. Vejamos se é assim: tomo uma progenitora  $f$  e aplico  $\mathcal{P}_{\alpha\alpha}^{(i)}$ :

$$f_{\alpha\alpha}^{(i)} = \frac{l_i}{h} \sum_R \Gamma^{(i)}(R)_{\alpha\alpha}^* Rf. \tag{4.220}$$

A esta onda aplicamos novamente  $\mathcal{P}_{\alpha\alpha}^{(i)}$ :

$$\mathcal{P}_{\alpha\alpha}^{(i)}f_{\alpha\alpha}^{(i)} = \frac{l_i}{h} \sum_R \Gamma^{(i)}(R)_{\alpha\alpha}^* Rf_{\alpha\alpha}^{(i)}, \tag{4.221}$$

sabemos que

$$Rf_{\alpha\alpha}^{(i)} = \sum_{\mu=1}^{l_i} f_{\alpha\mu}^{(i)} \Gamma^{(i)}(R)_{\mu\alpha}, \tag{4.222}$$

então

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_{\alpha\alpha}^{(i)}f_{\alpha\alpha}^{(i)} &= \frac{l_i}{h} \sum_R \Gamma^{(i)}(R)_{\alpha\alpha}^* \sum_{\mu=1}^{l_i} f_{\alpha\mu}^{(i)} \Gamma^{(i)}(R)_{\mu\alpha} \\
&= \frac{l_i}{h} \sum_{\mu} \underbrace{\left[ \sum_R \Gamma^{(i)}(R)_{\alpha\alpha}^* \Gamma^{(i)}(R)_{\mu\alpha} \right]}_{\frac{l_i}{h} \delta_{\alpha\mu}}, f_{\alpha\mu}^{(i)},
\end{aligned} \tag{4.223}$$

portanto,

$$\mathcal{P}_{\alpha\alpha}^{(i)}f_{\alpha\alpha}^{(i)} = f_{\alpha\alpha}^{(i)}. \tag{4.224}$$

como deveria ser, já que  $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$ . Assim é que  $\mathcal{P}_{\alpha\alpha}^{(j)}$  é um operador de projeção sobre j-RI. Vejamos uma aplicação trivial desses operadores de

projeção. Seja o grupo de ordem 2:  $\mathcal{C}_2$  que consta de  $E$  e a inversão  $I$ . Essa operação transforma  $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$ . Um grupo que segue essas transformações é necessariamente abeliano, consta de 2 RIs de dimensão 1.

Tabela de caracteres:

$$\begin{array}{c|cc} & E & I \\ \hline \Gamma^{(1)} & 1 & 1 \\ \Gamma^{(2)} & 1 & -1 \end{array} .$$

O operador de projeção para a RI  $\Gamma^{(1)}$ :

$$\mathcal{P}^{(1)} = \frac{1}{2}(E + I), \quad (4.225)$$

e para a RI  $\Gamma^{(2)}$ :

$$\mathcal{P}^{(2)} = \frac{1}{2}(E - I); \quad (4.226)$$

vejamos as funções de base:

$$f^{(1)} = \frac{1}{2}(E + I)f = \frac{1}{2}[f(\mathbf{x}) + f(-\mathbf{x})], \quad (4.227)$$

essa é uma função par,

$$f^{(2)} = \frac{1}{2}(E - I)f = \frac{1}{2}[f(\mathbf{x}) - f(-\mathbf{x})], \quad (4.228)$$

e essa é ímpar.

**NOTA:** Nem sempre é possível extrair funções  $f^{(j)}$  a partir de uma progenitora arbitrária. Por exemplo, se temos uma progenitora par, ela tem a simetria de  $\Gamma^{(1)}$ , e se aplicamos

$$\mathcal{P}^{(1)}f \text{ (par)} = f \text{ (par)} = \frac{1}{2}[f(x) + f(-x)] = \frac{1}{2}2f(x), \quad (4.229)$$

mas se aplicamos

$$\mathcal{P}^{(2)}f \text{ (par)} = \frac{1}{2}[f(x) - f(x)] = 0, \quad (4.230)$$

e reciprocamente.



## 4.26 Grande Teorema dos Elementos da Matriz

Seja um operador  $Q$  que comuta com todos os operadores de um grupo, como ocorre com  $H$ , e o grupo da equação de Schrödinger correspondente. Podemos obter uma relação que fornece os elementos de matriz de  $Q$  com respeito às funções de base para as distintas RIs, essa relação se chama o Grande Teorema dos Elementos de Matriz (EM). Tem-se então um grupo  $\mathcal{G}$  tal que

$$[Q, \mathcal{G}] = 0. \quad (4.231)$$

Vamos introduzir uma notação que demonstra, de forma mais clara, de onde obtemos nossas funções de base, ou seja, nos diz qual é a progenitora. Por exemplo, com

$$f_{\mu\nu}^{(j)} \equiv \mathcal{P}_{\mu\nu}^{(j)} f \quad (4.232)$$

e

$$g_{\mu'\nu'}^{(i)} \equiv \mathcal{P}_{\mu'\nu'}^{(i)} g, \quad (4.233)$$

indicaremos 2 ondas simetrizadas correspondentes às RIs ( $i$ ) e ( $j$ ) construídas a partir das progenitoras ( $f$ ) e ( $g$ ).

