I. INTRODUÇÃO A TEORIA DE GRUPO

A. Mudança de Coordenadas e Grupo de Rotação

Vamos estudar a rotação de um sistema de coordenadas. Seja XYZ um sistema Cartesiano de Coordenadas fixo no espaço. Agora introduzimos um sistema de coordenadas Cartesianas $X'Y'Z'$ que possui a origem O comum ao sistema XYZ, mas rodado em torno do ponto O.

Seja $\vec{r}$ o *vetor coluna* de um ponto P arbitrário no espaço expresso no sistema de coordenadas XYZ. Podemos escrever

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix},$$

onde

$$x_i = \langle e_i | P \rangle,\ \ i = 1, 2, 3$$

Aqui, para distinguir o vetor físico no espaço do vetor coluna, introduzimos a notação de Dirac. Por exemplo, $|P\rangle$ representa o vetor corresponde ao segumento $\overrightarrow{OP}$ e $|e_i\rangle$ representa o vetor unitário na direção do eixo X_i. $\langle e_i | P \rangle$ representa o produto escalar entre os dois vetores, $|P\rangle$ e $|e_i\rangle$. Analogamente, o mesmo vetor fica expresso em termos de vetor coluna no sistema de coordenadas intrinsêca $X'Y'Z'$ como

$$\vec{r}' = \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix}, \tag{1}$$

onde

$$x'_i = \langle e'_i | P \rangle,\ \ i = 1, 2, 3,$$

e $|e'_i\rangle$ representa o vetor unitário na direção do eixo X'_i.

Os vetores-base $\{|e'_1\rangle, |e'_2\rangle, |e'_3\rangle\}$ podem ser expressos em termos da base $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle\}$. Temos, por exemplo, usando a completeza do sistema $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle\}$,

$$\begin{aligned} |e'_1\rangle &= \{|e_1\rangle\langle e_1| + |e_2\rangle\langle e_2| + |e_3\rangle\langle e_3|\}\,|e'_1\rangle \\ &= |e_1\rangle\langle e_1|e'_1\rangle + |e_2\rangle\langle e_2|e'_1\rangle + |e_3\rangle\langle e_3|e'_1\rangle. \end{aligned} \tag{2}$$

e analogamente para $|e_2\rangle$ e $|e_3\rangle$. Usando estas transformações da base, temos

$$\vec{r}' = \begin{pmatrix} \langle e_1'|P\rangle \\ \langle e_2'|P\rangle \\ \langle e_3'|P\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle e_1'|e_1\rangle & \langle e_1'|e_2\rangle & \langle e_1'|e_3\rangle \\ \langle e_2'|e_1\rangle & \langle e_2'|e_2\rangle & \langle e_2'|e_3\rangle \\ \langle e_3'|e_1\rangle & \langle e_3'|e_2\rangle & \langle e_3'|e_3\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle e_1|P\rangle \\ \langle e_2|P\rangle \\ \langle e_3|P\rangle \end{pmatrix}$$

Isto constitui uma transformação linear de coordenadas, de $\vec{r}_C$ para $\vec{r}$.

$$\vec{r} \to \vec{r}' = A\,\vec{r}, \tag{3}$$

com

$$A = \begin{pmatrix} \langle e_1'|e_1\rangle & \langle e_1'|e_2\rangle & \langle e_1'|e_3\rangle \\ \langle e_2'|e_1\rangle & \langle e_2'|e_2\rangle & \langle e_2'|e_3\rangle \\ \langle e_3'|e_1\rangle & \langle e_3'|e_2\rangle & \langle e_3'|e_3\rangle \end{pmatrix}, \tag{4}$$

ou

$$A_{ij} = \langle e_i'|e_j\rangle, \quad i = 1, 2, 3. \tag{5}$$

Note que a matriz A satisfaz a propriedade,

$$A^T A = 1. \tag{6}$$

Exercício: Prove a equação acima.

Uma matriz real que satisfaça a condição (6) é chamada de matriz ortogonal. A transformação de coordenada por uma matriz orthogonal,

$$\vec{r} \to \vec{r}' = A\,\vec{r}, \tag{7}$$

é dita a transformação orthogonal.

Na linguagem introduzida na seção anterior, digamos que a matriz A é a representação da rotação $\mathcal{R}$. De fato, os vetores (os vetores físicos) da base $\{|e_1'\rangle, |e_2'\rangle, |e_3'\rangle\}$ podem ser obtidos dos vetores da base $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle\}$ por uma rotação $\mathcal{R}$,

$$|e_i'\rangle = \mathcal{R}|e_i\rangle, \ i = 1, 2, 3$$

Assim, a matriz A é a representação da rotação do sistema de coordenaada XYZ para $X'Y'Z'$ em termos da base $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle\}$,

$$A^T = \begin{pmatrix} \langle e_1|\mathcal{R}|e_1\rangle & \langle e_1|\mathcal{R}|e_2\rangle & \langle e_1|\mathcal{R}|e_3\rangle \\ \langle e_2|\mathcal{R}|e_1\rangle & \langle e_2|\mathcal{R}|e_2\rangle & \langle e_2|\mathcal{R}|e_3\rangle \\ \langle e_3|\mathcal{R}|e_1\rangle & \langle e_3|\mathcal{R}|e_2\rangle & \langle e_3|\mathcal{R}|e_3\rangle \end{pmatrix}. \tag{8}$$

De modo geral, uma matriz real 3×3 tem 9 elementos independentes. Mas para uma matriz ortogonal, a condição (6) impõe $3(3+1)/2 = 6$ condições independentes. Assim, uma matriz orthogonal 3×3 é determinada por $9 - 6 = 3$ números. Para determinar as direções de um sistema de coordenadas Cartesiano, precisamos 3 ângulos, que são justamtente os números necessários para determinar uma matriz orthogonal 3×3.

Da discussão acima, estabelecemos o seguinte esquema: Para um corpo rígido em rotação, num instante do tempo t,

$$\begin{array}{ccc} \text{Sistema Cartesiana } XYZ & \overset{Rotacc\tilde{a}o}{\longrightarrow} & \text{Sistema Cartesiana } X'Y'Z' \\ \vec{r} & \longrightarrow & \vec{r}' = A\,\vec{r} \\ & \Downarrow & \\ & A = A(Rotacc\tilde{a}o) & \end{array}$$

Resumindo: à transformação de um sistema Cartesiano para um outro, definida pela Eq.(7), corresponde uma rotação. A rotação é determindada por 3 ângulos. A matriz orthogonal 3×3 é determinada por esta rotação. Ou seja, podemos estabelecer a correspondência um a um entre rotações no espaço tridimensional R^3 e matrizes ortogonal 3×3. Esta correspondência é dita a *representação de rotação tridimensional por matriz ortogonal* 3×3. Denotamos simbolicamente a rotação no espaço tridimensional por $\mathcal{R}$. Mais precisamente, estamos associando uma matriz A para uma rotação do sistema em torno da sua origem. Assim, podemos expressar as rotações (que são um processo físico) em termos de matrizes ortogonais (que é uma entidade matemática). As propriedades das matrizes A se refletem nas propriedades físicas das rotações e vice-versa.

Note que a sucessão de duas rotações é representada pelo produto de duas matrizes, correspondentes. Neste sentido, o ato de rodar sucessivamente também fica representado pela operação matemática de produto matricial.

B. Propriedades de Matriz A

Vamos estudar as propriedades matemáticas da matriz A. Escrevemos

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}.$$

O que sabemos dela é

1. Ortogonalidade, $\quad A^T A = 1$, e, portanto,

2. Existem apenas 3 parametros que determinam A, ou seja todos os $\{a_{ij}\}$.

Note que o produto de duas matrizes ortogonais também um matriz ortogonal: Isto é, se

$$A^T A = 1,$$
$$B^T B = 1,$$

então, o produto

$$C = BA$$

tem a propriedade,

$$\begin{aligned} C^T C &= (BA)^T (BA) \\ &= A^T B^T BA = A^T 1 A = A^T A = 1. \end{aligned} \tag{9}$$

Do ponto de vista física, isto significa que as duas rotações sucessivas também é uma rotação.

Pela definição, uma matriz ortogonal A claramente tem seu inverso, A^{-1}.

$$A^{-1} = A^T. \tag{10}$$

Físicamente, a matriz inversa corresponde à rotação inversa. Já que

$$A^{-1} A = A A^{-1} = 1, \tag{11}$$

independente da ordem de aplicação da rotação e seu inverso leva à mesma posição inicial,

$$A^{-1} A\, \vec{r} = A A^{-1} \vec{r} = \vec{r}. \tag{12}$$

Note também que a matriz de identidade I é uma matriz ortogonal.

Vamos considerar o conjunto de todas as matrizes ortogonais 3×3 e denotamos por G.

$$G = \left\{A;\ A^T A = 1\right\}. \tag{13}$$

Então, re-expressamos as propriedades ditas acima na linguagem matemática como

1. Fechamento do conjunto em relação a multiplicação entre dois elementos do conjunto,

$$^{\forall}A, B \in G \rightarrow\ ^{\exists}C = AB \in G. \tag{14}$$

=as rotações sucessivas são uma rotação.

2. Existência do elemento de identidade,

$$^{\exists}I \in G,$$

tal que

$$^{\forall}A \in G \rightarrow IA = AI = A. \tag{15}$$

=rotação de ângulos nulos (não rodar).

3. Existência do elemento inverso,

$$^{\forall}A \in G \rightarrow\ ^{\exists}A^{-1} \in G,$$

tal que

$$A^{-1}A = AA^{-1} = 1. \tag{16}$$

=sempre pode-se desfazer uma rotação.

Um conjunto que tem as propriedades acima é chamado de *um grupo*. Assim, o conjunto de todas as matrizes ortogonais 3×3 forma um grupo. Este grupo em particular é denomidado de grupo $O(3)$. Já que as matrizes ortogonais correspondem a rotações, concluimos que:

- *O conjunto de todas as rotações forma um grupo, que é equivalente ao grupo* $O(3)$.

1. *Transformação ortogonal própria e imprópria*

O grupo $O(3)$ é o conjunto de todas as transformações de coordenadas ortogonais definida na Eq.(7). Da condição,

$$A^T A = 1, \tag{17}$$

temos

$$\det \left| A^T A \right| = 1. \tag{18}$$

Mas sabemos que

$$\det\left|A^T A\right| = \det\left|A^T\right|\det|A| = \det|A|\det|A| = (\det|A|)^2\,,$$

concluimos que

$$\det|A| = \pm 1. \tag{19}$$

Podemos classificar as matrizes que compõem o grupo $O(3)$ em duas partes, uma que contem todas as matrizes ortogonais com seu determinante igual a $+1$, e outra com a determinante -1. Note que o subconjunto composto de matrizes com determinante $+1$ forma um grupo entre elas.

Exercício: Prove que o conjunto de todas as matrizes (3×3) orthogonais, com determinante $+1$ forma um grupo.

Exercício: Prove que

$$\begin{aligned}
&\det|AB| = \det|BA|\,,\\
&\det\left|A^T\right| = \det|A|\,,\\
&\det\left|A^{-1}\right| = 1/\det|A|\,,\\
&\det|I+\varepsilon A| \underset{\varepsilon<<1}{\rightarrow} 1+\varepsilon\, Tr\,(A) + O(\varepsilon^2),
\end{aligned}$$

onde $Tr(A)$ é a soma dos elementos diagonais da matriz A.

Se um subconjunto de um grupo forma um grupo com a regra de multiplicação do grupo, o subconjunto é chamado de subgrupo. Naturalmente o elemento identidade, I, do grupo tem que estar no subgrupo. Assim, o conjunto de todas as matrizes orthogonais de dimensão 3, com determinante $+1$ forma um subgrupo do grupo $O(3)$. O grupo é denominado $SO(3)$.

Por outro lado, o conjunto de todas as matrizes do grupo $O(3)$ com determinante -1 não forma um grupo. Isto é trivial, pois, em primeiro lugar, o elemento identidade tem o determinante $+1$ e, também pode ser visto pelo fato de que o produto de duas matrizes com ambos determinantes negativos tem o determinante positivo e, portanto, não pertence ao mesmo conjunto.

O que significa o sinal do determinante? Para ver isto, vamos calcular o determinante da transformação,

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} -x \\ y \\ z \end{pmatrix},$$

ou seja, a direção do eixo x foi invertida. Neste caso, a matiriz da transformação fica

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

e obviamente

$$\det |A| = -1.$$

Assim, se a transformação envolve a inversão de uma das direções dos eixos, o determinante da matriz fica negativo. Suponhamos que inicialmente começamos com um sistema de coordenadas destrogiro. Note que após a transformação de coordenadas, se um dos eixos tiver a direção invertida, o novo sistema de coordenadas se torna levogiro. Quando a transformação envolve a inversão de duas direções dos eixos, o determinante fica positivo. Mas neste caso, a transformação não leva de um sistema destrogiro para levogiro, pois, por exemplo, a inversão dos eixos X e Y simultaneamente equivalente a rotação do sistema em torno do eixo Z por 180 graus. Assim, o sinal do determinante da matriz de transformação está associado à mudança de um sistema destrogiro para levogiro ou vice-versa.

