0.1 Grupo de Permutação e Sua Representação

Aproveitando a discussão sobre a natureza de partículas idênticas, vamos revisar a noção de grupo de permutação e o significado e aplicação das suas representações irredutiveis na mecânica quântica.

0.2

Consideremos um conjunto de operações $g = \{\alpha, \beta, ...\}$ que manter o sistema invariante e esse conjunto forma um *grupo*. Por *grupo,* entendemos primeiramente que está definida uma operação entre quaisquer dois elementos α e β do g, cujo resultado também é elemento do g. Essa operação é chamado produto do grupo e denotamos por $\cdot$. Assim, o conjunto é fechado pelo produto, e expressamos esse fato

$$\exists\ \gamma = \alpha \cdot \beta \in g,\ \forall \alpha, \beta \in g. \tag{1}$$

Para formar um grupo, o produto $\cdot$ e o conjunto g têm que satisfazer as seguintes propriedades.

1. Existência do elemento de identidade $e \in g$, tal que

$$e \cdot \alpha = \alpha \cdot e = \alpha, \quad \forall \alpha \in g, \tag{2}$$

2. Existência do elemento inverso α^{-1} para $\exists \alpha \in g$, tal que

$$\alpha^{-1} \cdot \alpha = \alpha \cdot \alpha^{-1} = e. \tag{3}$$

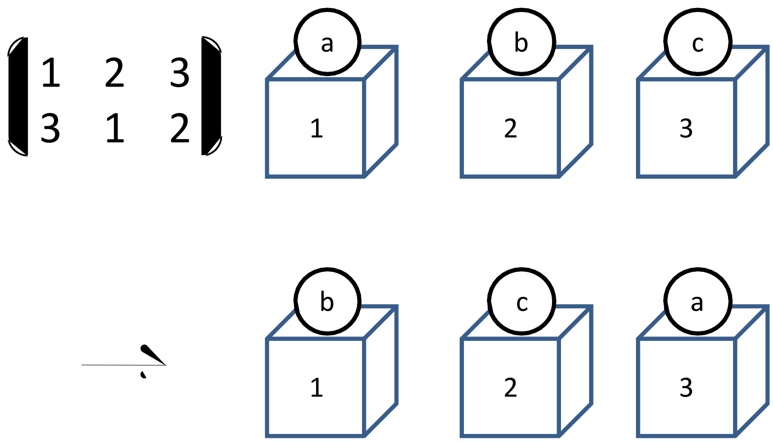
3. Associatividade do produto, ou seja,

$$\alpha \cdot (\beta \cdot \gamma) = (\alpha \cdot \beta) \cdot \gamma. \tag{4}$$

Para um sistema de N partículas, o conjunto de todas as operações de trocar os estados de partículas forma obviamente um grupo, convencionando a operação de não troca nada como o elemento de identidade. Esse grupo é chamado o grupo de permutação de N elementos e denotamos por S_N. Um elemento do grupo S_N é comunmente denotado por

$$P_{i_1 i_2 ..., i_N} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & N \\ i_1 & i_2 & \cdots & i_N \end{pmatrix} \tag{5}$$

indicando que a ordenação $(1, 2, .., N)$ transforma em outra $(i_1, i_2, .., i_N)$. Por exemplo, consideramos N caixas numerados de 1 a N fixos na mesa e colocamos N bolas com cores diferentes. Podemos definir a operação correspondente a $P_{i_1 i_2 ..., i_N}$ como sendo um procedimento para colocar a bola na caixa 1 na caixa i_1, a bola na caixa 2 na caixa i_2, assim por diante. Veja o examplo na figura abaixo no caso de P_{312}. Note que nesta convenção, as caixas não alteram mas permutamos os conteúdos das caixas.



Para a aplicação na mecânica quântica, podemos associar essas operações como trocar os estados de cada partículas no sistema de N partículas. Convencionamos que as caixas acima correspondem à partículas, e os conteúdos os estados que partículas ocupam. Assim, para uma função de onda do sistema de 3 partículas distinguíveis, sendo as partículas $1, 2$ e 3 estão nos estados α, β e γ, respectivamente,

$$\psi\left(\vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2, \vec{\xi}_3\right) = \varphi_\alpha\left(\vec{\xi}_1\right)\varphi_\beta\left(\vec{\xi}_2\right)\varphi_\gamma\left(\vec{\xi}_3\right), \tag{6}$$

a aplicação da operação P_{312} a função de onda do sistema se torna

$$\begin{aligned} \psi'\left(\vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2, \vec{\xi}_3\right) &= P_{312}\psi\left(\vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2, \vec{\xi}_3\right) \\ &= \varphi_\beta\left(\vec{\xi}_1\right)\varphi_\gamma\left(\vec{\xi}_2\right)\varphi_\alpha\left(\vec{\xi}_3\right). \end{aligned} \tag{7}$$