Tem-se então um operador  $Q$  que cumpre (4.231), e para as ondas dadas por (4.232) e (4.233), se tem:

$$\langle g_{\mu'\nu'}^{(i)} | Q | f_{\mu\nu}^{(j)} \rangle = \langle g | Q | f_{\mu\mu'}^{(j)} \rangle \delta_{ij} \delta_{\nu\nu'}. \quad (4.234)$$

Observe que à esquerda fica a onda progenitora  $g$ . Vejamos a demonstração:

$$\langle || \rangle = \sum_{R,S} \Gamma_{\nu'\mu'}^{(i)}(R) \Gamma_{\nu\mu}^{(j)}(S)^* \langle Rg | Q | Sf \rangle \frac{l_i l_j}{h^2}, \quad (4.235)$$

se fazemos  $R^{-1}S = \mathcal{T}$  ou  $R = S\mathcal{T}^{-1} \implies \Gamma_{\nu'\mu'}^{(i)}(R) = \sum_{\alpha} \Gamma_{\nu'\alpha}^{(i)}(S) \Gamma^{(i)}(\mathcal{T}^{-1})_{\alpha\mu'}$ , então

$$\begin{aligned} \langle || \rangle &= \frac{l_i l_j}{h^2} \sum_{S, \mathcal{T}} \sum_{\alpha} \Gamma_{\nu'\alpha}^{(i)}(S) \Gamma^{(i)}(\mathcal{T}^{-1})_{\alpha\mu'} \Gamma_{\nu\mu}^{(j)}(S)^* \langle g | Q | R^{-1} S f \rangle \\ &= \frac{l_i}{h} \delta_{ij} \sum_{\mathcal{T}, \alpha} \delta_{\nu\nu'} \delta_{\alpha\mu'} \Gamma^{(i)}(\mathcal{T}^{-1})_{\alpha\mu'} \langle g | Q | \mathcal{T} f \rangle \\ &= \frac{l_i}{h} \delta_{ij} \delta_{\nu\nu'} \sum_{\mathcal{T}} \Gamma^{(i)}(\mathcal{T}^{-1})_{\mu\mu'} \langle g | Q | \mathcal{T} f \rangle \\ &= \delta_{ij} \delta_{\nu\nu'} \langle g | Q \mathcal{P}_{\mu\mu'}^{(i)} | f \rangle \\ &= \delta_{ij} \delta_{\nu\nu'} \langle g | Q | f_{\mu\mu'}^{(i)} \rangle. \end{aligned} \quad (4.236)$$

Q.E.D

$$\langle g_{\mu' \nu}^{(i)} | Q | f_{\mu \nu}^{(j)} \rangle = \delta_{ij} \delta_{\nu \nu'} \langle g | Q | f_{\mu \mu'}^{(i)} \rangle. \quad (4.237)$$

1. Se temos  $Q = H$ : Primeiro corolário, funções com distinto índice de simetria  $\nu$  são não interagentes.  $\nu$  deve ser igual a  $\nu'$ .
2. Tomando  $Q = E$ , operador identidade, então tem-se que as funções com distinto índice de simetria são ortogonais.

- 1) e 2) juntos implicam uma tremenda redução no tamanho da equação secular

$$|\mathbf{H} - E\Delta| = 0. \quad (4.238)$$

3. Um terceiro corolário muito importante diz que o resultado é independente de  $\nu$ :

$$\begin{aligned} \langle f_{\mu_1}^{(j)} | Q | g_{\mu_1'}^{(i)} \rangle &= \langle f_{\mu_2}^{(j)} | Q | g_{\mu_2'}^{(i)} \rangle = \dots = \langle f_{\mu_l}^{(j)} | Q | g_{\mu_l'}^{(i)} \rangle \\ &= \delta_{ij} \langle f | Q | g_{\mu' \mu}^{(i)} \rangle. \end{aligned} \quad (4.239)$$

Basta assim calcular os EM para algum  $\nu$ , por exemplo,  $\nu = 1$ , para saber o que acontece com qualquer  $\nu$ . O que implica que basta trabalhar apenas com os operadores  $\mathcal{P}_{\mu 1}$ .

Além disso, já vimos o seguinte:

1. Os assim chamados operadores de projeção do grupo satisfazem

$$\mathcal{P}_{\alpha\beta}^{(i)} \mathcal{P}_{\gamma\delta}^{(j)} = \delta_{ij} \delta_{\alpha\delta} \mathcal{P}_{\gamma\beta}, \quad (4.240)$$

não são propriamente operadores de projeção, salvo as diagonais  $\mathcal{P}_{\alpha\alpha}^{(i)}$ .

2. Construimos assim ondas simetrizadas

$$f_{\mu\nu}^{(j)} = \mathcal{P}_{\mu\nu}^{(j)} f, \quad (4.241)$$

que se transformam irreduzivelmente frente às operações do grupo, de acordo com a coluna  $\nu$ :

$$R f_{\mu\nu}^{(j)} = \sum_k f_{\mu k}^{(j)} \Gamma^{(j)}(R)_{k\nu} \quad (4.242)$$

ou

$$R \mathbf{f}_{\mu}^{(j)} = \mathbf{f}_{\mu}^{(j)} \Gamma^{(j)}(\mathbf{R}). \quad (4.243)$$

3. Finalmente, mostramos o Grande Teorema dos Elementos de Matriz para estas funções de base

$$\langle g_{\mu'\nu}^{(i)} | Q | f_{\mu\nu}^{(j)} \rangle = \delta_{ij} \delta_{\nu\nu'} \langle g | Q | f_{\mu\mu'}^{(j)} \rangle. \quad (4.244)$$

A equação (4.244) é muito importante, como veremos adiante. Ao efetuar um cálculo onde se tem que expandir a função de prova em termos de certas ondas simetrizadas:  $\varphi = \sum c_i f_i$ , chegamos ao problema secular

$$|\mathbf{H} - E\mathbf{S}| = 0. \quad (4.245)$$

Usando a equação (4.244) vemos imediatamente que existem muitos elementos de matriz que são diretamente iguais a zero.