As transformações que correspondem a matrizes com determinante positivo são chamadas de transformações ortogonais próprias, e envolvem puramente rotações. O conjunto de todas as transformações próprias forma um subgrupo, equivalente a $SO(3)$. Na discussão adiante, nos limitamos às transformações próprias, a não ser que especificado explicitamente o contrário.

O grupo de rotações tem 3 ângulos para especificar a rotação. Um grupo cujo elemento é especificado em termos de um (ou mais de um) parâmetro é chamado de grupo contínuo. Assim, o grupo de rotação 3-dimensional (= grupo $SO(3)$) é um grupo contínuo.

2. *Autovetores e Autovalores*

Vamos considerar o problema de autovalor da matriz A,

$$A\vec{x} = \lambda\vec{x}, \tag{20}$$

onde λ é o autovalor e

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \tag{21}$$

é o autovetor. A Eq.(20) é um sistema de equações lineares

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 &= \lambda x_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 &= \lambda x_2, \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 &= \lambda x_3, \end{aligned} \tag{22}$$

e esta tem a solução não trivial só quando

$$\det |A - \lambda I| = 0, \tag{23}$$

onde I é a matriz unitária

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{24}$$

Explicitamente, a Eq.(23) fica

$$\lambda^3 - Tr\,(A)\,\lambda^2 + (a_{11}a_{22} + a_{22}a_{33} + a_{33}a_{11} - a_{23}a_{32} - a_{13}a_{31} - a_{12}a_{21})\,\lambda - \det|A| = 0. \tag{25}$$

Assim, a Eq.(23) é uma equação de 3^a grau em relação a λ e, portanto, existem 3 raízes para λ. Note que as raízes não são necessariamente reais. Para equações de 3^a grau com coeficientes reais, sempre existe pelo menos uma raíz real e as outras duas, se forem complexas, uma é o complexo conjugado da outra. Denotamos estas raízes por λ_1, λ_2 e λ_3, respectivamente. Para cada um destes λ, existe a solução para $\vec{x}$ da Eq.(22). Assim, a solução para $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ correspendende à raíz λ_i, denotamos por $\vec{x}^{(i)} = \left(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, x_3^{(i)}\right)$. Explicitamente,

$$A\vec{x}^{(i)} = \lambda_i\vec{x}^{(i)}.$$

Note que se $\vec{x}$ é um autovetor, para qualquer número α, $\alpha\vec{x}$ é também o autovetor. Podemos, então, introduzir o autovetor *normalizado*, $\vec{e}^{(i)}$ por

$$\vec{e}^{(i)} = \frac{1}{|\vec{x}^{(i)}|}\vec{x}^{(i)}, \tag{26}$$

com

$$\left|\vec{x}^{(i)}\right| = \sqrt{\vec{x}^{(i)T} \cdot \vec{x}^{(i)}} = \sqrt{\left(x_1^{(i)}\right)^2 + \left(x_2^{(i)}\right)^2 + \left(x_3^{(i)}\right)^2} \tag{27}$$

é a norma do vetor $\vec{x}^{(i)}$.

Agora, vamos construir uma matriz U formada com estes autovetores normalizados,

$$U = \begin{pmatrix} x_1^{(1)} & x_1^{(2)} & x_1^{(3)} \\ x_2^{(1)} & x_2^{(2)} & x_2^{(3)} \\ x_3^{(1)} & x_3^{(2)} & x_3^{(3)} \end{pmatrix} = \left(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, \vec{x}^{(3)}\right). \tag{28}$$

Multiplicando pela matriz A do lado esquerdo, temos

$$\begin{aligned} AU &= A \begin{pmatrix} x_1^{(1)} & x_1^{(2)} & x_1^{(3)} \\ x_2^{(1)} & x_2^{(2)} & x_2^{(3)} \\ x_3^{(1)} & x_3^{(2)} & x_3^{(3)} \end{pmatrix} = \left(A\vec{x}^{(1)}, A\vec{x}^{(2)}, A\vec{x}^{(3)}\right) \\ &= \left(\lambda_1\vec{x}^{(1)}, \lambda_2\vec{x}^{(2)}, \lambda_3\vec{x}^{(3)}\right) \\ &= \left(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, \vec{x}^{(3)}\right) \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix} \\ &= U \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{29}$$

ou

$$AU = U\Lambda, \tag{30}$$

onde

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix} \tag{31}$$

é a matriz diagonal, composta de autovalores de A. Da Eq.(30), temos

$$U^{-1}AU = \Lambda. \tag{32}$$

O lado esquerdo da equação acima é chamado a transformação similar da matriz A por U. Assim, a matriz A se torna diagonal pela transformação similar pela matriz formada de autovetores de A. A relação inversa é

$$A = U\Lambda U^{-1}. \tag{33}$$

Exercício: Diagonalize a matriz,

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

e obtenha mariz U que diagonaliza A por

$$U^{-1}AU = \Lambda.$$

3. Função de uma matriz e sua diagonalização.

Note que entre matrizes diagonais, as operações algebricas ficam identicas como no caso de números. Inclusive, podemos definir funções de uma matriz diagonal Λ por,

$$f(\Lambda) = \begin{pmatrix} f(\lambda_1) & 0 & 0 \\ 0 & f(\lambda_2) & 0 \\ 0 & 0 & f(\lambda_3) \end{pmatrix}. \tag{34}$$

Vamos supor que a função $f(x)$ é expandida em série de Taylor;

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n,$$

onde $c_n = f^{(n)}(0)/n!$. Neste caso,

$$
\begin{aligned}
f\left(\Lambda\right) &= \begin{pmatrix} \sum_{n=0}^{\infty} c_n \lambda_1^n & 0 & 0 \\ 0 & \sum_{n=0}^{\infty} c_n \lambda_2^n & 0 \\ 0 & 0 & \sum_{n=0}^{\infty} c_n \lambda_3^n \end{pmatrix} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \begin{pmatrix} \lambda_1^n & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^n & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^n \end{pmatrix} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \Lambda^n.
\end{aligned}
$$

Por outro lado,

$$
\begin{aligned}
\Lambda^n &= \overbrace{\left(UAU^{-1}\right)\left(UAU^{-1}\right)\cdots\left(UAU^{-1}\right)}^{n-termos} \\
&= UA^nU^{-1}.
\end{aligned} \tag{35}
$$

Portanto,

$$
\begin{aligned}
f(\Lambda) &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n UA^nU^{-1} \\
&= U\left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n A^n\right)U^{-1} \\
&= Uf(A)U^{-1},
\end{aligned} \tag{36}
$$

onde $f(A)$ é definida em termos de série de Taylor,

$$
f(A) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n A^n.
$$

Assim, finalmente chegamos a fórmula,

$$
f(A) = U^{-1}f(\Lambda)U, \tag{37}
$$

mostrando que qualquer função de uma matriz pode ser diagonalizada em termos da mesma transformação similar por U.

Exercício: Seja

$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Calcule a matriz,

$$M = e^{it\sigma}$$

onde $i^2 = -1$, e t é um número arbitrário.

Exercício: Obtenha a matrix U que diagonaliza M acima obtida por

$$U^{-1}MU.$$

Calcule também

$$U^{-1}\sigma U.$$

4. Propriedades de autovalores de matrizes ortogonais

Em primeiro lugar, vamos provar que um dos autovalores de uma matriz ortogonal é um. Ou seja, a equação de autovalor Eq.(**??**) tem a raíz, $\lambda = 1$. Para isto, basta provar que,

$$\det |A - I| = 0. \tag{38}$$

Já que $A^T A = 1$, temos

$$\left(I - A^T\right) A = A - 1, \tag{39}$$

e, portanto,

$$\det |A - 1| = \det \left|\left(I - A^T\right) A\right| = \det \left|I - A^T\right| \det |A|. \tag{40}$$

Sabemos que para as rotações próprias[1]

$$\det |A| = +1, \tag{41}$$

e temos ainda,

$$\begin{aligned} \det \left|I - A^T\right| &= \det |I - A| \\ &= \det |-(A - 1)| \\ &= -\det |A - 1|. \end{aligned}$$

Aqui, foi utlizado o fato de que para qualquer matriz M de dimensão ímpar,

$$\det|-M| = -\det|M|.$$

Desta forma, concluimos que

$$\det|A-1| = -\det|A-1| \tag{42}$$

que implica em

$$\det|A-1| = 0.$$

Com isto, mostramos que $\lambda = 1$ é uma das raízes da Eq.(23).

O que significa isto? Voltando à Eq.(23), vemos que o autovetor correspondente a este autovalor tem que satisfazer esta equação com $\lambda = 1$, ou seja,

$$A\vec{x} = \vec{x}. \tag{43}$$

Isto mostra que o vetor $\vec{x}$ é inalterado após da rotação A. Em outras palavras, para uma dada rotação, sempre existe uma direção que fica inalterada por esta rotação. Assim, podemos especificar qualquer rotação $(XYZ) \to (X'Y'Z')$ por um vetor unitário $\vec{n}$, que tem a direção do autovetor acima e um ângulo de rotação θ em torno deste vetor. Pela simplicidade, vamos introduzir um vetor

$$\vec{\theta} = \theta\vec{n}. \tag{44}$$

O teorema de Euler garante que podemos especificar a matriz A correspendente a uma rotação arbitrária por este vetor $\vec{\theta}$,

$$A = A(\vec{\theta}). \tag{45}$$

Exercício: Quantos parâmetos livres para determinar o vetor $\vec{\theta}$?

O teorema de Euler mostra que um dos autovalores de uma matriz ortogonal é 1. Por outro lado, para transformações próprias,

$$\det|A| = +1.$$

Por outro lado, temos

$$\det|A| = \det\left|U^{-1}\Lambda U\right| = \det|\Lambda| = \lambda_1\lambda_2\lambda_3. \tag{46}$$

Assim, temos

$$\lambda_1\lambda_2\lambda_3 = 1. \tag{47}$$

Sem perder generalidade, podemos escolher sempre $\lambda_1 = 1$. Assim,

$$\lambda_2\lambda_3 = 1.$$

Lembre-se que os autovalores não são necessariamente reais. Em geral, $\lambda_3 = \lambda_2^*$. Portanto,

$$|\lambda_2| = |\lambda_3| = 1. \tag{48}$$

A solução geral é

$$\lambda_2 = e^{i\delta},$$
$$\lambda_3 = e^{-i\delta},$$

com δ um número real.

Para ver qual é o significado deste δ, vamos considerar a transformação de sistema de coordenadas em termos de uma rotação de um ângulo θ em torno do eixo z. Neste caso,

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\vec{\theta} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \theta \end{pmatrix},$$

e as coordenadas transformam como

$$x' = \cos\theta\, x + \sin\theta\, y,$$
$$y' = -\sin\theta\, x + \cos\theta\, y,$$
$$z' = z,$$

e, portanto

$$A(\vec{\theta}) = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Como pode ser visto diretamente, um dos autovalores é de fato 1. Os outros autovalores satisfazem a equação,

$$(\lambda - \cos\theta)^2 + \sin^2\theta = 0. \tag{49}$$

Daí, temos

$$\lambda = \cos\theta \pm i\sin\theta = e^{\pm i\theta}. \tag{50}$$

Assim, neste caso, a fase δ é o ângulo de rotação θ. Como pode ser visto adiante, isto é simpre verdade, ou seja, para uma rotação especificada pelo vetor $\vec{\theta}$, os autovalores são $e^{\pm i\theta}$, além de 1.

O fato de que os autovalores são complexos, além daquele que é 1, implica que os autovetores correspondentes também não são reais. Isto quer dizer que não existe uma base na qual a matriz de rotação fica diagonal, exceto para a rotação de identidade, ou seja, a rotação nula. Este é reflexo de um fato quase trivial de que não existe mais de um vetor que mantem sua direção sob a rotação. Matematicamente, uma matriz ortogonal não pode ser diagonalizada pela transformação ortogonal.