Se as partículas são *distinguíveis* mas *idênticas físicamente* (por exemplo, como na bolas na figura acima, onde as bolas tem mesmas propriedades físicas mas distinguíveis pela, por exemplo, seus cores ou letras impressas), as duas funções de ondas dadas pelas Eqs.(6) e (7) correspondem aos dois estados distintos. Entretanto, se as duas partículas são fisicamente idênticas, a energia do estado da Eq.(6) deve ser idêntica a do estado da Eq.(7). Assim, neste caso, existem 2 estados distintos para um dado valor de energia, ou seja, o nível de energia é degenerado. Entretanto, se as duas partículas são realmente indistinguíveis, não devem existir tais estados distintos quando trocamos os estados entre as partículas.

Vamos formular matematicamente a relação entre a degenerescência do espectro de energia e o grupo de simetria do sistema. Para isto, introduzimos o conceito de representação do grupo. Quando um mapeamento de um grupo para um outro grupo preserva a regra de produto do grupo original, o mapeamento é chamado uma representação. Um exemplo mais simples de representação é a representação trivial. Para um grupo qualquer, a representação trivial é o mapeamento de qualquer elemento do grupo para o número 1. O conjunto formado de um único elemento 1 forma um grupo pela regra normal de produto. Assim, se

$$\forall \alpha \in g, \ \ \alpha \to 1,$$

e

$$\alpha\beta = \gamma,$$

obviamente preserva a regra de multiplicação, pois $1 \times 1 = 1$.

Quando os elementos de grupo representam algum procedimento físico, podemos considerar sempre o conjunto de estados que são afetados pelo esse procedimento do grupo. Por exemplo, vamos considerar o grupo S_2. Esse grupo tem dois elementos apenas, um é a identidade $\widehat{e}$, e outro a permutação de dois números, P_{12} e a regra de produto do grupo é

$$\begin{aligned} \widehat{e} \cdot \widehat{e} &= \widehat{e}, \\ \widehat{e} \cdot P_{12} &= P_{12}, \\ P_{12} \cdot \widehat{e} &= P_{12}, \\ P_{12} \cdot P_{12} &= \widehat{e}. \end{aligned} \tag{8}$$

Podemos considerar as duas configurações possíveis de ordenamento de 2 números, $(1,2)$ e $(2,1)$ e associamos dois vetores ortonormais no espaço vetorial bidimensional, como

$$\begin{aligned} (1,2) &\to \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ (2,1) &\to \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

No caso de S_2, Já que

$$\begin{aligned} \widehat{e} \ (1,2) &= (1,2)\,, \\ \widehat{e} \ (2,1) &= (2,1)\,, \\ P_{12}\,(1,2) &= (2,1)\,, \\ P_{12}\,(2,1) &= (1,2)\,, \end{aligned}$$

podemos associar 2 matrizes que representam as operações acima como

$$\widehat{e} \ \to U\left(\widehat{e}\right) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{9}$$

$$P_{12} \to U\left(P_{12}\right) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{10}$$

de tal forma que

$$
\begin{aligned}
U(\hat{e})\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} &= \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\\
U(\hat{e})\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} &= \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},\\
U(P_{12})\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} &= \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},\\
U(P_{12})\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} &= \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

Note que o mapeamento Eqs.(9) e (10) preserva as regras de produto do grupo S_2, ou seja, a Eq.(8) fica preservada em termos de produtos matriciais,

$$
\begin{aligned}
U(\hat{e})\,U(\hat{e}) &= U(\hat{e}),\\
U(\hat{e})\,U(P_{12}) &= U(P_{12}),\\
U(P_{12})\,U(\hat{e}) &= U(P_{12}),\\
U(P_{12})\,U(P_{12}) &= U(\hat{e}).
\end{aligned}
$$

Assim, o mapeamento, Eqs.(9) e (10) é uma representação do grupo S_2 em termos de matrizes 2×2.