Como corolário, temos a ortogonalidade das funções de base para as funções com distinto índice de simetria  $\nu$ , ainda dentro de uma mesma representação.

Além disso, o EM vem independentemente de  $\nu$ , então pode-se restringir o trabalho aos operadores  $\mathcal{P}_{\mu 1}$ , por exemplo. Mas, para cada elemento de matriz, é preciso calcular mais de uma integral, já que pela esquerda temos a progenitora sozinha  $g$ , ao passo que à direita teremos:

$$f_{\mu\mu'}^{(j)} = \frac{l_j}{h} \sum_R \Gamma^{(j)}(R)_{\mu\mu'}^* Rf, \quad (4.246)$$

o que em geral dará uma combinação linear de funções, tantas quantas diferentes  $Rf$  existam. Este número não pode superar a ordem do grupo  $h$ , mas pode chegar a ser igual a  $h$ . Obtemos uma simplificação significativa nos cálculos se aplicarmos o seguinte critério: ao avaliar os elementos de matriz entre ondas simetrizadas, colocar à direita a função que contenha uma combinação em número menor de ondas  $Rf$ . Isto é, considerando que  $\mathcal{G}f$  dá um número  $m$  de ondas distintas e a aplicação de  $\mathcal{G}$  sobre  $g$  dá  $n$  funções, no caso que  $m < n$ , colocando  $f$  a direita, simplificamos o cálculo por ter que calcular um número menor de integrais.

Uma forma alternativa de derivar o Grande Teorema dos Elementos de Matriz se baseia em uma relação já mostrada:

$$\mathcal{P}_{\alpha\beta}^{(i)} \mathcal{P}_{\gamma\delta}^{(j)} = \delta_{ij} \delta_{\alpha\delta} \mathcal{P}_{\gamma\beta}, \quad (4.247)$$

considerando

$$\begin{aligned} \langle g_{\mu'\nu'}^{(i)} | Q | f_{\mu\nu}^{(j)} \rangle &= \langle \mathcal{P}_{\mu'\nu'}^{(i)} g | Q | \mathcal{P}_{\mu\nu}^{(j)} f \rangle \\ &= \langle g | Q | \mathcal{P}_{\mu'\nu'}^{(i)\dagger} \mathcal{P}_{\mu\nu}^{(j)} f \rangle, \end{aligned} \quad (4.248)$$

fica por ver quem é  $\mathcal{D}^\dagger$ . Sabíamos que

$$\mathcal{D}_{\mu'\nu'}^{(i)} = \frac{l_i}{h} \sum_{(R)} \Gamma^{(i)}(R)_{\nu'\mu'}^* R, \quad (4.249)$$

então

$$\mathcal{D}_{\mu'\nu'}^{(i)\dagger} = \frac{l_i}{h} \sum_{(R)} \Gamma^{(i)}(R)_{\nu'\mu'} R^{-1}, \quad (4.250)$$

chamando  $R^{-1} = \mathcal{T}$ , então

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{\mu'\nu'}^{(i)\dagger} &= \frac{l_i}{h} \sum_{\mathcal{T}} \Gamma^{(i)}(\mathcal{T}^{-1})_{\nu'\mu'} \mathcal{T} \\ &= \frac{l_i}{h} \sum_{\mathcal{T}} \Gamma^{(i)}(\mathcal{T})_{\mu'\nu'}^* \mathcal{T} = \mathcal{D}_{\nu'\mu'}^{(i)}. \end{aligned} \quad (4.251)$$

Em consequência,

$$\begin{aligned} \langle g_{\mu'\nu'}^{(i)} | Q | f_{\mu\nu}^{(j)} \rangle &= \langle g | Q | \mathcal{D}_{\nu'\mu'}^{(i)} \mathcal{D}_{\mu\nu}^{(j)} f \rangle \\ &= \langle g | Q | \mathcal{D}_{\mu\mu'}^{(i)} f \rangle \delta_{ij} \delta_{\nu\nu'}, \end{aligned} \quad (4.252)$$

o que comprova o poder de uma relação entre operadores.

Quanto vale a *norma* de uma onda simetrizada?

$$\langle f_{\mu\nu}^{(j)} | f_{\mu\nu}^{(j)} \rangle = \langle f | f_{\mu\mu}^{(j)} \rangle = \frac{l_j}{h} \sum_{(R)} \Gamma_{\mu\mu}^{(j)}(R)^* \langle f | R | f \rangle; \quad (4.253)$$

o resultado é o *mesmo* para todo  $\nu$ .

