vgiraldo@fisica.edu.ar, silva@fisica.unlp.edu.ar
v2 2024/10/01

Práctica II: Caracteres, Representaciones irreducibles y Coeficientes de Clebsch-Gordan

Aspectos formales

1. i. Muestre que el producto directo de dos representaciones unitarias es también una representación unitaria.

   ii. Muestre que los caracteres de la representación producto directo $D^{J\otimes K}(G) := (D^J \otimes D^K)(G)$ satisfacen
$$\chi^{J\otimes K}(g) = \chi^J(g)\,\chi^K(g).$$

2. Teoremas de ortogonalidad de caracteres

   i. Demuestre los lemas de Schur y, a partir de ellos, la relación de ortogonalidad
$$\sum_{g\in G} D^J_{ij}(g) D^K_{kl}(g^{-1}) = \frac{|G|}{\dim J}\,\delta_{JK}\delta_{il}\delta_{jk} \tag{1}$$
   válida para los elementos de matriz de dos representaciones irreducibles D^J, D^K de un grupo finito G.

   ii. A partir de la expresión (1) derive el primer teorema de ortogonalidad de caracteres:
$$\frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}(\chi^J(g))^*\chi^K(g) = \delta^{JK}\,,$$
   donde $\chi^J(g) = \mathrm{Tr}\,D^J(g)$ es el caracter correspondiente a la representación irreducible J. La suma sobre G puede ser reescrita en términos de una suma sobre las clases de conjugación $\mathcal{C}_i$ $(i = 1,\ldots,\mathcal{N}_{\mathcal{C}})$
$$\frac{1}{|G|}\sum_i d_i\,(\chi^J_i)^*\chi^K_i = \delta^{JK} \tag{2}$$
   donde d_i es el número de elementos de la clase $\mathcal{C}_i$ y $\chi^J_{\mathcal{C}_i}$ es el caracter representativo de la clase i-ésima correspondiente a la irrep J. Puesto que el número de clases de equivalencia $\mathcal{C}_i$ coincide con el número de irreps J la tabla de caracteres resulta una matriz cuadrada

G	$d_1, \mathcal{C}_1$	$d_2, \mathcal{C}_2$	$\ldots$	$d_s, \mathcal{C}_s$
D^1	$\chi^1_{\mathcal{C}_1}$	$\chi^1_{\mathcal{C}_2}$	$\cdots$	$\chi^1_{\mathcal{C}_s}$
D^2	$\chi^2_{\mathcal{C}_1}$	$\chi^2_{\mathcal{C}_2}$	$\cdots$	$\chi^2_{\mathcal{C}_s}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
D^s	$\chi^s_{\mathcal{C}_1}$	$\chi^s_{\mathcal{C}_2}$	$\cdots$	$\chi^s_{\mathcal{C}_s}$

   La expresión (2) implica que las filas de la tabla de caracteres son ortogonales -si pesamos cada término del producto escalar con el número de elementos de la clase correspondiente.-

   iii. Mostrar que las columnas también resultan ortogonales de acuerdo con
$$\frac{1}{|G|}\sum_J (\chi^J_i)^*\chi^J_j = \frac{1}{d_i}\,\delta_{ij}\,. \tag{3}$$

   iv. Utilice las relaciones de ortogonalidad para construir la tabla de caracteres del grupo $D_3 \approx S_3$. Halle los coeficientes n_L en la descomposición
$$D^{J\otimes K}(G) = \bigoplus_{L=1}^{s} n_L D^L(G)\,,$$
   para todos los pares J, K de irreps del grupo S_3. Halle el vector invariante de la representación $D^{3\otimes 3}$.

   v. Construya la tabla de caracteres de D_4. Escriba funciones de onda que transformen de acuerdo con cada una de sus representaciones irreducibles. Describa las posibles propiedades de transformación de los estados estacionarios de dos electrones ligados a una molécula con simetría D_4.