C. Rotações Infinitesimais

Vamos analizar a matriz,

$$A = A(\vec{\theta})$$

que é a rotação por um ângulo θ em torno de uma direção $\vec{n}$,

$$\vec{\theta} = \theta\vec{n}$$

onde $\vec{n}$ é o vetor unitário,

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}$$

com

$$\vec{n}^T \cdot \vec{n} = 1.$$

Podemos considerar esta rotação como uma sequência sucessiva de N rotações de pequeno ângulo, $\delta\theta = \theta/N$. Assim, podemos escrever

$$A(\theta) = \overbrace{A(\delta\vec{\theta})A(\delta\vec{\theta})\cdots A(\delta\vec{\theta})}^{N \text{ termos}} = \prod_{i=1}^{N} A(\delta\vec{\theta}). \tag{51}$$

onde

$$\delta\vec{\theta} = \begin{pmatrix} \delta\theta_x \\ \delta\theta_y \\ \delta\theta_z \end{pmatrix} = \frac{\theta}{N} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}$$

é o vetor da rotação Sabemos que se o ângulo desta pequena rotação tende a zero, a matriz correspondente tem que convergir a matriz de identidade,

$$A(\delta\vec{\theta}) \underset{\delta\theta\to 0}{\longrightarrow} I, \tag{52}$$

podemos considerar a expansão em série de Taylor da matriz $A(\delta\vec{\theta})$ em relação a $\delta\vec{\theta}$, por

$$A(\delta\vec{\theta}) = I + \delta\vec{\theta} \cdot \vec{\Sigma} + O(\delta\theta^2) \tag{53}$$

onde $\vec{\Sigma}$ é um vetor formado de 3 matrizes,

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma_x \\ \Sigma_y \\ \Sigma_z \end{pmatrix}. \tag{54}$$

com Σ_x, Σ_y e Σ_z matrizes 3×3 constantes. Explicitamente a Eq.(53) fica

$$A(\delta\vec{\theta}) = I + \delta\theta_x \cdot \Sigma_x + \delta\theta_y \cdot \Sigma_y + \delta\theta_z \cdot \Sigma_z + O(\delta\theta^2). \tag{55}$$

Esta equação pode ser escrita também como

$$A(\delta\vec{\theta}) = (I + \delta\theta_x \cdot \Sigma_x)(I + \delta\theta_y \cdot \Sigma_y)(I + \delta\theta_z \cdot \Sigma_z) + O(\delta\theta^2), \tag{56}$$

pois até primeira ordem em $\delta\theta$, as Eqs.(55,56) são idênticas.

Embora ainda não saibamos qual é a forma das matrizes Σ_x, Σ_y e Σ_z, elas não dependem a natureza da rotação, ou seja, nem do θ, nem do $\vec{n}$. A expressão (56) manifesta uma informação bastante importante. Isto é, uma rotação infinitesimal na direção $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ é equivalente a rotações sucessivas em torno de cada um dos tres eixos do sistema de Coordenadas, com ângulos,

$$\delta\theta\, n_x, \delta\theta n_y, \delta\theta n_z$$

respectivamente. Também, o resultado não depende da ordem destas 3 rotações. Note que este fato só é válido para rotações de ângulos infinitesimais. Para ângulos gerais, a afirmação acima não é verdade.

- *A rotação infinitesimal em torno de um vetor $\vec{n}$ pode ser decomposta em 3 rotações em torno dos eixos do sistema de coordenadas, com cada ângulo proporcional a componente respectiva do vetor $\vec{n}$.*

Exercício: Verifique que o resultado de duas rotações finitas sucessivas não é igual quando a ordem das rotações foi invertida.

A decomposição de uma rotação infinitesimal em 3 rotações infinitesimais em torno de eixos X, Y, e Z permite nos determinar as matrizes Σ_x, Σ_y e Σ_z, fácilmente. Consideramos a rotação em torno do eixo X por um ângulo $\delta\theta$. Temos

$$A_X(\delta\theta) = I + \delta\theta\Sigma_x + O(\delta\theta^2),$$

já que $\vec{n} = (1, 0, 0)$, neste caso. Assim, concluimos que

$$\Sigma_x = \left.\frac{d}{d\theta} A_X(\theta)\right|_{\theta=0}. \tag{57}$$

Por outro lado, a rotação do sistema $\mathcal{R}_x(\theta)$ por um ângulo θ em torno do eixo X causa a seguinte mudança nos vetores da base,

$$\begin{aligned}
&\mathcal{R}_x|e_x\rangle = |e_x\rangle, \\
&\mathcal{R}_x|e_y\rangle = \cos\theta|e_y\rangle + \sin\theta|e_z\rangle, \\
&\mathcal{R}_x|e_z\rangle = \cos\theta|e_z\rangle - \sin\theta|e_y\rangle.
\end{aligned}$$

Utilizando a Eq.(8), temos a forma explicita da matriz A_X com ângulo de rotação θ dada por

$$A_X(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & \sin\theta \\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}. \tag{58}$$

Assim, podemos calcular a matriz Σ_x por

$$\begin{aligned}
\Sigma_x &= \left.\frac{d}{d\theta} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & \sin\theta \\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\right|_{\theta=0} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{59}$$

Analogamente, obtemos

$$\Sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{60}$$

Exercício: Obtenha as matrizes Σ_y e Σ_z.

Com estas $\Sigma's$, podemos escrever $A(\delta\vec{\theta})$ até primeira ordem em $\delta\theta$ por

$$A(\delta\vec{\theta}) = I + \delta\vec{\theta} \cdot \vec{\Sigma} \tag{61}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & \delta\theta\, n_z & -\delta\theta\, n_y \\ -\delta\theta\, n_z & 1 & \delta\theta\, n_x \\ \delta\theta\, n_y & -\delta\theta\, n_x & 1 \end{pmatrix}. \tag{62}$$

É interessante notar que para esta rotação infinitesimal ativa, um vetor $\vec{r}$ qualquer se transforma em

$$\begin{aligned} \vec{r}' &= A(\delta\vec{\theta})\, \vec{r} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & \delta\theta\, n_z & -\delta\theta\, n_y \\ -\delta\theta\, n_z & 1 & \delta\theta\, n_x \\ \delta\theta\, n_y & -\delta\theta\, n_x & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \\ &= \vec{r} - \delta\theta \begin{pmatrix} n_y z - n_z y \\ n_z x - n_x z \\ n_x y - n_y x \end{pmatrix} = \vec{r} - \delta\theta\ (\vec{n} \times \vec{r})\,. \end{aligned} \tag{63}$$

Na equação acima, notamos que

$$\left(\vec{n} \cdot \vec{\Sigma}\right) \vec{r} = -\vec{n} \times \vec{r}. \tag{64}$$

Assim, a diferença de coordenadas causada em termos de rotação infinitesimal (ativa) do vetor é

$$\Delta\vec{r} = \vec{r}' - \vec{r} = -\delta\theta\ \vec{n} \times \vec{r}.$$

Exercício: Interprete o resultado acima geometricamente.

D. Reconstrução da Rotação Finita

Uma vez obtida a representação explicita de uma rotação infinitesimal, podemos reconstruir a rotação com ângulo finita pela Eq.(**??**)

$$
\begin{aligned}
A(\vec{\theta}) &= \lim_{N\to\infty} \overbrace{A(\delta\vec{\theta})A(\delta\vec{\theta})\cdots A(\delta\vec{\theta})}^{N \text{ termos}} \\
&= \lim_{N\to\infty} \left(A(\delta\theta)\right)^N \\
&= \lim_{N\to\infty} \left(I + \delta\vec{\theta}^T \cdot \vec{\Sigma}\right)^N \\
&= \lim_{N\to\infty} \left(I + \frac{1}{N}\vec{\theta}^T \cdot \vec{\Sigma}\right)^N \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\vec{\theta}^T \cdot \vec{\Sigma}\right)^n && (65)\\
&= I + \vec{\theta}^T \cdot \vec{\Sigma} + \frac{1}{2}\left(\vec{\theta}^T \cdot \vec{\Sigma}\right)^2 + \frac{1}{3!}\left(\vec{\theta}^T \cdot \vec{\Sigma}\right)^3 + \cdots && (66)
\end{aligned}
$$

Aqui utilizamos a fórmula bem conhecida[2]

$$\lim_{N\to\infty}(1+\frac{t}{N})^N = e^t = 1 + t + \frac{1}{2!}t^2 + \frac{1}{3!}t^3 + \cdots . \tag{67}$$

Exercício: Talvez alguns leitores possam dúvidar do truncamento de $A(\delta\vec{\theta})$ só até a primeira ordem em $\delta\theta$. Será que os outros termos de ordem superior que foram jogados fora não são importante para recuperar a rotação original, $A(\vec{\theta})$ como a sequência das rotações infinitesimais? Para ver isto, prove que

$$\lim_{N\to\infty}\left(1+\frac{t}{N}+\frac{s}{N^2}\right)^N = \lim_{N\to\infty}\left(1+\frac{t}{N}\right)^N . \tag{68}$$

Agora, vamos calcular os termos da série, Eq.(66). Em primeiro lugar,

$$
\begin{aligned}
\vec{\theta} \cdot \vec{\Sigma} &= \theta\, \vec{n}^T \cdot \vec{\Sigma} \\
&= \theta \begin{pmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & n_x & 0 \end{pmatrix} .
\end{aligned} \tag{69}
$$

Assim,

$$\left(\vec{\theta}^T \cdot \vec{\Sigma}\right)^n = \theta^n \left(\vec{n}^T \cdot \vec{\Sigma}\right)^n . \tag{70}$$

Para calcular $\left(\vec{n}^T \cdot \vec{\Sigma}\right)^n$, começamos com $n = 2$.

$$
\begin{aligned}
\left(\vec{n}^T \cdot \vec{\Sigma}\right)^2 &= \begin{pmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & n_x & 0 \end{pmatrix}^2 \\
&= \begin{pmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & n_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & n_x & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} -n_y^2 - n_z^2 & n_x n_y & n_x n_z \\ n_x n_y & -n_z^2 - n_x^2 & n_y n_z \\ n_x n_z & n_y n_z & -n_x^2 - n_y^2 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} n_x^2 & n_x n_y & n_x n_z \\ n_x n_y & n_y^2 & n_y n_z \\ n_x n_z & n_y n_z & n_z^2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&= \vec{n}\vec{n}^T - I, \qquad (71)
\end{aligned}
$$

onde utilizamos o fato de que o vetor $\vec{n}$ é normalizado $\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1\right)$, e a quantidade $\vec{n}\vec{n}^T$, chamado de *diadica*,

$$
\vec{n}\vec{n}^T \equiv \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_x & n_y & n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_x^2 & n_x n_y & n_x n_z \\ n_x n_y & n_y^2 & n_y n_z \\ n_x n_z & n_y n_z & n_z^2 \end{pmatrix}. \qquad (72)
$$

Vamos introduzir as seguintes notações

$$
P_{//} \equiv \vec{n}\vec{n}^T, \qquad (73)
$$

$$
P_{\perp} \equiv I - \vec{n}\vec{n}^T. \qquad (74)
$$

Note que

$$
P_{//} + P_{\perp} = I, \qquad (75)
$$

e

$$
P_{//}^2 = P_{//}, \qquad (76)
$$

$$
P_{\perp}^2 = P_{\perp}. \qquad (77)
$$

1. Para qualquer vetor $\vec{r}$, o vetor $\vec{r}_{//}$ formado pela aplicação da matriz $P_{//}$ é paralelo a $\vec{n}$. Isto é, se
$$\vec{r}_{//} = P_{//}\vec{r}, \quad {}^{\forall}\vec{r}$$
então,
$$\vec{r}_{//} = Const. \times \ \vec{n}, \tag{78}$$
onde $Const = (\vec{n}^T \cdot \vec{r})$. O vetor $P_{//}\vec{r}$ é, portanto, a projeção do vetor $\vec{r}$ na direção $\vec{n}$. Em particular,
$$P_{//}\vec{n} = \vec{n}. \tag{79}$$

2. Para qualquer vetor $\vec{r}$, o vetor $\vec{r}_{\perp}$ formado pela aplicação da matriz $P_{\perp}$ é perpendicular a $\vec{n}$. Isto é, se
$$\vec{r}_{\perp} = P_{\perp}\vec{r}, \quad {}^{\forall}\vec{r}$$
então,
$$\vec{n}^T \cdot \vec{r}_{\perp} = 0. \tag{80}$$
O vetor $P_{\perp}\vec{r}$ é, portanto, a projeção do vetor $\vec{r}$ na direção perpendicular a $\vec{n}$ dentro do plano formado de $\vec{r}$ e $\vec{n}$. Em particular,
$$P_{\perp}\vec{n} = 0. \tag{81}$$

3. Para qualquer vetor $\vec{r}$, sempre podemos decompor em dois vetores, um paralelo a $\vec{n}$, e o outro perpendicular a $\vec{n}$, por
$$\begin{aligned}\vec{r} &= \left(P_{//} + P_{\perp}\right)\, \vec{r} \\ &= \vec{r}_{//} + \vec{r}_{\perp}. \end{aligned} \tag{82}$$

Exercício: As matrizes $P_{//}, P_{\perp}$ são chamadas de *projetor*. Considere o significado das equações,(76,77) do ponto de vista do projetor.

Exercício: Prove que os autovalores de um projetor é 0 e 1.