## 4.27 Produto direto de grupos e suas representações

O grupo de simetria de um dado sistema físico pode estar composto por um certo tipo de operadores de natureza distinta. Por exemplo, os operadores podem ser de rotações (próprias ou não) e mudança de coordenadas. As rotações formam um grupo em si mesmas, assim como as permutações de coordenadas de partículas idênticas. Por exemplo, no caso de moléculas constituídas por um mesmo tipo de átomos, o Hamiltoniano é dado por

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_g \Delta_g - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i + V(\mathbf{R}_h) + V(\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{R}_i) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{ij}}, \quad (4.254)$$

com

$$V(\mathbf{R}_h) = \sum_{g < h} \frac{z^2 e^2}{R_{gh}}, \quad (4.255)$$

$$V(\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{R}_l) = \sum_{g,i} \frac{e^2 z}{|\mathbf{R}_g - \mathbf{r}_i|} \quad (4.256)$$

e

$$\Delta_g = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial X_{k,g}^2}. \quad (4.257)$$

Claramente, a mudança de  $\mathbf{R}_h \longleftrightarrow \mathbf{R}_l$  e de  $\mathbf{r}_i \longleftrightarrow \mathbf{r}_j$  deixam  $\mathcal{H}$  invariante. Além disso, existe em geral uma ulterior simetria rotacional na molécula, essas operações formarão o grupo de rotações que é um subgrupo do grupo total de simetria, grupo de rotações que possui natureza distinta do grupo das permutações associado com a mudança de coordenadas. Temos assim um grupo com elemento genérico  $A_k$  e outro com elemento  $B_l$  que comutam:

$$[\mathcal{A}, \mathcal{B}] = 0. \quad (4.258)$$

Formamos os produtos  $A_k B_l$  em um número total  $= h_1 h_2$  e dizemos que essa coleção de objetos forma o grupo produto direto dos grupos "fatores"  $\mathcal{G}_1$  e  $\mathcal{G}_2$  e indicada com

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_1 \otimes \mathcal{G}_2. \quad (4.259)$$

Ao produto de 2 elementos nesse novo grupo, corresponde efetivamente um terceiro elemento que está nele mesmo

$$(A_k B_\lambda) \cdot (A_{k'} B_{\lambda'}) = A_k A_{k'} B_\lambda B_{\lambda'} = A_{k''} B_{\lambda''} \in \mathcal{G}, \quad (4.260)$$

já que por definição esses elementos comutam.

A identidade é  $E = E_1 E_2$ : o produto de ambas as identidades.

Antes de introduzir as representações irredutíveis do grupo  $\mathcal{G}$ , produto direto, vamos dar as noções do produto direto de matrizes. Definimos:

$$\gamma = \alpha \otimes \beta, \quad (4.261)$$

onde os elementos da matriz produto direto são dados por 2 pares de números,

$$\gamma_{ij;kl} = \alpha_{ik} \beta_{jl}, \quad (4.262)$$

o par de índices  $ij$  indica a linha em  $\gamma$ , enquanto o par  $kl$  caracteriza a coluna. Suponhamos que  $\alpha$  seja uma matriz de ordem  $(n_1 \times n_2)$  e  $\beta$  de

$(n'_1 \times n'_2) \implies \gamma$  será uma matriz de ordem  $(n_1 n'_1 \times n_2 n'_2)$ . Além disso, se  $\alpha$  e  $\beta$  são quadradas,  $\gamma$  também será.

Vejamus um teorema referido ao produto ordinário matricial entre matrizes  $\gamma$  e  $\bar{\gamma}$  que resultam cada uma de um produto direto. O teorema se expressa assim:

$$(\alpha \otimes \beta) \cdot (\bar{\alpha} \otimes \bar{\beta}) = \alpha \bar{\alpha} \otimes \beta \bar{\beta}. \quad (4.263)$$

Façamos:

$$(\alpha \otimes \beta)_{ik;i'k'} \equiv \alpha_{ii'} \beta_{kk'} \quad ; \quad (\bar{\alpha} \otimes \bar{\beta})_{i'k';i''k''} \equiv \bar{\alpha}_{i'i''} \bar{\beta}_{k'k''},$$

então

$$\begin{aligned} [(\alpha \otimes \beta) \cdot (\bar{\alpha} \otimes \bar{\beta})]_{ik;i''k''} &= \sum_{(i'k')} \gamma_{ik;i'k'} \bar{\gamma}_{i'k';i''k''} \\ &= \sum_{(i'k')} \alpha_{ii'} \beta_{kk'} \bar{\alpha}_{i'i''} \bar{\beta}_{k'k''} = (\alpha \bar{\alpha})_{ii''} (\beta \bar{\beta})_{kk''} \\ &= [(\alpha \bar{\alpha}) \otimes (\beta \bar{\beta})]_{ik;i''k''}; \end{aligned} \quad (4.264)$$

com isto está demonstrado (4.263).

**Outra propriedade:** O produto direto de 2 matrizes diagonais é uma matriz diagonal; o produto direto de 2 matrizes identidades é também uma matriz identidade. Escrevendo

$$(A \otimes B)_{ii';kk'} = A_{ik} B_{i'k'} = A_i \delta_{ik} B_i \delta_{i'k'}, \quad (4.265)$$

temos que os últimos termos que subsistem são  $i = k$  e  $k' = i'$ . E portanto, os únicos elementos  $\neq 0$  são elementos da diagonal:  $(A \otimes B)_{ii';ii'}$ .

Vejamus agora as *representações do grupo produto direto*.

Seja  $\mathcal{G} = \mathcal{G}_1 \otimes \mathcal{G}_2$  e suponhamos possuir uma representação  $\Gamma^{(a_i)}$  de  $\mathcal{G}_1$  e outra  $\Gamma^{(b_j)}$  de  $\mathcal{G}_2$ , ambas irredutíveis, vamos mostrar que o produto direto dessas representações forma uma RI do grupo  $\mathcal{G}$ .