Vamos considerar o grupo S_3, ou seja, o conjunto de todas as permutações de 3 diferentes objetos que estão nas caixas 1, 2 e 3. Para simplicidade, representamos os 3 objetos em termos de 3 números, 1,2 e 3. Denotanos uma determinada configuração dos objetos nas caixas, por exemplo, 3 na caixa 1, 2 na caixa 2, e 1 na caixa 3, por

$$\left[\begin{array}{ccc}3 & 2 & 1\end{array}\right]. \tag{11}$$

Obviamente para S_3, as operações de permutar os objetos nas caixas, podem resultar em 6 configurações possíveis,

$$\left[\begin{array}{ccc}1 & 2 & 3\end{array}\right], \tag{12}$$

$$\left[\begin{array}{ccc}2 & 1 & 3\end{array}\right], \tag{13}$$

$$\left[\begin{array}{ccc}1 & 3 & 2\end{array}\right], \tag{14}$$

$$\left[\begin{array}{ccc}3 & 2 & 1\end{array}\right], \tag{15}$$

$$\left[\begin{array}{ccc}2 & 3 & 1\end{array}\right], \tag{16}$$

$$\left[\begin{array}{ccc}3 & 1 & 2\end{array}\right], \tag{17}$$

Note que essas confugurações acima não são os elementos do grupo, mas os possíveis resultados que um elemento do grupo que causa a partir de uma configuração dada. Por exemplo, se a configuração inicial for $\left[\begin{array}{ccc}1 & 2 & 3\end{array}\right]$, as configurações acima podem ser obtidas pelas operações do grupo S_3 por

$$P_{213}\left[\begin{array}{ccc}1 & 2 & 3\end{array}\right] = \left[\begin{array}{ccc}2 & 1 & 3\end{array}\right], \tag{18}$$

$$P_{132}\left[\begin{array}{ccc}1 & 2 & 3\end{array}\right]=\left[\begin{array}{ccc}1 & 3 & 2\end{array}\right]. \tag{19}$$
$$P_{321}\left[\begin{array}{ccc}1 & 2 & 3\end{array}\right]=\left[\begin{array}{ccc}3 & 2 & 1\end{array}\right], \tag{20}$$
$$P_{312}\left[\begin{array}{ccc}1 & 2 & 3\end{array}\right]=\left[\begin{array}{ccc}2 & 3 & 1\end{array}\right], \tag{21}$$
$$P_{231}\left[\begin{array}{ccc}1 & 2 & 3\end{array}\right]=\left[\begin{array}{ccc}3 & 1 & 2\end{array}\right]. \tag{22}$$

Lembre que a notação $P_{i_1 i_2 i_3}$ indica que mudar o conteúdo da caixa 1 na caixa i_1, da caixa 2 na caixa i_2, e da caixa 3 na caixa i_3.

É obvio que as duas operações sucessivas do grupo S_3 resultam num das 6 configurações acima. Assim, podemos construir a tabela de "multiplicação" do grupo como

$$\begin{array}{ccccccc} & \mathbf{P1} & \mathbf{P2} & \mathbf{P3} & \mathbf{P4} & \mathbf{P5} & \mathbf{P6} \\ \mathbf{P1} & P1 & P2 & P3 & P4 & P5 & P6 \\ \mathbf{P2} & P2 & P1 & P6 & P5 & P4 & P3 \\ \mathbf{P3} & P3 & P5 & P1 & P6 & P2 & P4 \\ \mathbf{P4} & P4 & P6 & P5 & P1 & P3 & P2 \\ \mathbf{P5} & P5 & P3 & P4 & P2 & P6 & P1 \\ \mathbf{P6} & P6 & P4 & P2 & P3 & P1 & P5 \end{array} \tag{23}$$

onde para facilitar visutal, associamos

$$P_{123} \rightarrow P1, \tag{24}$$
$$P_{213} \rightarrow P2, \tag{25}$$
$$P_{132} \rightarrow P3, \tag{26}$$
$$P_{321} \rightarrow P4, \tag{27}$$
$$P_{312} \rightarrow P5, \tag{28}$$
$$P_{231} \rightarrow P6, \tag{29}$$

Na tabela (23), estão indicado os resultados dos produtos dos dois elemento do grupo $i \times j = k$, sendo i na primeira coluna, e j na primeira linha. Por exemplo, da tabela (aqui, ainda para simplificar, omitimos a letra P em $P1, P2, ..etc$).

$$\begin{array}{ccccccc} & 1 & 2 & 3 & \underline{\mathbf{4}} & 5 & 6 \\ 1 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 2 & 1 & 6 & 5 & 4 & 3 \\ \underline{\mathbf{3}} & 3 & 5 & 1 & \underline{\mathbf{6}} & 2 & 4 \\ 4 & 4 & 6 & 5 & 1 & 3 & 2 \\ 5 & 5 & 3 & 4 & 2 & 6 & 1 \\ 6 & 6 & 4 & 2 & 3 & 1 & 5 \end{array} \tag{30}$$

temos

$$P3 \times P4 = P6 \tag{31}$$

indicando

$$P_{132} P_{321} = P_{231} \tag{32}$$

Podemos representar os elementos do grupo S_3 em termos de matrizes. Para isto, consideramos o espaço vetorial de 6 dimensões, associando para cada configuração um vetor base ortonormal,

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \to \vec{\xi}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 2 & 1 & 3 \end{bmatrix} \to \vec{\xi}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 & 3 & 2 \end{bmatrix} \to \vec{\xi}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$
$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \end{bmatrix} \to \vec{\xi}_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 2 & 3 & 1 \end{bmatrix} \to \vec{\xi}_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 \end{bmatrix} \to \vec{\xi}_6 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{33}$$

Podemos considerar o mapeamento acima como o mapeamento um a um do elemento do grupo de N elementos a vetores ortonormais num espaço vetorial de dimensão N.