As matrizes $P_{//}$ e $P_{\perp}$ são chamadas de operadores de projeção, com razão acima. Utilizando esta notação, temos
$$\left(\vec{n} \cdot \vec{\Sigma}\right)^2 = -P_{\perp}. \tag{83}$$

Agora,

$$
\begin{aligned}
\left(\vec{n}\cdot\vec{\Sigma}\right)^3 &= \left(\vec{n}\cdot\vec{\Sigma}\right)^2\left(\vec{n}\cdot\vec{\Sigma}\right)\\
&= -\left(1-\vec{n}\vec{n}^T\right)\,\vec{n}^T\cdot\vec{\Sigma}\\
&= \; -\vec{n}^T\cdot\vec{\Sigma}+\begin{pmatrix} n_x^2 & n_xn_y & n_xn_z\\ n_xn_y & n_y^2 & n_yn_z\\ n_xn_z & n_yn_z & n_z^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -n_z & n_y\\ n_z & 0 & -n_x\\ -n_y & n_x & 0\end{pmatrix}\\
&= \; -\vec{n}^T\cdot\vec{\Sigma},
\end{aligned}
\tag{84}
$$

e

$$
\left(\vec{n}\cdot\vec{\Sigma}\right)^4 = \left(\vec{n}\cdot\vec{\Sigma}\right)^2\left(\vec{n}\cdot\vec{\Sigma}\right)^2 = \left(-P_\perp\right)\left(-P_\perp\right) = P_\perp. \tag{85}
$$

e assim por diante. Pela inspeção, concluimos que

$$
\begin{aligned}
\left(\vec{n}\cdot\vec{\Sigma}\right)^n &= (-1)^{\frac{n-1}{2}}\left(\vec{n}\cdot\vec{\Sigma}\right), \quad n: \acute{\imath}\text{mpar},\\
&= (-1)^{\frac{n}{2}}\,P_\perp, \qquad\qquad n: \text{par}.
\end{aligned}
$$

Com este resultado, vemos que é conviniente separar a soma da Eq.(65) em duas partes, uma soma sobre índice n par, e a outra, a soma sobre índice n ímpar.

$$
\begin{aligned}
A(\vec{\theta}) &= \sum_{\substack{n=0\\ par}}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\vec{\theta}^T\cdot\vec{\Sigma}\right)^n+\sum_{\substack{n=1\\ \acute{\imath}mpar}}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\vec{\theta}^T\cdot\vec{\Sigma}\right)^n\\
&= 1-P_\perp+P_\perp\sum_{\substack{n=0\\ par}}^{\infty}\frac{(-1)^{n/2}}{n!}\theta^n+\left(\vec{n}^T\cdot\vec{\Sigma}\right)\sum_{\substack{n=1\\ \acute{\imath}mpar}}^{\infty}\frac{(-1)^{n-1/2}}{n!}\theta^n\\
&= P_{//}+\cos\theta\;P_\perp+\sin\theta\,\left(\vec{n}^T\cdot\vec{\Sigma}\right),
\end{aligned}
\tag{86}
$$

onde utilizamos as expressões;

$$
\sin\theta = \theta-\frac{1}{3!}\theta^3+\frac{1}{5!}\theta^5+\cdots = \sum_{\substack{n=1\\ \acute{\imath}mpar}}^{\infty}\frac{(-1)^{n-1/2}}{n!}\theta^n, \tag{87}
$$

$$
\cos\theta = 1-\frac{1}{2!}\theta^2+\frac{1}{4!}\theta^4+\cdots = \sum_{\substack{n=0\\ par}}^{\infty}\frac{(-1)^{n/2}}{n!}\theta^n. \tag{88}
$$

Exercício: Prove as Eqs.(87,88) acima.

Exercício: Confira que para $\theta = 0$, recupera-se a transformação de identidade, i.e., $A(\theta) \to I$.

Em termos de vetor resultante da aplicação da rotação, temos

$$\begin{aligned}
\vec{r}' &= A\left(\vec{\theta}\right)\vec{r} \\
&= \left(P_{//} + \cos\theta\ P_{\perp} + \sin\theta\ \left(\vec{n}^T \cdot \vec{\Sigma}\right)\right)\vec{r} \\
&= \vec{r}_{//} + \cos\theta\ \vec{r}_{\perp} + \sin\theta\ (\vec{n}\times\vec{r}) \\
&= (\vec{n}\cdot\vec{r})\,\vec{n} + \cos\theta\ \left[\vec{r} - (\vec{n}\cdot\vec{r})\ \vec{n}\right] + \sin\theta\ (\vec{n}\times\vec{r})\,. \qquad (89)
\end{aligned}$$

Note que os tres vetores,

$$\begin{aligned}
&\vec{r}_{//}, \\
&\vec{r}_{\perp}, \\
&\vec{n}\times\vec{r},
\end{aligned}$$

formam uma base orthogonal.

Exercício: Prove a afirmação acima.

Exercício: Interprete geometricamente o resultado, Eq.(89).

Vamos introduzir uma base orthonormal,

$$\begin{aligned}
\vec{e}_1 &= \vec{n}, \\
\vec{e}_2 &= \frac{1}{\sqrt{N_2}}\vec{r}_{\perp}, \\
\vec{e}_3 &= \frac{1}{\sqrt{N_3}}\vec{n}\times\vec{r}.
\end{aligned}$$

onde N_2 e N_3 são as constantes de normalização. A base, $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_2\}$ é destrogira nesta ordem.

Exercício: Calcule N_2 e N_3 e expresse em termos de $r = |\vec{r}|$ e do ângulo entre $\vec{n}$ e $\vec{r}$.

Exercício: Mostre que a base, $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_2\}$é destrogira nesta ordem.

Exercício: Qualquer vetor pode ser expresso em termos de uma combinação linear destes vetor de base.

$$^{\forall}\vec{x} \in R^3,\ \vec{x} = x_1\vec{e}_1 + x_2\vec{e}_2 + x_3\vec{e}_3.$$

com este fato, prove que

$$\sum_{i=1}^{3} \vec{e}_i\,\vec{e}_i^{T} = I.$$

A matriz U formada destes vetores,

$$U = \begin{pmatrix} \vec{e}_1^T \\ \vec{e}_2^T \\ \vec{e}_3^T \end{pmatrix}$$

é uma matriz orthogonal,

$$U^T U = U U^T = 1,$$

e define uma transformaçao de sistema de coordenadas. A matriz de rotação A fica representada nesta nova base por

$$A \to A' = U A U^{-1},$$

sendo,

$$\begin{aligned} A' &= \begin{pmatrix} \vec{e}_1^T \\ \vec{e}_2^T \\ \vec{e}_3^T \end{pmatrix} \left[P_{//} + \cos\theta \; P_\perp + \sin\theta \; \left(\vec{n}^T \cdot \vec{\Sigma} \right) \right] \left(\vec{e}_1 \;\; \vec{e}_2 \;\; \vec{e}_3 \right) \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & \sin\theta \\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{90}$$

Aqui, utlizamos as propriedades,

$$P_{//}\, \vec{e}_1 = \vec{e}_1, \;\; P_{//}\, \vec{e}_2 = 0, \;\; P_{//}\, \vec{e}_3 = 0, \tag{91}$$

$$P_\perp \vec{e}_1 = 0, \;\;\; P_\perp \vec{e}_2 = \vec{e}_2, \;\;\; P_\perp \vec{e}_3 = 0, \tag{92}$$

$$\left(\vec{n}^T \cdot \vec{\Sigma} \right) \vec{e}_1 = 0, \; \left(\vec{n}^T \cdot \vec{\Sigma} \right) \vec{e}_2 = \vec{e}_3, \; \left(\vec{n}^T \cdot \vec{\Sigma} \right) \vec{e}_3 = -\vec{e}_2. \tag{93}$$

Nesta base, a matriz da rotação tem a forma bem familiar. Isto é, a rotação com ângulo θ em torno do primeiro eixo. Já vimos que os autovalores da matriz desta forma são 1 e $e^{\pm i\theta}$. Considerando que a transformação da base não altera os autovalores (ver a Eq.(50), provamos que os autovalores de quauler matriz de rotação $A(\vec{\theta})$ é sempre 1 e $e^{\pm i\theta}$.

Exercício: Verifique as Eqs.(91,92,93).

Exercício: Prove a (90).

E. Geradores de Grupo e Algebra de Lie

Para um grupo contínuo como no caso de grupo de rotação, existem parâmetros contínuos para especificar os elementos do grupo. Seja $G = \{A(\vec{p})\}$ um grupo contínuo com $\vec{p} = (p_1, p_2, .., p_n)$ os parâmetros reais que especificar o elemento A do grupo. O número dos parâmetros reais é chamado dimensão do grupo. Escolhendo a parametrização adequada, se escrevemos qualquer elemento do grupo como

$$A(\vec{p}) = e^{\vec{p}\cdot\vec{\Sigma}}$$

onde $\vec{\Sigma} = \{\Sigma_1, \Sigma_2, ..., \Sigma_n\}$ e cada Σ_i é chamado o gerador do grupo. Por definição, para um grupo contínuo de dimensão n, existe n geradores do grupo. Para um grupo contínuo, o comutador de dois geradores do grupo, digamos $[\Sigma_i, \Sigma_j]$ pode ser escrita como uma combinação linear dos geradores,

$$[\Sigma_i, \Sigma_j] = \sum_k f_{ij}^k \Sigma_k.$$

Esta regra de comutadores entre geradores do grupo é chamado de algebra de Lie e os constantes, f_{ij}^k são chamados de constantes de estrutura do grupo. Para ver o papel desta algebra para a estrutura do grupo, é útil a seguinte formula de Campbell-Hausdorf-Baker,

$$e^M e^N = e^{M+N+\frac{1}{2}[M,N]+\frac{1}{12}[(M-N),[M,N]]+\cdots}$$

que vale para os dois matrizes M e N. Para verificar isto, vamos introduzir o parâmetro t e escrevemos como

$$e^{Mt}e^{Nt} = e^{F(t)}.$$

Podemos expandir $F(t)$ em série de t.

$$F(t) = F_1 t + \frac{1}{2!}F_2 t^2 + \frac{1}{3!}F_3 t^3 + \cdots$$

onde F_1, F_2... são matrizes a serem determindadas. Ou seja, devemos ter

$$e^{Mt}e^{Nt} = e^{F_1 t + F_2 t^2 + F_3 t^3 + \cdots}$$

para todos os valores de t. Isto significa que as derivadas de todas ordens dos dois lados em relação a t no ponto $t = 0$ também tem que ser igual. Usando a regra,

$$\frac{d(A(t)B(t))}{dt} = \frac{dA}{dt}B + A\frac{dB}{dt},$$

temos

$$Me^{Mt}e^{Nt} + e^{Mt}e^{Nt}N = \left(F_1 + F_2 t + \frac{1}{2!}F_3 t^2 + \cdots\right)e^{F(t)},$$

$$M^2 e^{Mt}e^{Nt} + 2Me^{Mt}e^{Nt}N + e^{Mt}e^{Nt}N^2 = \left\{(F_2 + F_3 t + \cdots) + \left(F_1 + F_2 t + \frac{1}{2!}F_3 t^2 + \cdots\right)^2\right\}e^{F(t)}$$

$$\vdots$$

Fazendo $t = 0$, temos

$$M + N = F_1,$$
$$M^2 + 2MN + N^2 = F_1^2 + F_2,$$
$$\vdots$$

Substituindo $F_1 = M + N$ na segunda equação, temos

$$\begin{aligned} F_2 &= M^2 + 2MN + N^2 - (M+N)^2 \\ &= MN - NM \\ &= [M, N], \end{aligned}$$

onde $[M, N]$ é o comutador de duas matrizes, M e N. Podemos determinar F_3, F_4 ... sucessivamente.

Exercício: Calcule a fórmula de Campbell-Hausdorff até a segunda ordem,

$$e^M e^N = e^{M+N+\frac{1}{2}[M,N]+\frac{1}{12}[(M-N),[M,N]]+\cdots}.$$

Podemos mostrar que todas as $F's$ podem ser escritas como combinações lineares de comutadores de ordem superiores (comutador de comutador). Então, se M e N for os membros da algebra de Lie, o exponento resultante da fórmula de Campbell-Hausdorff-Baker fica escrita como combinção linear dos membros da algebra,

$$e^{a\Sigma_i}e^{b\Sigma_j} = e^{\sum_k c_k \Sigma_k},$$

de tal forma que as exponenciações dos membros da algebra de fato forma um grupo.

Exercício: Calcule as constantes de estruturas da algebra formada de $\{\Sigma_x, \Sigma_y, \Sigma_z\}$ do grupo $O(3)$.

F. Ângulos de Euler

Vamos introduzir um outro conjunto de variáveis conhecidos como ângulos de Euler para especificar uma rotação. Por exemplo, como vimos, uma cofiguração de um pião com o ponto extremo fixo é completamente especificada pela direção $\vec{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$ do seu eixo, e o ângulo de rotação ψ do pião em torno do seu eixo (Ver Fig.1).