Fazendo:

$$\begin{aligned} &[\Gamma^{(a_i)}(A_k) \otimes \Gamma^{(b_j)}(B_l)] \cdot [\Gamma^{(a_i)}(A_{k'}) \otimes \Gamma^{(b_j)}(B_{l'})] \\ &= [\Gamma^{(a_i)}(A_k) \Gamma^{(a_i)}(A_{k'})] \otimes [\Gamma^{(b_j)}(B_l) \Gamma^{(b_j)}(B_{l'})] \\ &= \Gamma^{(a_i)}(A_k A_{k'}) \otimes \Gamma^{(b_j)}(B_l B_{l'}) \\ &= \Gamma^{(a_i \otimes b_j)}(A_k A_{k'} B_l B_{l'}), \end{aligned} \quad (4.266)$$

se mostra que esta representação é também irredutível, via o lema de Schur.

Vejam os produtos diretos das representações  $\Gamma^{(a)} \otimes \Gamma^{(b)}$  se obtém todas as RIs de  $\mathcal{G}$ .

Sabemos que

$$h = h_1 h_2 = \sum_{\substack{\text{soma sobre} \\ \text{distintas RI de } \mathcal{G}}} l_k^2. \quad (4.267)$$

Por outro lado, qual é a dimensão da representação produto direto? Esta é  $l_{ij} = l_i^{(a)} l_j^{(b)}$  por construção. Então fazemos

$$\sum_{(ij)} l_{ij}^2 = \sum_i l_i^{(a)2} \sum_j l_j^{(b)2} = h_1 h_2 = h; \quad (4.268)$$

dessa maneira, construímos todas as RIs do nosso grupo.

### Classes e caracteres

Quantas classes temos no grupo  $\mathcal{G}$ ? De  $[\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2] = 0$ , pode-se observar que existem tantas classes quanto o produto do número de classes em  $\mathcal{G}_1$  pelo número de classes em  $\mathcal{G}_2$ . Outra maneira de ver, existem tantas RIs distintas de  $\mathcal{G}$  quanto o produto do número de RIs em  $\mathcal{G}_1$  pelo número correspondente de  $\mathcal{G}_2$ , isto é, tantas quanto o produto do número de classes em ambos os grupos.

Vejam os **caracteres da representação produto direto**.

$\chi^{(a_i \otimes b_j)}(A_k B_l)$  indica a RI do grupo  $\mathcal{G}$  obtido como o produto da RI  $i$ -ésima de  $\mathcal{G}_1$  pela RI  $j$ -ésima de  $\mathcal{G}_2$ , isto é:

$$\begin{aligned} \chi^{(a_i \otimes b_j)}(A_k B_l) &\equiv \sum_{(ij)} \Gamma^{(a_i \otimes b_j)}(A_k B_l)_{ij;ij} \\ &= \sum_{(ij)} \Gamma^{(a_i)}(A_k)_{ii} \Gamma^{(b_j)}(B_l)_{jj} \\ &= \chi^{(a_i)}(A_k) \chi^{(b_j)}(B_l). \end{aligned} \quad (4.269)$$

O caráter da representação produto é igual ao produto ordinário dos caracteres das respectivas representações.

Isso já é muito, pois a maioria dos grupos de interesse é obtida por meio do produto direto de dois grupos. Vejam como trabalhar isso. Temos o famoso grupo  $\mathcal{D}_3$  de ordem 6 com a seguinte tabela de caracteres:

Consideremos agora o grupo  $\mathcal{S}$  de ordem 2 que consta de 2 operadores:  $E$  e  $\sigma_h$ . Com  $\sigma$  se indica uma reflexão por um plano  $(x, y)$ , já o subíndice  $h$  indica que o plano é perpendicular ao eixo de maior simetria, que nesse caso é um eixo 3.

	$E$	$3\mathcal{C}_2$	$2\mathcal{C}_3$
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1
$\Gamma^{(2)}$	1	-1	1
$\Gamma^{(3)}$	2	0	-1

É claro que esse grupo comuta com  $\mathcal{D}_3$  e o produto direto forma um grupo de 12 elementos, o  $\mathcal{D}_{3h}$

$$\mathcal{D}_{3h} = \mathcal{D}_3 \otimes \mathcal{S}. \quad (4.270)$$

Para  $\mathcal{S}$ , temos um grupo abeliano de ordem 2

$\mathcal{S}$	$E$	$\sigma_h$
$\Gamma^{(1)}$	1	1
$\Gamma^{(2)}$	1	-1

Quantas classes possui  $\mathcal{D}_{3h}$ ? Tantas quanto  $3 \times 2 = 6 \implies \exists 6$  RIs diferentes nesse grupo. Quais são as dimensões das RIs do grupo produto? Sabe-se que às dimensões que são chamadas  $l_i^{(a)} l_j^{(b)} = l_{ij} \implies$  como os  $l_j^{(b)} = 1$  para  $\mathcal{S}$ ; isto é, as dimensões do grupo produto são as mesmas que as do  $\mathcal{D}_3$ .

Isso é muito importante, pois se um grupo fator possui somente representações unidimensionais, não aparecem matrizes de maior ordem no grupo produto direto.

Vejam como proceder para construir a tabela de caracteres. Vamos introduzir a seguinte notação:  $\Gamma^+$  e  $\Gamma^-$  como as representações de  $\mathcal{S}$  que antes eram  $\Gamma^{(1)}$  e  $\Gamma^{(2)}$ . Como mostramos, os caracteres de  $\mathcal{G}$  são os produtos:  $\Psi^\pm(\mathcal{D}_{3h}) = \Psi(\mathcal{D}_3)\Psi^\pm$ .