3. Operadores de proyección

Considere una representación D del grupo finito G que se descompone en representaciones irreducibles D^J definidas sobre espacios de representación E^J. Sea $\{e_j^J\}_{j=1,\ldots,\dim J}$ una base de E^J.

i. Utilizando la expresión (1) del ejercicio anterior calcule la acción de los operadores proyección

$$P_{ij}^J := \frac{\dim J}{|G|} \sum_{g\in G} D_{ij}^J(g^{-1})\; D(g)\cdot$$

sobre los elementos de las bases e_j^J y muestre que a partir de un elemento de la base de un espacio E^J pueden obtenerse los restantes elementos de esa base.

ii. Estudie la acción del operador proyección

$$P^J := \sum_i P_{ii}^J$$

sobre un vector cualquiera del espacio de la representación D y muestre que estos operadores permiten identificar los subespacios invariantes E^J. ¿Cuál es la ventaja de los operadores P^J sobre los operadores P_{ij}^J?

iii. Descomponga la representación regular (tridimensional) de S_3 en representaciones irreducibles. Construya los operadores proyección y encuentre, a partir de ellos, los subespacios invariantes y las matrices de las correspondientes representaciones irreducibles de S_3.

4. Coeficientes de Clebsch-Gordan

i. Considere la representación producto $D^{3\otimes 3}$ del grupo S_3 y utilice los operadores proyección para determinar los subespacios invariantes. Determine la matriz de coeficientes de Clebsch-Gordan.

ii. Considere dos representaciones irreducibles D^I, D^J de un grupo finito G. Sean E^I, E^J sus espacios de representación y $\{e_i^I\}_{i=1,\ldots,\dim I}$, $\{e_j^J\}_{j=1,\ldots,\dim J}$ bases de estos espacios. La representación $D^{I\otimes J}$ está definida sobre el espacio $E^I \otimes E^J$ -de base $\{|e_i^I, e_j^J\rangle\}$- y se descompone en representaciones irreducibles D^K de la siguiente manera:

$$D^{I\otimes J} = \bigoplus_K n_{IJ}^K\, D^K$$

Sean $\{e_k^K\}_{k=1,\ldots,\dim K}$ las bases de los espacios donde actúan las representaciones irreducibles D^K del miembro derecho de la expresión anterior. Los coeficientes de Clebsch-Gordan $(K,k|I,i;J,j)$ se definen a partir del cambio de base[1]

$$|e_i^I, e_j^J\rangle = \sum_{K,k} (K,k|I,i;J,j)\; |e_k^K\rangle$$

Aplique los operadores proyección P_{ij}^I a ambos miembros de esta expresión y obtenga la relación

$$(K,k|I,i;J,j)(I,m;J,n|K,l) = \frac{\dim K}{|G|} \sum_{g\in G} D_{kl}^K(g^{-1}) D_{mi}^I(g) D_{nj}^J(g) \tag{4}$$

iii. Utilice la expresión (4) para reobtener los coeficientes de Clebsch-Gordan calculados en el ejercicio (i).

iv. Calcule los coeficientes de Clebsch-Gordan en la descomposición de $D^{5\otimes 5}$, siendo D^5 la representación irreducible bidimensional del grupo D^4.

5. Álgebra de un grupo finito

El álgebra $\mathbb{C}(G)$ de un grupo finito G es el espacio de combinaciones lineales de elementos del grupo con coeficientes complejos. Este espacio vectorial admite un producto lineal definido a partir de la

[1] Por simplicidad supondremos en este ejercicio que los coeficientes $n_{IJ}^K \leq 1$.

composición de elementos del grupo. Sea $\mathcal{C}_i$ la clase de conjugación i-sima constituida por los d_i elementos, i.e. $\mathcal{C}_i = \{g_1^{(i)}, g_2^{(i)}, \ldots, g_{d_i}^{(i)}\}$. Definimos el elemento c_i en el álgebra $\mathbb{C}(G)$ como

$$c_i := g_1^{(i)} + g_2^{(i)} + \ldots + g_{d_i}^{(i)} .$$

i. Muestre que un elemento de $\mathbb{C}(G)$ conmuta con todos los elementos de $\mathbb{C}(G)$ sii es una combinación lineal de los elementos c_i, i.e., el subespacio de $\mathbb{C}(G)$ generado por los vectores c_i es el centro $Z[\mathbb{C}(G)]$ del álgebra del grupo.

ii. Muestre que existen constantes c_{ij}^k tales que

$$c_i \cdot c_j = \sum_k c_{ij}^k \, c_k$$

Por consiguiente, el centro del álgebra es invariante ante la multiplicación por elementos c_i. Además, la acción de dos elementos c_i, c_j conmuta; de modo que es posible diagonalizarlos simultáneamente.

iii. Muestre que los autovectores simultáneos de estas aplicaciones están dados por los vectores de proyección, definidos para cada representación irreducible J de la siguiente manera:

$$P^J := \frac{\dim J}{|G|} \sum_{g \in G} \chi^J(g^{-1}) \, g \cdot$$

iv. Construya estos vectores para el grupo S_3 y utilícelos para determinar nuevamente su tabla de caracteres.