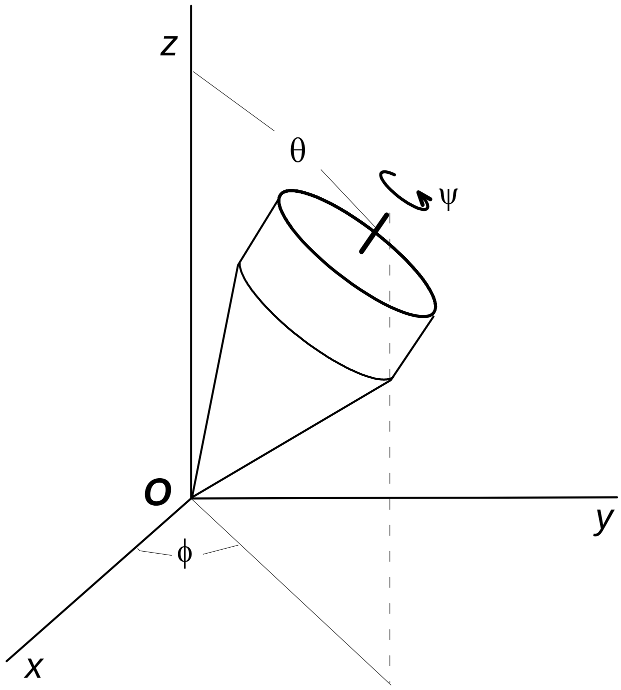

Fig.1 Coordenadas para um pião

A configuração do pião acima pode ser obtida em termos de três rotações sucessivas a partir da configuração em que o está colocado em pé verticalmente. Primeiro, rode o pião de um ângulo ψ em torno do seu eixo. Em seguida, incline o eixo na direção do eixo X no plano $X - Z$ (isto é, a rotação em torno do eixo Y) pelo ângulo θ. Finalmente rode o sistema novamente em torno do eixo Z. Em termos de operadores de rotação,

$$\mathcal{R}(\phi,\theta,\psi) = \mathcal{R}_z(\phi)\,\mathcal{R}_y(\theta)\,\mathcal{R}_z(\psi)\,. \tag{94}$$

Na base fixo no espaço, este operador é representado pela matriz $A(\theta,\phi,\psi)$, por sua vez é dada por

$$A(\phi,\theta,\psi) = A_z(\phi)\,A_y(\theta)\,A_z(\psi)\,,$$

onde $A_z(\phi), A_y(\theta)$ e $A_z(\psi)$ são as representações dos operadores, $\mathcal{R}_z(\phi), \mathcal{R}_y(\theta)$ e$\mathcal{R}_z(\psi)$, respectivamente. Isto é,

$$A_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{95}$$

$$A_z(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & -\sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}, \tag{96}$$

$$A_z(\psi) = \begin{pmatrix} \cos\psi & \sin\psi & 0 \\ -\sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{97}$$

Assim, temos

$$\begin{aligned} A(\phi,\theta,\psi) &= \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\psi & -\sin\psi & 0 \\ \sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\phi\cos\theta\cos\psi - \sin\phi\sin\psi & -\cos\phi\cos\theta\sin\psi - \sin\phi\cos\psi & \cos\phi\sin\theta \\ \sin\phi\cos\theta\cos\psi + \cos\phi\sin\psi & -\sin\phi\cos\theta\sin\psi + \cos\phi\cos\psi & \sin\phi\sin\theta \\ -\sin\theta\cos\psi & \sin\theta\sin\psi & \cos\theta \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{98}$$

O vetor de coluna no sistema fixo no espaço é transformado para o vetor do sistema de coordenadas intrisêco do pião por

$$\begin{pmatrix} x_c \\ y_c \\ z_c \end{pmatrix} = A^{-1} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = A^T \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \cos\phi\cos\theta\cos\psi - \sin\phi\sin\psi & \sin\phi\cos\theta\cos\psi + \cos\phi\sin\psi & -\sin\theta\cos\psi \\ -\cos\phi\cos\theta\sin\psi - \sin\phi\cos\psi & -\sin\phi\cos\theta\sin\psi + \cos\phi\cos\psi & \sin\theta\sin\psi \\ \cos\phi\sin\theta & \sin\phi\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}.$$
$$= A^T(\phi,\theta,\psi) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad (99)$$

onde

$$A^T(\phi,\theta,\psi) = \begin{pmatrix} \cos\phi\cos\theta\cos\psi - \sin\phi\sin\psi & \sin\phi\cos\theta\cos\psi + \cos\phi\sin\psi & -\sin\theta\cos\psi \\ -\cos\phi\cos\theta\sin\psi - \sin\phi\cos\psi & -\sin\phi\cos\theta\sin\psi + \cos\phi\cos\psi & \sin\theta\sin\psi \\ \cos\phi\sin\theta & \sin\phi\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

é a matriz da transformação de coordenadas do sistema fixo no espaço para o sistema fixo no pião (rotação passiva). De fato, por exemplo, o vetor do eixo do pião

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\phi \\ \sin\theta\sin\phi \\ \cos\theta \end{pmatrix}$$

se transforma como

$$\vec{n}_c = A^T(\phi,\theta,\psi)\ \vec{n}$$
$$= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (100)$$

mostrando o vetor no sistema fixo no pião corresponde exatamente o eixo z do pião. Os ângulos ϕ, θ e ψ acima para determinar a configuração do pião podem ser utilidade mais geral para determinar a posição relativa entre dois sistemas de coordenadas ligado pela uma rotação em torno do ponto comun. Em outras palavras, estes ângulos podem ser usados para especificar uma rotação arbitrária de um sistema de coordenadas no lugar do vetor $\vec{\theta}$ que introduzido na sessão anterior. Os ângulos ϕ, θ e ψ são chamados de *ângulos de Euler.*

É interessante notar que a rotação, $\mathcal{R}(\phi,\theta,\psi)$ da Eq.(94) pode ser obtida de forma diferente. Primeira, como antes, coloque o pião verticalmente. Rode o sistema em torno do *eixo* Z_c *do pião* pelo ângulo ϕ. Em seguida, rode o sistema em torno do *eixo* Y_c *do pião* pelo ângulo θ e, finalmente, rode o sistema em torno do *eixo* Z_c *do pião* por ângulo ψ. Note que agora as rotações referem sempre em torno dos eixos do pião e não do sistema de coordenadas fixo no espaço, mas a ordem da rotaçãoes é invertida. Temos

$$\mathcal{R}(\phi,\theta,\psi) = \mathcal{R}_{Z_c}(\psi)\mathcal{R}_{Y_C}(\theta)\mathcal{R}_{Z_C}(\phi). \tag{101}$$

Naturalmente as representações matriciais destas rotações na base fixa no espaço já não são mais dadas pelas Eqs.(95,96,97).

Exercício: Mostre que

$$\mathcal{R}_{Z_c}(\psi)\mathcal{R}_{Y_C}(\theta)\mathcal{R}_{Z_C}(\phi) = \mathcal{R}_z\left(\phi\right)\mathcal{R}_y\left(\theta\right)\mathcal{R}_z\left(\psi\right).$$

II. REPRESENTAÇÃO DO GRUPO DE ROTAÇÃO EM TERMOS DE TRANSFORMAÇÃO DE FUNÇÕES

A correspondência

$$\mathcal{R} \to A\left(\alpha,\beta,\gamma\right)$$

é dita a representação do grupo da rotação pelo grupo $O\left(3\right)$. Isto é uma corrrespondência um a um entre os elementos do grupo da rotação e as matrizes 3×3, orthogonal. Esta representação é construida sobre um espaço vetorial tridmensional $V_3 = \left\{\vec{r}\right\}$. De certa forma, podemos dizer que essa representação está vendo a rotação através do seu efeito em cima de vetores tridimensionais. Em geral, podemos utilizar um espaço vetorial mais geral para representar um grupo como sendo o efeito de elemento do grupo em cima de um vetor neste espaço. Por exemplo, podemos considerar o conjunto de funções da posição $\vec{r}$,

$$\mathcal{V} = \left\{f\left(\vec{r}\right),\ \vec{r}\in V_3\right\}$$

Quando aplicar uma rotação no espaço V_3, uma função $f\left(\vec{r}\right)$ será alterada,

$$f\left(\vec{r}\right) \stackrel{\mathcal{R}}{\to} f'\left(\vec{r}\right) = O\left(\mathcal{R}\right)f\left(\vec{r}\right),$$

onde $O(\mathcal{R})$ é um operador que transforma a função $f(\vec{r})$ em uma nova função $f'(\vec{r})$ devido a mudança do sistema de coordenadas,

$$\vec{r} \to \vec{r}' = A(\mathcal{R})\,\vec{r}$$

O que é a forma do operador $O(\mathcal{R})$? Para estudar este problema, vamos considerar por simplicidade a rotação pelo ângulo θ em torno do eixo x. Como vimos, podemos construir a rotação por um ângulo finito pela sucessão de rotações infinitesimais,

$$\mathcal{R}(\theta) = \lim_{N\to\infty} \mathcal{R}(\delta\theta)^N .$$

e consequentemente devemos ter

$$O(\mathcal{R}(\theta)) = \lim_{N\to\infty} O(\mathcal{R}(\delta\theta))^N$$

com $\delta\theta = \theta/N$. Mas pela rotação infinitesimal, o vetor transforma como

$$\begin{aligned}\vec{r}' &= A(\mathcal{R}(\delta\theta))\,\vec{r}\\ &= \begin{pmatrix} 1 & \delta\theta & 0 \\ -\delta\theta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}\end{aligned}$$

do modo que

$$\begin{aligned} x' &= x + \delta\theta\ y, \\ y' &= y - \delta\theta\ x, \\ z' &= z. \end{aligned}$$

A nova função $f'(\vec{r})$ é definida como

$$f'(\vec{r}) \equiv f(\vec{r}')$$

Assim, para rotação infiniteseimal, temos $f'(x,y,z) = f(x+\delta\theta\ y,\ y-\delta\theta\ x,\ z)$Considerando que $\delta\theta$ infinitesimal, podemos escrever

$$\begin{aligned} f'(x,y,z) &= f(x,y,z) + \delta\theta\ y\frac{\partial}{\partial x}f(x,y,z) - \delta\theta\ x\frac{\partial}{\partial y}f(x,y,z) \\ &= (1 - i\ \delta\theta\ L_z)\ \ f(x,y,z), \end{aligned}$$

onde introduzimos um operador diferencial,

$$L_z = \frac{1}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \tag{102}$$

O fator i foi introduzido pela conveniência posterior. Para a rotação de um ângulo finito θ, temos

$$\begin{aligned} f'(\vec{r}) &= \lim_{N\to\infty}\left(1 - i\,\frac{\theta}{N}\,L_z\right)^N f(x,y,z) \\ &= e^{-i\theta L_z} f(\vec{r}) \end{aligned}$$

Em vez de rotação em torno do eixo z, se rodamos em torno do eixo x, ou do eixo y, temos analogamente as variações da função como

$$f(\vec{r}) \overset{\mathcal{R}_x}{\to} f\,'(\vec{r}) = e^{-i\theta L_x} f(\vec{r}), \tag{103}$$

$$f(\vec{r}) \overset{\mathcal{R}_y}{\to} f\,'(\vec{r}) = e^{-i\theta L_y} f(\vec{r}), \tag{104}$$

onde

$$L_x = \frac{1}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \tag{105}$$

$$L_y = \frac{1}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right). \tag{106}$$

Exercício: Prove as eqs.(103,104) junto as Eqs.(105,106).

Das Eqs.(102,105,106) podemos introduzir um vetor operador,

$$\vec{L} = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \frac{1}{i}\,\vec{r}\times\nabla$$

Exercício: Mostre que

$$[L_i, L_j] = iL_k, \quad (i,j,k, ciclica)$$

Exercício: Se definimos as matrizes,

$$\vec{L}^{(3)} = i\,\vec{\Sigma},$$

mostre que a algebra de Lie para $\vec{L}^{(3)}$ é exatamente igual a de $\vec{L}$.

Exercício: Definimos o operador diferencial,

$$\vec{L}^2 \equiv L_x^2 + L_y^2 + L_z^2.$$

Mostre que $\vec{L}^2$ comuta com todos os $L_i's$.

Exercício: Calcule explicitamente

$$\left(L^{(3)}\right)^2 \equiv \left(L_x^{(3)}\right)^2 + \left(L_y^{(3)}\right)^2 + \left(L_z^{(3)}\right)^2$$

e explique porque a matriz $\left(L^{(3)}\right)^2$ comuta com todas as matrizes, $L_i^{(3)}$.

A. Alguns Teoremas para a representação de um grupo

Vamos recordar a definição de um grupo. Consideramos um conjunto de elementos (seja finito, seja infinito)

$$G = \{A, B, C, ...\}$$

no qual está definida uma regra de multiplicação (produto), representado pelo símbolo " $\cdot$ ", entre dois elementos de G. Dizemos que o conjunto forma um grupo sob o produto $\cdot$, quando as seguintes propriedades são satisfeitas:

- o conjunto é fechado pela multiplicação,

$$A \cdot B \in G, \quad {}^{\forall}A, B \in G$$

- associatividade:

$$(A \cdot B) \cdot C = A \cdot (B \cdot C),$$

- existência do elemento unidade[3] (identidade) I,

$$A \cdot I = I \cdot A = A,$$

- existência do elemento inverso A^{-1} para qualquer elemento A, tal que

$$A^{-1} \cdot A = A \cdot A^{-1} = I.$$

1. Representação

Sejam G e S grupos. Um mapeamento

$$G \to S$$

é dito *representação* de G em termos de S quando as regras de multiplicação do grupo G são preservadas por este mapeamento. Podemos introduzir o indice λ para especificar os elementos do grupo G,

$$R_\lambda \in G.$$

Isto é, estabelecemos a correspondência um a um entre os elementos de grupo e os valores de λ. Aqui, o parâmetro λ não necessariamente um número inteiro, mas pode ser um conjunto de números contínuos. Quando λ é número inteiro, o grupo é chamado grupo discreto. Um grupo é chamado grupo contínuo se o parâmetro λ é contínuo. Neste caso, λ é chamado "coordenada" para o grupo.