Vamos à tabela:

$\mathcal{D}_{3h}$	$\mathcal{D}_3 E$			$\mathcal{D}_3 \sigma_h$		
	$E$	$3\mathcal{C}_2$	$2\mathcal{C}_3$	$\sigma_h$	$3\sigma_h\mathcal{C}_2$	$2\mathcal{C}_3\sigma_h$
$\Gamma_1^+$	1	1	1	1	1	1
$\Gamma_2^+$	1	-1	1	1	-1	1
$\Gamma_3^+$	2	0	-1	2	0	-1
$\Gamma_1^-$	1	1	1	-1	-1	-1
$\Gamma_2^-$	1	-1	1	-1	1	-1
$\Gamma_3^-$	2	0	-1	-2	0	1



$\mathcal{D}_{3h}$	$\mathcal{D}_3$	$\mathcal{D}_3 \sigma_h$
$\Gamma^+$	$\Psi$	$\Psi$
$\Gamma^-$	$\Psi$	$-\Psi$

**Sinteticamente.** A partir de 1/4 da tabela pode-se construir a tabela completa. Para as representações indicadas com +, repetimos os caracteres da esquerda, já que resultam de multiplicá-los por +1, que é  $\Psi^+$ . No quadro da direita abaixo estão os  $\Psi$ , mas com sinais trocados, já que temos  $\Psi\Psi^- = -\Psi$ .

O quadrante esquerdo abaixo não se altera, já que devemos obter os produtos

$$\Psi(E)\Psi(\mathcal{D}_3) = \Psi(\mathcal{D}_3). \quad (4.271)$$

### Conclusão:

Basta um 1/4 da tabela, ou seja, basta a informação que já tínhamos sobre  $\mathcal{D}_3$ . A novidade é que se duplicou o número de RIs não equivalentes, mas não apareceu nenhuma nova dimensão.

Isso implica que no máximo em  $\mathcal{D}_{3h}$  existem níveis duplamente degenerados.

O que acontece quando, como é frequente, um grupo resulta do produto de outro com o  $\mathcal{C}_i \equiv (E, I)$ ?

Exemplos:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{2h} &= \mathcal{C}_2 \otimes \mathcal{C}_i \\ \mathcal{C}_{6h} &= \mathcal{C}_6 \otimes \mathcal{C}_i \\ \mathcal{D}_{6h} &= \mathcal{D}_6 \otimes \mathcal{C}_i. \end{aligned} \quad (4.272)$$

Repetimos textualmente o feito com  $\mathcal{D}_{3h}$ .

As representações serão agora pares ou ímpares

$\mathcal{D}$		
$\Gamma^+$	$\Psi$	$\Psi$
$\Gamma^-$	$\Psi$	$-\Psi$

Sendo  $\Gamma^+ \implies$  pares:  $\Gamma_g$  e  $\Gamma^- \implies$  ímpares:  $\Gamma_u$ .

Incluir a inversão  $I$  não incrementa as degenerescências e, por outro lado, retirar a inversão, ou seja, reduzir a simetria do grupo, não remove as degenerescências, e portanto não aparecerá uma separação dos níveis de energia.

### Simetrias cristalinas.

Em um cristal, temos como operações de simetria as translações  $\mathcal{T}(\mathbf{R}_l)$  para  $\mathbf{R}_l = \sum l_i \mathbf{t}_i$ , com  $l_i$  sendo inteiro e as roto-reflexões, as quais podem ou não possuir translações associadas não primitivas, ou seja,  $\sum \eta_i \mathbf{t}_i$  com  $\eta_i \neq$  inteiros.

Pode-se ter qualquer quantidade de grupos pontuais, mas se quisermos que as rotações sejam *compatíveis também* com a simetria translacional, esse número de grupos pontuais se reduz a 32.

### Grupos espaciais.

São os formados pelas rotações e translações, as quais existem em número de 230.

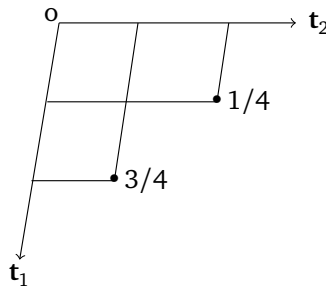
Nas moléculas não existe simetria translacional, então o número de grupos pontuais que aparece ali é maior.

Vejam mais sobre um tipo de grupo espacial com o qual poderíamos ter que lidar: o  $\mathcal{D}_{6h}^A$ . Existe uma estrutura cristalina de átomos idênticos chamada de *hexagonal compacta* que possui 2 átomos por célula unitária, neste caso nos deparamos com tal grupo. A notação indica que existe um eixo 6 e 6 eixos binários perpendiculares ao dito eixo de maior simetria. O índice  $h$  quer dizer que existe um plano perpendicular a esse eixo 6. O 4 indica que se trata de um determinado grupo espacial.

Os átomos estão localizados nas seguintes posições equivalentes:  $(\underbrace{1/3 \ 2/3 \ 1/4}_{\xi_i})$  e  $(2/3 \ 1/3 \ 3/4)$ , onde esses números correspondem a

$$\mathbf{r} = \sum \xi_i \mathbf{t}_i, \quad (4.273)$$

sendo  $\mathbf{t}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}\mathbf{i} - \mathbf{j})$ ;  $\mathbf{t}_2 = a\mathbf{j}$ ;  $\mathbf{t}_3 = c\mathbf{k}$ ;  $|\mathbf{t}_1| = |\mathbf{t}_2| = a$ .



Vemos que uma rotação  $C_6$  do eixo  $z$  não é uma operação de simetria, pois além de rotacionar tem-se que efetuar um deslocamento em  $\frac{c}{2}$  no eixo  $z$ .