Aplicaciones

1. Calcule las tablas de caracteres de los grupos S_3 y D_4. Escriba las matrices correspondientes a las irreps de estos grupos.

2. Halle los coeficientes n_γ en la descomposición $D^\alpha \otimes D^\beta = \bigoplus_{\gamma=1}^3 n_\gamma D^\gamma$ para todos los pares α, β de irreps del grupo S_3 y calcule los correspondientes coeficientes de Clebsch-Gordan.

3. Sea D la representación irreducible bidimensional del grupo D_4. Descomponga la representación $D \otimes D$ en representaciones irreducibles y calcule los coeficientes de Clebsch-Gordan.

4. Polinomios e irreps: descomponer la acción de D_3 sobre el espacio vectorial generado por el conjunto de funciones
$$\{\psi_1(\boldsymbol{x}) = x^3, \psi_2(\boldsymbol{x}) = x^2 y, \psi_3(\boldsymbol{x}) = xy^2, \psi_4(\boldsymbol{x}) = y^3\}$$

5. Suponga que un electrón en presencia de cuatro núcleos atractores ubicados en los vértices de un cuadrado tiene una energía E_0 doblemente degenerada correspondiente a una irrep de D_4. Si el plano del cuadrado se describe con coordenadas cartesianas (x, y), con origen en el centro del cuadrado y ejes paralelos a sus lados, cuál es el grupo de simetría si agregamos un potencial $V(\vec{r}) = \lambda xy$? Estudie el desdoblamiento del autovalor E_0 debido a este potencial externo.

6. Considere la representación tridimensional del grupo de simetría D_2 de la molécula de agua constituida por los orbitales atómicos p de cada uno de los tres núcleos, con momento angular en la dirección normal al plano de la molécula. Descomponga esta representación en irreps e indique los orbitales que describen los subespacios invariantes. Estudie las posibles transiciones inducidas por una onda electromagnética plana que incide sobre la molécula de agua en estos estados.

7. Estudie el grupo de simetría de una molécula diatómica en el plano y a partir de sus irreps determine sus modos normales de vibración, rotación y traslación.

8. Considere un sistema de tres osciladores acoplados que se encuentran en los vértices de un triángulo equilátero. A partir de las irreps de su grupo de simetría determine sus modos normales y las degeneraciones correspondientes.

9. Describa los modos de oscilación de una red unidimensional de núcleos equidistantes. Para ello, considere un número finito de núcleos e imponga condiciones de contorno periódicas.

10. Descomponga la representación regular de $Z_2 \times Z_2$ en representaciones irreducibles. Considere dos partículas de spin 1/2 acopladas por el hamiltoniano $H = -\lambda \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$. Muestre que S_2 es un grupo de simetría del sistema pero que $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ no lo es. Calcule los autovectores de H y determine cómo transforman ante S_2.

11. Considere un sistema de tres partículas idénticas de spin 1/2 y calcule los estados totalmente simétricos y antisimétricos a partir de las irreps de S_3. Estudie la simetría de los autoestados del spin total frente al intercambio de partículas.

12. Teorema de Unsold: Unsold mostró que $\sum_{m=-l}^{l} |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2$ es invariante frente al grupo de rotaciones. En otras palabras, niveles de energía llenos en los átomos tienen simetría esférica. Generalizar el teorema, mostrando que
$$\sum_{\kappa=0}^{\dim J} |\psi_\kappa^J(\mathbf{x})|^2$$
es invariante bajo las operaciones de un grupo G, siendo ψ_κ^J la base de una irrep J.

    Ayuda: Calcular $P_{\mathbf{R}} \sum_{\kappa=0}^{\dim J} |\psi_\kappa^J(\mathbf{x})|^2$ y usar el gran teorema de ortogonalidad.