O mapeamento $G \to S$ pode ser escrito para todos os valores de índice λ,

$$R_\lambda \in G \to S_\lambda \in S,$$

ou seja, se

$$R_{\lambda_1} \in G,$$

temos

$$S_{\lambda_1} \in S,$$

e se

$$R_{\lambda_2} \in G,$$

temos

$$S_{\lambda_2} \in S,$$

etc. Este mapeamento é dito representação quando, se

$$R_{\lambda_2} R_{\lambda_1} = R_{\lambda_3},$$

então

$$S_{\lambda_2} S_{\lambda_1} = S_{\lambda_3}.$$

Um exemplo: o conjunto de matrizes $(n \times n)$ não singulares $\{M^{(n)}\}$ formam um grupo com o produto matricial usual. Assim, é possível construir uma representação de um grupo G em termos de matrizes $(n \times n)$. Neste caso, se

$$R_1, R_2 \in G,$$

e

$$\begin{aligned} R_1 &\to A(R_1) \in \{M^{(n)}\}, \\ R_2 &\to A(R_2) \in \{M^{(n)}\}, \end{aligned}$$

então

$$A(R_1)\, A(R_2) = A(R_1 R_2) \in \{M^{(n)}\}.$$

Note que aqui, o produto de grupo de G fica transcrito como produto matricial em $M^{(n)}$.

Um outro exemplo: o conjunto de matrizes unitárias forma um grupo. Assim, podemos construir uma representação através do mapeamento do grupo G para o grupo de matrizes unitárias. Esta representação é chamada de representação unitária.

Numa representação matricial de um grupo, podemos considerar o espaço vetorial linear $\mathcal{H}$ no qual estas matrizes atuam. Assim, as matrizes de representação formam um conjunto de transformações de vetores neste espaço.

$$\begin{aligned} &{}^{\forall}\vec{x} \in \mathcal{H}, \quad {}^{\forall}R \in G, \\ &A(R) : \vec{x} \to \vec{x}' = A(R)\, \vec{x}. \end{aligned}$$

Seja $\mathcal{H}_1$ um subespaço de $\mathcal{H}$. O subespaço $\mathcal{H}_1$ é dito invariante sob o grupo G se

$$\begin{aligned} &{}^{\forall}\vec{x} \in \mathcal{H}_1, \\ &\vec{x}' = A(R)\, \vec{x} \in \mathcal{H}_1, \quad {}^{\forall}R \in G. \end{aligned}$$

A representação é dita *irredutível* se não existe nenhum subespaço invariante em $\mathcal{H}$. Se existe pelo menos um subespaço invariante, a representação é dita redutível. Quando uma representação é redutível, possuindo o subespaço invariante $\mathcal{H}_1$, é sempre possível arrumar as bases da representação de tal modo que as matrizes fiquem diagonais em blocos.

$$A(R) \to \begin{pmatrix} A^{(1)}(R) & 0 \\ 0 & A^{(2)}(R) \end{pmatrix}, \quad {}^{\forall}R \in G.$$

Na expressão acima a submatriz $A^{(1)}(R)$ atua no subespaço $\mathcal{H}_1$ e a submatriz $A^{(2)}(R)$ atua no subespaço $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H} - \mathcal{H}_1$. Aqui, é fundamental a condição, $^{\forall}R \in G$. Isto é, todas as matrizes se tornam ao mesmo tempo diagonal em blocos. Para $R_1, R_2 \in G$, temos

$$A(R_1)A(R_2) \rightarrow \begin{pmatrix} A^{(1)}(R_1)A^{(1)}(R_2) & 0 \\ 0 & A^{(2)}(R_1)A^{(2)}(R_2) \end{pmatrix},$$

portanto, os dois conjuntos de submatrizes, $\left\{A^{(1)}(R)\right\}$ e $\left\{A^{(2)}(R)\right\}$ formam separadamente as representações independentes. Quando isto acontece, dizemos que a representação original $\{A(R)\}$ é decomposta em duas representações, $\left\{A^{(1)}(R)\right\}$ e $\left\{A^{(2)}(R)\right\}$. Se as dimensões dos espaços $\mathcal{H}$, $\mathcal{H}_1$, e$\mathcal{H}_2$ são n, n_1 e n_2, respectivamente, então expressamos esta decomposição da representação por

$$\{n\} = \{n_1\} \oplus \{n_2\}.$$

Naturalmente temos que ter

$$n = n_1 + n_2.$$

Para uma dada representação matricial de um grupo

$$\{n\} : R \rightarrow A(R),$$

sempre podemos construir sua representação adjunta por

$$R \rightarrow A^{\dagger}(R),$$

com o produto de grupo

$$R_1R_2 \rightarrow A^{\dagger}(R_2)A^{\dagger}(R_1) = A^{\dagger}(R_1R_2).$$

Note a ordem do produto matricial (inverso do anteiror). Esta representação é chamada de representação adjunta e a expressamos como

$$\overline{\{n\}}.$$

2. *Exemplo*

Para poder fixar a idéia, vamos considerar um exemplo simples. Consideramos um conjunto de dois elementos ordenados (a, b). Podemos considerar duas operações: a primeira, de não fazer nada, que denotamos por e, e a segunda, de trocar a ordem dos elementos, que denotamos por t. O conjunto destas duas operações formam um grupo de dois elementos, (e, t), pois podemos verificar que as operações sucessivas se resumem às seguintes possibilidades:

$$
\begin{aligned}
& e \cdot e = e, \\
& e \cdot t = t \cdot e = t, \\
& t \cdot t = e,
\end{aligned}
$$

que definem a estrutura do grupo. Chamaremos este grupo como grupo de permutação S_2. Para construir as matrizes vamos expressar esta estrutura numa tabela abaixo;

$$
\begin{array}{cc}
 & \begin{pmatrix} e & t \end{pmatrix} \\
\begin{pmatrix} e \\ t \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} e & t \\ t & e \end{pmatrix}
\end{array}
$$

É interessante notar que vale a seguinte regra de construir matrizes a partir desta tabela de produto: considere a tabela de multiplicação como uma matriz e coloque um (1) nos lugares em que aparece um determinado elemento do grupo e zero nos outros. Desta forma, podemos construir uma matriz para cada elemento do grupo. Estas matrizes formam uma representação do grupo. Por exemplo: para construir a matriz correspondente ao elemento e, coloque um (1) nos lugares onde este aparece e, nos outros lugares, coloque zero. Temos

$$
e \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{107}
$$

Analogamente, temos para o elemento t,

$$
t \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{108}
$$

Verificamos que as matrizes acima satisfazem as mesmas regras de produto que e e t,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$
$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Desta forma, o conjunto das associações Eqs.(107) and (108) forma uma representação do grupo S_2.

Só que esta representação não é irredutível pela seguinte razão: se considerarmos que estas matrizes são matrizes dos "operadores" e e t num espaço vetorial linear,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|e|1\rangle & \langle 1|e|2\rangle \\ \langle 2|e|1\rangle & \langle 2|e|2\rangle \end{pmatrix},$$
$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|t|1\rangle & \langle 1|t|2\rangle \\ \langle 2|t|1\rangle & \langle 2|t|2\rangle \end{pmatrix},$$

podemos associar os vetores de base como

$$|1\rangle \to \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$
$$|2\rangle \to \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

O espaço vetorial é então formado de vetores de combinação linear,

$$a|1\rangle + b|2\rangle \to \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}.$$

Neste espaço, podemos considerar as seguintes vetores,

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|1\rangle + |2\rangle\} \to \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$
$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|1\rangle - |2\rangle\} \to \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Vemos facilmente que

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

ou seja,

$$e|+\rangle = |+\rangle,$$
$$t|+\rangle = |+\rangle.$$

Em outras palavras, o subespaço unidmensional formado do vetor $|+\rangle$ é invariante sob o grupo. Analogamente, temos

$$e|-\rangle = |-\rangle,$$
$$t|-\rangle = -|-\rangle,$$

e o subespaço unidmensional formado do vetor $|-\rangle$ também é invariante sob o grupo. Já que

$$\langle +|+\rangle = 1,$$
$$\langle -|-\rangle = 1,$$
$$\langle +|-\rangle = 0,$$

podemos construir a representação na base de $\{|+\rangle, |-\rangle\}$. Temos

$$\begin{pmatrix} \langle +|e|+\rangle & \langle +|e|-\rangle \\ \langle -|e|+\rangle & \langle -|e|-\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$
$$\begin{pmatrix} \langle +|t|+\rangle & \langle +|t|-\rangle \\ \langle -|t|+\rangle & \langle -|t|-\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Nesta representação, todos as matrizes do grupo se tornam diagonais. Assim, a representação original fica decomposta em duas representações: uma,

$$e \to 1,$$
$$t \to 1,$$

e outra,

$$e \to 1,$$
$$t \to -1.$$

Ambas representações satisfazem a estrutura de produto do grupo. Obviamente as duas representações são irredutíveis.

Exercise 1 *Proceda o tratamento análogo para o grupo S_3, ou seja, o conjunto de permutações de 3 elementos.*

3. Teorema de Rearranjo

Uma das propriedades importantes de um grupo é a propriedade de rearranjo. O teorema do rearranjo diz:

- Seja G um grupo e $R \in G$. Seja
$$f = f(R)$$
uma função de um elemento do grupo (um número atribuído para cada elemento do grupo, por exemplo). Então, para qualquer f,
$$\sum_{R \in G} f(R) = \sum_{R \in G} f(AR), \quad A \in G. \tag{109}$$
onde a soma se extende sobre todos os elementos do grupo.

O teorema acima significa que a aplicação de um elemento do grupo para todos os elementos do grupo resulta no mesmo conjunto G, ou seja, é apenas um rearranjo dos elementos.

a. Grupo finito Vamos provar primeiramente para o caso de um grupo finito. Escrevemos o número dos elementos do G por n. Sejam

$$R_1, R_2 \in G,$$
$$R_1 \neq R_2. \tag{110}$$

Então, podemos provar que

$$AR_1 \neq AR_2, \quad {}^{\forall}A \in G \tag{111}$$

pois, devido a existência do elemento inverso A^{-1}, se supormos

$$AR_1 = AR_2,$$

então, multiplicando A^{-1} temos

$$A^{-1}AR_1 = A^{-1}AR_2,$$

e

$$R_1 = R_2, \tag{112}$$

o que contradiz a Eq.(110) e, portanto, prova a Eq.(111). Isto quer dizer que, quando os $R\,'s$ varrem todos os elementos do G (n termos), os $AR\,'s$ também varrem n distintos elementos do G. Mas existem apenas n elementos no grupo G. Então, concluímos que os $AR's$ varrem todos os elementos do G, um de cada vez. Assim,

$$\sum_R f(R) = \sum_R f(AR).$$

b. Grupo Contínuo, Densidade dos Elementos No caso de grupo contínuo, devemos definir mais precisamente o que significa a soma sobre os elementos do grupo. Em geral, para um grupo contínuo, podemos introduzir um (conjunto de) parâmetro(s) para especificar os elementos do grupo, como no caso de rotação. Uma rotação R (ou seja, um elemento do grupo de rotação) é especificada com 3 parâmetros, por exemplo, o vetor de rotação $\vec{\omega}$ na Eq.(**??**) ou os ângulos de Euler, α, β e γ. De modo geral, se $\{p_1, p_2, \ldots, p_r\}$ são os parâmetros contínuos do grupo, um elemento R é dado por

$$R = R(p_1, p_2, \ldots, p_r),$$

e a soma sobre os elementos do grupo deve ser uma integral sobre estes parâmetros,

$$\sum_R \to \int dR = \int \prod_i dp_i \; g(p_1, p_2, \ldots, p_r),$$

onde $g(p_1, p_2, \ldots, p_r)$ é a densidade dos elementos do grupo na visinhança do ponto $R(p_1, p_2, \ldots, p_r)$. A função $g(p_1, p_2, \ldots, p_r)$ depende da parametrização do grupo. O teorema de rearranjo fica

$$\int dR \; f(R) = \int dR \; f(AR), \tag{113}$$

ou, em termos dos parâmetros do grupo,

$$\int\prod_i dp_i g\left(p_1,\ldots,p_r\right) f\left(R\left(p_1,\ldots,p_r\right)\right) = \int\prod_i dp_i g\left(p_1,\ldots,p_r\right) f\left(A\left(q_1,\ldots,q_r\right) R\left(p_1,\ldots,p_r\right)\right). \tag{114}$$

A densidade $g(p_1, p_2, \ldots, p_r)$ deve ser escolhida para que valha a Eq.(113). Para encontrar a forma de g, podemos pensar da seguinte forma: o argumento da função f, $R' = A\left(q_1,\ldots,q_r\right) R\left(p_1,\ldots,p_r\right)$,do lado direito da Eq.(114) é um elemento do grupo. Escrevendo

$$R' = R\left(p'_1, p'_2, \ldots, p'_r\right),$$

podemos considerar o produto AR como uma transformação das variáveis,

$$\left(p_1,\ldots,p_r\right) \to \left(p'_1, p'_2, \ldots, p'_r\right),$$

ou seja,

$$\begin{aligned} p'_1 &= p'_1\left(p_1,\ldots,p_r\right), \\ &\vdots \\ p'_r &= p'_r\left(p_1,\ldots,p_r\right). \end{aligned}$$