Aqui associamos a uma operação de rotação uma translação não-primitiva, assim chamada porque é um número fracionado de  $\mathbf{t}_i$ .

Como é o caso do  $\mathcal{D}_{6h}^4$ , existem grupos que são associados a esse tipo de operações de translação não-primitivas, tais grupos são chamados de não-simórficos, como é o caso da estrutura hexagonal compacta.

Quando o grupo pontual cristalino não possui associado a ele translações não-primitivas, se diz que o grupo espacial é simórfico.

Vejam os operadores do grupo espacial. Por um lado, as translações são caracterizadas por:

$$\mathcal{T}(\mathbf{R}_l)\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l), \quad (4.274)$$

e as do grupo pontual por

$$R\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{R}^{-1}\mathbf{r}). \quad (4.275)$$

Um operador do grupo espacial é indicado pela seguinte notação:  $\{R | \mathbf{R}_l\}$ , o vetor da direita indica a translação  $\mathbf{R}_l = \sum_{l_i} l_i \mathbf{t}_i$ , com  $l_i$  inteiro, ao passo que à esquerda está indicada a operação pontual de rotações que pode ou não ter associadas translações não-primitivas.

Um operador do grupo espacial é definido pela seguinte expressão:

$$\{R | \mathbf{R}_l\}\varphi(\mathbf{r}) \equiv \varphi(\mathbf{R}^{-1}\mathbf{r} + \mathcal{T}_R + \mathbf{R}_l), \quad (4.276)$$

onde  $\mathcal{T}_R$  é a translação não-primitiva associada à operação pontual  $R$ . Como se explicou, para os grupos simórficos,  $\mathcal{T}_R = 0 \quad \forall \quad R$  no grupo pontual.

## 4.28 Inclusão do spin

Quando a interação spin-órbita é levada em conta, o tamanho de uma base não simetrizada é duplicada ao formar o produto direto do espaço dos vetores de base com o espaço bi-dimensional das funções de spin 1/2,  $u_s$  com  $s = 1, 2$ . As rotações das funções  $\{u_s\}$  são definidas por meio das matrizes  $\mathbf{D}$  do grupo das rotações:

$$Ru_s = \sum_{s'} u'_s D_{s's}^{1/2}(\mathbf{R}). \quad (4.277)$$

A rotação  $R$  pode ser indicada por um ângulo  $\theta$  e um vetor unitário  $\mathbf{n}$  ao longo do eixo de rotação:

$$\mathbf{D}^{1/2}(n, \theta) = e^{-i\sigma \cdot \mathbf{n}(\theta/2)} = \mathbf{1} \cos(\theta/2) - i\sigma \cdot \mathbf{n}(\theta/2), \quad (4.278)$$

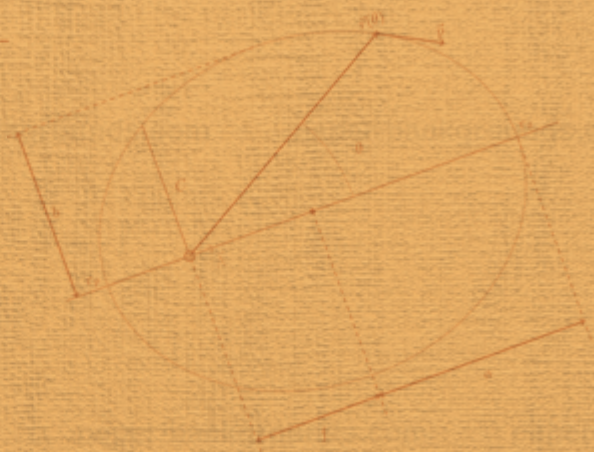
onde  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  e  $\sigma_z$  são as matrizes de Pauli e  $\mathbf{1}$  é a matriz unidade.

Assim a rotação  $R$ , atuando no espaço produto, se escreve:

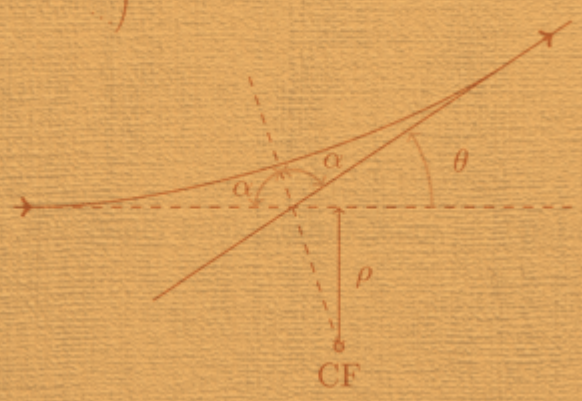
$$Rf(\mathbf{r})u_s = \sum_{s'} f(\mathbf{R}^{-1}\mathbf{r})u_{s'}D_{s's}^{1/2}(\mathbf{R}). \quad (4.279)$$



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$



$$\Gamma \sim \Gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)} + \dots \left( \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right)$$

## Referências bibliográficas

ABERS, E. S. *Quantum Mechanics*. 1a. ed. New Jersey: Pearson Education, INC, 2004. ISBN 0-13-146100-1.

BLOCH, F. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. *Zeitschrift für Physik*, v. 52, n. 7, p. 555–600, Jul 1929. ISSN 0044-3328. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01339455>>.

BOUCKAERT, L. P.; SMOLUCHOWSKI, R.; WIGNER, E. Theory of brillouin zones and symmetry properties of wave functions in crystals. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 50, p. 58–67, Jul 1936. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.50.58>>.

GEIGER, H.; MARSDEN, E. On a diffuse reflection of the  $\alpha$ -particles. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society, v. 82, n. 557, p. 495–500, 1909. ISSN 0950-1207. Disponível em: <<http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/82/557/495>>.

GOLDSTEIN, H. More on the prehistory of the laplace or runge-lenz vector. *American Journal of Physics*, v. 44, n. 11, p. 1123–1124, 1976. Disponível em: <<https://doi.org/10.1119/1.10202>>.

HAMILTON, W. R. Xv. on a general method in dynamics; by which the study of the motions of all free systems of attracting or repelling points is reduced to the search and differentiation of one central relation, or characteristic function. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, v. 124, p. 247–308, 1834. Disponível em: <<http://rsta.royalsocietypublishing.org/content/124/247.short>>.

HAMILTON, W. R. On the application of the method of quaternions to some dynamical questions. *Proceedings of the Royal Irish Academy*, v. 3, p. Appendix III,xxxvi–1, 1847.

HEINE, V. *Group theory in quantum mechanics: an introduction to its present usage*. [S.l.]: Pergamon Press, 1960. (International series in natural philosophy).

HEINTZ, W. H. Determination of the runge-lenz vector. *American Journal of Physics*, v. 42, n. 12, p. 1078–1082, 1974. Disponível em: <<https://doi.org/10.1119/1.1987941>>.

KITTEL, C. *Introduction to Solid State Physics*. 4th. ed. New York: John Wiley and Sons, 1971.

KOSTER, G. et al. *Properties of the Thirty-Two Points Groups*. Cambridge, Massachusetts: M.I.T. Press, 1966.

LAGRANGE, J. L. *Mécanique analytique*. Ve Courcier, 1811. (Mécanique analytique, v. 1). Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=Q8MKAAAAYAAJ>>.

LANDAU, L.; LIFSHITZ, E. *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*. 3a. ed. Elsevier Science, 1981. (Course of Theoretical Physics). ISBN 9780080503486. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=SvdoN3k8EysC>>.

LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Mechanics*. New York: Pergamon Press, 1969.

LAPLACE, P. S. et al. *Traité de mécanique céleste*. Paris, France: De L’Imprimerie de Crapelet, 1798–1799. Tome I. Disponível em: <<http://hdl.handle.net/2027/gri.ark:/13960/t0cv6xj2d>>.

LENZ, W. Über den bewegungsverlauf und die quantenzustände der gestörten keplerbewegung. *Zeitschrift für Physik*, v. 24, n. 1, p. 197–207, Dez 1924. ISSN 0044-3328. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01327245>>.

LUEHRMANN, A. Crystal symmetries of plane-wave-like functions i. the symmorphic space groups. *Advances in Physics*, Taylor & Francis, v. 17, n. 65, p. 1-77, 1968. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/00018736800101256>>.

NEWTON, I. *Philosophiae naturalis principia mathematica*. J. Societatis Regiae ac Typis J. Streater, 1687. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=-dVKAQAAIAAJ>>.

PAULI, W. Über das wasserstoffspektrum vom standpunkt der neuen quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, v. 36, n. 5, p. 336-363, Maio 1926. ISSN 0044-3328. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01450175>>.

RUNGE, C. *Vektoranalysis, von C. Runge*. [S.l.]: Leipzig, S. Hirzel, 1919. v. 1.

SLATER, J. C. *Quantum Theory of Molecules and Solids*. New York: McGraw-Hill Book Co., 1965.

SYMON, K. R. *Mechanics*. 3rd. ed. Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Company, 1971. ISBN 0-201-07392-7.

TINKHAM, M. *Group Theory and Quantum Mechanics*. [S.l.]: McGraw-Hill, 1964. (International series in pure and applied physics). ISBN 13:978-0-486-43247-2(pbk.).

TÖRÖK, J. S. *Analytical Mechanics: with an introduction to dynamical systems*. A. Willey-Interscience Publication, 2000. ISBN 0-471-33207-0 (cloth:alk.paper). Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=l78kAAAAAAAJ>>.





# Tópicos de Mecânica Clássica e Teoria de Grupos

O livro Tópicos de Mecânica Clássica e Teoria de Grupos é a culminação de uma série de discussões e propostas para suprir certas deficiências na formulação de textos de disciplinas no âmbito da graduação. O primeiro tema consiste na apresentação do vetor de Laplace-Runge-Lenz, cujo uso no problema de Kepler em Mecânica Clássica, além de introduzir uma nova constante de movimento, permite obter todas as características associadas à solução da dinâmica de uma partícula em um campo Coulombiano. O segundo tema trata do espalhamento clássico, um conceito sumamente importante na Física, tendo em vista que todo experimento consiste de uma forma ou outra em espalhar partículas, fachos de luz, etc.. O espalhamento de Rutherford proporcionou a imagem da estrutura do átomo, consistente num núcleo muito concentrado e os elétrons “orbitando” em torno dele. O terceiro tema consiste na apresentação da teoria de Hamilton-Jacobi. Trata-se da fase mais elaborada da Física Clássica após os modelos teóricos de Lagrange e Hamilton. É importante destacar que essa teoria deu lugar à obtenção da equação de Schrödinger da Mecânica Quântica. Como último tema considerado neste trabalho, apresentamos uma introdução à Teoria de Grupos, com ênfase na Teoria de Representações. Os conceitos de redutibilidade/irredutibilidade são apresentados com detalhe, dada sua importância no contexto da teoria.



EDITORA



**UnB**