Introduzindo esta mudança de variáveis no lado direito da Eq.(114) temos,

$$\begin{aligned} &\int\prod_i dp_i g\left(p_1,\ldots,p_r\right) f\left(R'\left(p'_1,\ldots,p'_r\right)\right) \\ &= \int\prod_i dp'_i \frac{\partial\left(p_1,\ldots,p_r\right)}{\partial\left(p'_1,\ldots,p'_r\right)} g\left(p_1,\ldots,p_r\right) f\left(R'\left(p'_1,\ldots,p'_r\right)\right), \end{aligned} \tag{115}$$

onde

$$\frac{\partial\left(p_1,\ldots,p_r\right)}{\partial\left(p'_1,\ldots,p'_r\right)}$$

é a Jacobiana da transformação. Assim, devemos ter

$$\begin{aligned} &\int\prod_i dp_i g\left(p_1,\ldots,p_r\right) f\left(R\left(p_1,\ldots,p_r\right)\right) \\ &= \int\prod_i dp'_i \frac{\partial\left(p_1,\ldots,p_r\right)}{\partial\left(p'_1,\ldots,p'_r\right)} g\left(p_1,\ldots,p_r\right) f\left(R'\left(p'_1,\ldots,p'_r\right)\right). \end{aligned} \tag{116}$$

Para que a Eq.(116) seja uma identidade, devemos escolher

$$\frac{\partial\left(p_1,\ldots,p_r\right)}{\partial\left(p'_1,\ldots,p'_r\right)} g\left(p_1,\ldots,p_r\right) = g\left(p'_1,\ldots,p'_r\right). \tag{117}$$

Uma solução para isto é

$$\begin{aligned} g\left(p_1,\ldots,p_r\right) &= \frac{\partial\left(x_1^0,\ldots,x_r^0\right)}{\partial\left(p_1,\ldots,p_r\right)} \\ &= \left[\frac{\partial\left(p_1,\ldots,p_r\right)}{\partial\left(x_1^0,\ldots,x_r^0\right)}\right]^{-1}, \end{aligned}$$

onde $(x_1^0,\ldots,x_r^0)$ é algum ponto fixo no espaço de parâmetros, que podemos escolher arbitrariamente. Usualmente escolhemos o ponto correspondente ao elemento identidade, I.

No caso do grupo de rotação com parametrização de ângulos de Euler, podemos calcular $g\left(\alpha,\beta,\gamma\right)$ da seguinte forma: já que

$$A\left(\alpha,\beta,\gamma\right) = \begin{pmatrix} -\sin\alpha\sin\gamma+\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma & \cos\gamma\sin\alpha+\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma & -\cos\alpha\sin\beta \\ -\cos\alpha\sin\gamma-\cos\beta\cos\gamma\sin\alpha & \cos\alpha\cos\gamma-\cos\beta\sin\alpha\sin\gamma & \sin\alpha\sin\beta \\ \cos\gamma\sin\beta & \sin\beta\sin\gamma & \cos\beta \end{pmatrix},$$

temos

$$A\left(\alpha+\delta\alpha,\beta+\delta\beta,\gamma+\delta\gamma\right) = A+\frac{\partial A}{\partial\alpha}\delta\alpha+\frac{\partial A}{\partial\beta}\delta\beta+\frac{\partial A}{\partial\gamma}\delta\gamma,$$

onde

$$\frac{\partial A}{\partial\alpha} = \begin{pmatrix} -\cos\alpha\sin\gamma-\cos\beta\cos\gamma\sin\alpha & \cos\alpha\cos\gamma-\cos\beta\sin\alpha\sin\gamma & \sin\alpha\sin\beta \\ \sin\alpha\sin\gamma-\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma & -\cos\gamma\sin\alpha-\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma & \cos\alpha\sin\beta \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\frac{\partial A}{\partial\beta} = \begin{pmatrix} -\cos\alpha\sin\beta\cos\gamma & -\cos\alpha\sin\beta\sin\gamma & -\cos\alpha\cos\beta \\ \sin\beta\cos\gamma\sin\alpha & \sin\beta\sin\alpha\sin\gamma & \sin\alpha\cos\beta \\ \cos\gamma\cos\beta & \cos\beta\sin\gamma & -\sin\beta \end{pmatrix},$$

$$\frac{\partial A}{\partial\beta} = \begin{pmatrix} -\cos\gamma\sin\alpha-\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma & -\sin\alpha\sin\gamma+\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma & 0 \\ -\cos\alpha\cos\gamma+\cos\beta\sin\alpha\sin\gamma & -\cos\alpha\sin\gamma-\cos\beta\cos\gamma\sin\alpha & 0 \\ -\sin\beta\sin\gamma & \cos\gamma\sin\beta & 0 \end{pmatrix}.$$

Por outro lado, seja E o elemento próximo da identidade I e, neste caso, podemos utilizar as coordenadas Cartesianas e escrever[4]

$$E \simeq 1+\begin{pmatrix} 0 & -\delta z & \delta y \\ \delta z & 0 & -\delta x \\ -\delta y & \delta x & 0 \end{pmatrix}$$

onde

$$\begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \\ \delta z \end{pmatrix} \equiv \delta \vec{r}$$

são os parâmetros infinitesimais da rotação. A densidade de rotações neste sistema de coordenadas é proporcional ao inverso do elemento de volume

$$dV = \delta x \delta y \delta z.$$

Consideramos a transformação de variáveis causada pelo elemento do grupo A,

$$A' = A(\alpha, \beta, \gamma) E(\delta x, \delta y, \delta z),$$

que é um elemento do grupo. Portanto, podemos escrever

$$A' = A(\alpha', \beta', \gamma').$$

Sabemos que a variação $(\alpha, \beta, \gamma) \rightarrow (\alpha', \beta', \gamma')$ deve ser infinitesimal. Assim, o elemento do grupo $A(\alpha, \beta, \gamma)$ transforma o elemento $E(\delta x, \delta y, \delta z)$ em

$$A(\alpha + \delta\alpha, \beta + \delta\beta, \gamma + \delta\gamma) = A(\alpha, \beta, \gamma) E(\delta x, \delta y, \delta z),$$

ou seja

$$\frac{\partial A}{\partial \alpha}\delta\alpha + \frac{\partial A}{\partial \beta}\delta\beta + \frac{\partial A}{\partial \gamma}\delta\gamma = A \begin{pmatrix} 0 & -\delta z & \delta y \\ \delta z & 0 & -\delta x \\ -\delta y & \delta x & 0 \end{pmatrix}. \tag{118}$$

Desta equação, podemos obter explicitamente $\delta\alpha$, $\delta\beta$, e $\delta\gamma$ em função de $\delta x, \delta y$ e δz.

Exercise 2 *A Eq.(118) é uma equação matricial* (3×3) *e, portanto, constitui* 9 *equações. No entanto, para obter* $\delta\alpha$*,* $\delta\beta$*, e* $\delta\gamma$ *em função de* $\delta x, \delta y$ *e* δz*, precisaríamos de apenas* 3 *equações. Qual é o papel do resto das equações ?*

Exercise 3 *Definindo*

$$\Sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{119}$$

$$\Sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{120}$$

$$\Sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{121}$$

mostre que

$$\frac{1}{2} Tr \left[\Sigma_x A^T \left(\frac{\partial A}{\partial \alpha} \delta\alpha + \frac{\partial A}{\partial \beta} \delta\beta + \frac{\partial A}{\partial \gamma} \delta\gamma \right) \right] = \delta x, \tag{122}$$

$$\frac{1}{2} Tr \left[\Sigma_y A^T \left(\frac{\partial A}{\partial \alpha} \delta\alpha + \frac{\partial A}{\partial \beta} \delta\beta + \frac{\partial A}{\partial \gamma} \delta\gamma \right) \right] = \delta y, \tag{123}$$

$$\frac{1}{2} Tr \left[\Sigma_z A^T \left(\frac{\partial A}{\partial \alpha} \delta\alpha + \frac{\partial A}{\partial \beta} \delta\beta + \frac{\partial A}{\partial \gamma} \delta\gamma \right) \right] = \delta z. \tag{124}$$

Podemos verificar facilmente que

$$\frac{1}{2} A^T \frac{\partial A}{\partial \alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \cos\beta & -\sin\beta\sin\gamma \\ -\cos\beta & 0 & \cos\gamma\sin\beta \\ \sin\beta\sin\gamma & -\cos\gamma\sin\beta & 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{2} A^T \frac{\partial A}{\partial \beta} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\cos\gamma \\ 0 & 0 & -\sin\gamma \\ \cos\gamma & \sin\gamma & 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{2} A^T \frac{\partial A}{\partial \gamma} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

e temos

$$\begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \\ \delta y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\gamma\sin\beta & -\sin\gamma & 0 \\ \sin\beta\sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ \cos\beta & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\alpha \\ \delta\beta \\ \delta\gamma \end{pmatrix}. \tag{125}$$

Exercise 4 *Deduza a Eq. (125). Usando deste resultado, calcule a densidade de elementos de rotação em coordenadas de ângulos de Euler,*

$$g(\alpha,\beta,\gamma) = \left[\frac{\partial(\alpha,\beta,\gamma)}{\partial(x,y,z)}\right]^{-1}.$$

Do exercício acima, verificamos que a soma sobre todos os elementos do grupo de rotação pode ser escrita em termos de ângulo de Euler como

$$\sum_R f(R) \to \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{\pi} d\beta \sin\beta \int_0^{2\pi} d\gamma\, f(R(\alpha,\beta,\gamma)).$$

B. Teorema de Grande Ortogonalidade

Seja R um elemento de um grupo G. Sejam $A^{(j)}(R)$ e $A^{(k)}(R)$ as matrizes de duas representações irredutíveis do grupo, onde os superscriptos (j) e (k) representam os índices da representação. O teorema de grande ortogonalidade diz

$$\sum_{R\in G} \left\{A^{(j)}(R)\right\}_{mn} \left\{A^{(k)}(R)\right\}^*_{\mu\nu} \propto \delta_{jk}\delta_{m\mu}\delta_{n\nu}. \tag{126}$$

Antes da prova, vamos provar alguns lemas necessários para isto. O primeiro é referido como o Lema de Schur e é bastante importante e utilizado em vários lugares.

1. Lema 1 (Schur)

Numa representação irredutível de um grupo, uma matriz que comuta com todas as outras da representação deve ser proporcional a matriz de identidade, I.

PROVA:

É possível provar que qualquer representação matricial não singular de um grupo pode ser convertida para uma representação unitária através de uma transformação similar. Desta forma, daqui por diante consideramos sempre apenas representações unitárias, exceto explicitamente mencionado o contrário. Ou seja, sempre supomos que as matrizes de representações são unitárias. Agora, já que qualquer matriz M pode ser decomposta como uma soma de duas matrizes hermitianas,

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{2}\left(M + M^\dagger\right) + \frac{i}{2}\frac{1}{i}\left(M - M^\dagger\right) \\ &= H_1 + iH_2, \end{aligned}$$

é suficiente provar este Lema para o caso de uma matriz hermitiana. Seja H uma matriz hermitiana que comuta com qualquer matriz da representação irredutível do grupo:

$$A(R)\,H - HA(R) = 0, \quad {}^{\forall}R \in G. \tag{127}$$

Sendo H a matriz hermitiana, podemos diagonalizá-la. Escrevemos

$$H|i\rangle = \lambda_i|i\rangle, \quad i = 1, .., n$$

onde $|i\rangle$ é autovetor, λ_i é o autovalor e n a dimensão da representação. Tomando os elementos de matriz da Eq.(127) entre dois autoestados $|i\rangle$ e $|j\rangle$ de H, temos

$$\langle i|A(R)\,|j\rangle\,(\lambda_j - \lambda_i) = 0, \; {}^{\forall}R \in G. \tag{128}$$

Esta equação mostra que, se

$$\lambda_j \neq \lambda_i,$$

então necessariamente temos que ter

$$\langle i|A(R)\,|j\rangle = 0, \quad {}^{\forall}R \in G.$$

Isto contradiz a condição de que a representação seja irredutível. Para ver mais claramente, vamos considerar a situação em que

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{n-1},$$

mas λ_n não é igual a outros

$$\lambda_n \neq \lambda_i, \quad i = 1, 2, .., n-1.$$

Então, temos que ter

$$\langle i|A(R)\,|n\rangle = 0, \; i = 1, ..., n-1, \; {}^{\forall}R \in G.$$

Consideramos um vetor geral no espaço da representação,

$$|\psi\rangle = \sum_i C_i|i\rangle.$$

Este vetor se transforma, sob o grupo, como

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle \xrightarrow{R} |\psi\rangle' &= \sum_i C_i A(R)\,|i\rangle \\
&= \sum_i \sum_j C_i|j\rangle\,\langle j|A(R)\,|i\rangle \\
&= \sum_i^{n-1} \sum_j^{n-1} C_i|j\rangle\,\langle j|A(R)\,|i\rangle + C_n|n\rangle\,\langle n|A(R)\,|n\rangle.
\end{aligned}$$

Isto implica que, se decompormos o espaço vetorial da base da representação em dois subespaços,

$$\{|i=1\rangle,\cdots,|i=1\rangle\}\oplus\{|n\rangle\}\,,$$

estes subespaços são subespaços invariantes sob o grupo (não se misturam sob o grupo). Mas isto contradiz a condição de que a representação seja irredutível. Assim,

$$\lambda_n=\lambda_i,\ i=1,..n-1.$$

ou seja, todos autovalores tem que ser idênticos. Assim,

$$\begin{aligned} H &= \lambda\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & & 1 \end{pmatrix} \\ &= \lambda I. \end{aligned}$$

No caso de um grupo contínuo, tal como o grupo de rotação, para valer o lema de Schur, basta a matriz H comutar com todas as matrizes dos *geradores* do grupo. Isto porque, por exemplo, qualquer elemento do grupo de rotação pode ser escrito como

$$A\left(R\right)=e^{-i\vec{\omega}\cdot\vec{L}},$$

e, se uma matriz H comuta com todas as matrizes de $\vec{L}=\{L_x,L_y,L_z\}$,

$$[H,L_i]=0,$$

então

$$[H,A\left(R\right)]=0,\ \ ^{\forall}R\in G.$$

A situação é análoga para qualquer grupo contínuo. Um exemplo do Lema de Schur que já vimos é o módulo quadrado de momento angular, $\vec{J}^2$. Sabemos que

$$\left[\mathbf{L}^2,L_i\right]=0,\ i=x,y,z.$$

Assim, numa representação irredutível, devemos ter

$$\mathbf{L}^2=\lambda\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & & 1 \end{pmatrix}.$$

De fato, vimos que para a representação $L^{(3)}$,

$$\left(\mathbf{L}^{(3)}\right)^2 \rightarrow 3\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Uma outra aplicação importante do Lema de Schur na Mecânica Quântica é que se o Hamiltoniano tem a simetria esférica, isto é,

$$[H, J_i] = 0,\ i = x, y, z$$

então, o autovalor da energia E é uma função de momento angular total j, mas *não depende* dos valores da componente do momento angular, m.

2. Lema 2

Sejam

$$\left\{A^{(1)}(R)\right\},\ \left\{A^{(2)}(R)\right\}$$

duas representações irredutíveis do grupo G com dimensão n_1 e n_2, respectivamente;

$$\dim\left\{A^{(1)}(R)\right\} = n_1,$$
$$\dim\left\{A^{(2)}(R)\right\} = n_2.$$

Se uma matriz M retangular $(n_1 \times n_2)$ satisfaz

$$A^{(1)}(R)\, M = M A^{(2)}(R) \tag{129}$$

para todos os elementos do grupo $R \in G$, então occorem apenas os seguintes casos:

- Para $n_1 \neq n_2$, então,

$$M = 0,$$

- Para $n_1 = n_2$,

  1. ou

$$M = 0,$$

  2. ou as representações $\left\{A^{(1)}(R)\right\}$ e $\left\{A^{(2)}(R)\right\}$ são equivalentes.

PROVA:

Da matriz retangular M, podemos contruir a matriz quadrada $(n_1 \times n_1)$ hermitiana,

$$H = MM^{\dagger}.$$

Da Eq.(129), temos

$$M^{\dagger} A^{(1)} (R)^{\dagger} = A^{(2)} (R)^{\dagger} M^{\dagger},$$

ou, usando a unitariedade das representações, temos

$$M^{\dagger} A^{(1)} \left(R^{-1}\right) = A^{(2)} \left(R^{-1}\right) M^{\dagger}.$$

Multiplicando M do lado esquerdo, temos

$$\begin{aligned} MM^{\dagger} A^{(1)} \left(R^{-1}\right) &= MA^{(2)} \left(R^{-1}\right) M^{\dagger} \\ &= A^{(1)} \left(R^{-1}\right) MM^{\dagger}. \end{aligned}$$

Assim,

$$HA^{(1)} \left(R^{-1}\right) = A^{(1)} \left(R^{-1}\right) H, \quad {}^{\forall} R \in G$$

e, pelo Lema de Schur, temos

$$H = \lambda\, I.$$

Vamos considerar o caso $b)$ $n_1 = n_2$. Neste caso, M é uma matriz quadrada. Assim

$$\det (H) = |\det (M)|^2 = (\lambda)^{n_1}.$$

Se $\lambda \neq 0$, então

$$\det (M) \neq 0,$$

e portanto existe M^{-1}. Assim

$$M^{-1} A^{(1)} (R)\, M = A^{(2)} (R),$$

e as duas representações são equivalentes. Por outro lado, se $\lambda = 0$, então

$$MM^{\dagger} = 0, \tag{130}$$

o que implica em

$$M = 0. \tag{131}$$

Assim, o caso $b)$ ficou provado.

Exercise 5 *Prove a Eq.(131) se vale a Eq.(130).*

Agora vamos considerar o caso a). Sem perder a generalidade, vamos supor $n_1 > n_2$. Podemos introduzir uma matriz quadrada $(n_1 \times n_1)$, acrecentando as linhas que contém elementos zeros à matriz M,

$$N = \begin{array}{c} \\ \uparrow \\ n_1 \\ \downarrow \end{array} \begin{array}{cc} \longleftarrow\ n_2\ \longrightarrow & \longleftarrow\ n_1 - n_2\ \longrightarrow \\ \left(\left(\begin{array}{ccc} & & \\ & M & \\ & & \end{array} \right) \right. & \left. \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \right) \end{array}$$

Podemos ver que

$$NN^\dagger = MM^\dagger \tag{132}$$

e, portanto,

$$NN^\dagger = H,$$

onde H é a mesma matriz anterior para a qual vale o Lema de Schur. Consequentemente, temos

$$NN^\dagger = \lambda\, I.$$

Mas, obviamente,

$$\det\left(NN^\dagger\right) = 0, \tag{133}$$

de onde concluímos que

$$\lambda = 0.$$

Assim, de novo, temos

$$MM^\dagger = 0. \tag{134}$$

Exercise 6 *Prove a Eq.(133).*

Podemos, com isto, provar que

$$M = 0,$$

o que conclui a prova.

3. Prova do Teorema da Grande Ortogonalidade

Tendo provado os dois lemas acima, agora podemos provar o teorema de grande ortogonalidade (126). Primeiramente, vamos considerar duas representações inequivalentes[5]. Vamos introduzir uma matriz

$$H=\sum_{R'}A^{(j)}\left(R'\right)\ X\ A^{(k)}\left(R'^{\,-1}\right),$$

onde X é uma matriz $(n_j\times n_k)$ completamente arbitrária. Independentemente de X, podemos provar que

$$A^{(j)}\left(R\right)H=HA^{(k)}\left(R\right). \tag{135}$$

De fato,

$$\begin{aligned}
A^{(j)}\left(R\right)H&=\sum_{R'}A^{(j)}\left(R\right)A^{(j)}\left(R'\right)\ X\ A^{(k)}\left(R'^{\,-1}\right)\\
&=\sum_{R'}A^{(j)}\left(RR'\right)\ X\ A^{(k)}\left(R'^{\,-1}R^{-1}R\right)\\
&=\sum_{R'}A^{(j)}\left(RR'\right)\ X\ A^{(k)}\left(\left(RR'\right)^{-1}R\right)\\
&=\sum_{R'}A^{(j)}\left(RR'\right)\ X\ A^{(k)}\left(\left(RR'\right)^{-1}\right)A^{(k)}\left(R\right)\\
&=HA^{(k)}\left(R\right),
\end{aligned}$$

onde utilizamos a propriedade da representação

$$A\left(RR'\right)=A\left(R\right)A\left(R'\right)$$

e, da penúltima linha para a última linha, o teorema de rearranjo,

$$\sum_{R'}A^{(j)}\left(RR'\right)\ X\ A^{(k)}\left(\left(RR'\right)^{-1}\right)=\sum_{R'}A^{(j)}\left(R'\right)\ X\ A^{(k)}\left(\left(R'\right)^{-1}\right).$$

Do lema-2 que provamos, a Eq.(135) mostra que

$$H=0,$$

ou seja, em termos de elementos de matriz,

$$H_{m\nu}=\sum_{R'}\sum_{\alpha}\sum_{\beta}\left\{A^{(j)}\left(R'\right)\right\}_{m\alpha}\ X_{\alpha\beta}\ \left\{A^{(k)}\left(R'^{\,-1}\right)\right\}_{\beta\nu}=0,$$

se $j \neq k$. Já que X é arbitrária, podemos escolher,

$$X_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha n}\delta_{\beta\mu},$$

para qualquer n e μ dados. Então,

$$\sum_{R'} \left\{A^{(j)}(R')\right\}_{mn} \left\{A^{(k)}\left(R'^{-1}\right)\right\}_{\mu\nu} = 0$$

para $j \neq k$. Assim, o primeiro fator δ_{jk} da Eq.(126) fica demonstrado.

$$\sum_{R'} \left\{A^{(j)}(R')\right\}_{mn} \left\{A^{(k)}\left(R'^{-1}\right)\right\}_{\mu\nu} \propto \delta_{jk}.$$

Agora vamos considerar que $j = k$. Neste caso,

$$H = \sum_{R'} A^{(j)}(R') \ X \ A^{(j)}\left((R')^{-1}\right)$$

comuta com todas as matrizes da representação,

$$A^{(j)}(R)\, H = H A^{(j)}(R)\,, \ ^{\forall}R \in G,$$

e, pelo Lema de Schur, temos

$$H = \lambda(X) \ I,$$

onde a constante λ depende de X. Novamente escolhendo

$$X_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha n}\delta_{\beta\mu},$$

temos

$$\begin{aligned} H_{m\nu} &= \sum_{R'} \left\{A^{(j)}(R')\right\}_{mn} \left\{A^{(j)}\left(R'^{-1}\right)\right\}_{\mu\nu} \\ &= \lambda_{n\mu}\delta_{m\nu}, \end{aligned}$$

onde explicitamos a dependência de λ em X em termos dos dois índices n e μ. Se calculamos o traço de H, temos

$$\begin{aligned} \lambda_{n\mu} n_j &= \sum_m \sum_{R'} \left\{A^{(j)}(R')\right\}_{mn} \left\{A^{(j)}\left(R'^{-1}\right)\right\}_{\mu m} \\ &= \sum_{R'} \left[\sum_m \left\{A^{(j)}\left(R'^{-1}\right)\right\}_{\mu m} \left\{A^{(j)}(R')\right\}_{mn}\right] \\ &= \sum_{R'} \left[\left\{A^{(j)}\left(R'^{-1}\right) A^{(j)}(R')\right\}\right]_{\mu n} \\ &= \sum_{R'} [1]_{\mu m} = \sum_{R} 1 \ \delta_{\mu n}. \end{aligned}$$

Assim,

$$\sum_{R'}\left\{A^{(j)}\left(R'\right)\right\}_{mn}\ \left\{A^{(j)}\left(R'^{\,-1}\right)\right\}_{\mu\nu}=\frac{1}{n_j}\sum_R 1\ \delta_{m\nu}\delta_{\mu n}.$$

Utilizando a unitariedade da representação, temos

$$\sum_{R'}\left\{A^{(j)}\left(R'\right)\right\}_{mn}\ \left\{A^{(j)}\left(R'\right)\right\}^{*}_{\mu\nu}=\frac{1}{n_j}\sum_R 1\ \delta_{m\mu}\delta_{n\nu}.$$

Aqui, o número

$$\sum_R 1$$

é o número total dos elementos do grupo G no caso de grupos finitos. Para grupos contínuos, deve ser calculado como integral sobre os parâmetros,

$$\begin{aligned}\sum_R 1 &\to \int dR\\ &=\int\cdots\int d^n p\ g\left(p_1,p_2,\ldots,p_n\right).\end{aligned}$$

No caso de grupo de rotação com ângulos de Euler, temos

$$\begin{aligned}\int dR &=\int_0^{2\pi}d\alpha\int_0^{\pi}\sin\beta d\beta\int_0^{2\pi}d\gamma\\ &=8\pi^2.\end{aligned}$$

---

[1] det $\left|A^T A\right|=1$, temos det$|A|^2=1$.

[2] Note que este fórmula vale, mesmo x seja uma matriz. Alias, para uma matriz A, esta equação pode ser vista como a definição de e^A, i.e.,

$$e^A\equiv 1+A+\frac{1}{2!}A^2+\frac{1}{3!}A^3+\cdots.$$

[3] Na verdade,

$$I\cdot A=A\cdot I$$

sai apenas pelo requerimento

$$I\cdot A=A,$$

e vice versa.

[4] Ver a apostila, Mecânica Clássica II.

[5] Existem duas situações em que duas representações são inequivalentes. 1) $j\neq k$, 2) $j=k$, mas não existe transformação similar entre as duas representações.