A regra de produto do grupo é nada mais que uma transformação de um elemento do grupo para um outro elemento. Assim, no espaço vetorial acima construido, podemos associar os elementos do grupo para operadores no espaço, ou seja matrizes. Essa associação constitui uma representação do grupo. No caso do grupo S_3, a representação fica as matrizes de 6×6, e obviamente devemos ter

$$P_{123} \to \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{34}$$

Para construir o resto da representação, podemos seguir o seguinte procedimento. Primeiro, trocar a ordem de linhas na tabela de multipricação, de tal forma que o elemento na tabela 1 fica sempre na posição diagonal. No caso da tabela (23), trocamos a 5^a linha e 6^a linha, tendo,

$$\begin{array}{ccccccc} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 2 & 1 & 6 & 5 & 4 & 3 \\ 3 & 3 & 5 & 1 & 6 & 2 & 4 \\ 4 & 4 & 6 & 5 & 1 & 3 & 2 \\ 5 & 5 & 3 & 4 & 2 & 6 & 1 \\ 6 & 6 & 4 & 2 & 3 & 1 & 5 \end{array} \longrightarrow \begin{array}{ccccccc} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 2 & 1 & 6 & 5 & 4 & 3 \\ 3 & 3 & 5 & 1 & 6 & 2 & 4 \\ 4 & 4 & 6 & 5 & 1 & 3 & 2 \\ 6 & 6 & 4 & 2 & 3 & 1 & 5 \\ 5 & 5 & 3 & 4 & 2 & 6 & 1 \end{array}. \tag{35}$$

Agora, extrai o quadro da parte (6×6) da tabela,

$$\begin{array}{cccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6\\ 2 & 1 & 6 & 5 & 4 & 3\\ 3 & 5 & 1 & 6 & 2 & 4\\ 4 & 6 & 5 & 1 & 3 & 2\\ 6 & 4 & 2 & 3 & 1 & 5\\ 5 & 3 & 4 & 2 & 6 & 1 \end{array}. \tag{36}$$

e construimos um comjonto de matrizes, $\{M_i, i=1,..,6\}$ colocando 1 no elemento da matriz correspondente no local onde aparece i no quadro acima.

$$M_1=\begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&0&0&1 \end{pmatrix},\quad M_2=\begin{pmatrix} 0&1&0&0&0&0\\ 1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&0&0&1\\ 0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0 \end{pmatrix},\quad M_3=\begin{pmatrix} 0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&1\\ 1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&1&0&0\\ 0&1&0&0&0&0 \end{pmatrix},$$
$$M_4=\begin{pmatrix} 0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&0&0&1\\ 1&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0 \end{pmatrix},\quad M_5=\begin{pmatrix} 0&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&1&0&0\\ 0&1&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&1\\ 1&0&0&0&0&0 \end{pmatrix},\ M_6=\begin{pmatrix} 0&0&0&0&0&1\\ 0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0\\ 0&1&0&0&0&0\\ 1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&1&0 \end{pmatrix}. \tag{37}$$

Com isto, vejamos a tabela de multiplicação está representada em termos de matrizes. Por exemplo, temos de fato,

$$M_3M_4=\begin{pmatrix} 0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&1\\ 1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&1&0&0\\ 0&1&0&0&0&0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&0&0&1\\ 1&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0&0&0&0&0&1\\ 0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0\\ 0&1&0&0&0&0\\ 1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&1&0 \end{pmatrix}=M_6,\ etc. \tag{38}$$

Assim, estabelecemos uma representação do grupo S_3 pelas matrizes, $\{M_i, i=1,..,6\}$.

Uma representação como essa, onde exitem correspondência um a um entre os vetores base da representação e os elementos do grupo é chamado "representação fiel". Para um grupo discreto e finito, podemos construir sempre a representação fiel a partir da tabela de multiplicação do grupo. Assim, as matrizes para a representação fiel de um grupo com N elementos é $(N\times N)$.

Por outro lado, podemos construir outras representações com dimensão menor. Por exemplo, vamos considerar o espaço vetorial formado pela base Eq.(33). Embora a representação fiel utliza o espaço todo, se olharmos com cuidado, existem algum subespaços que fica invariante sob à aplicações das matrizes da

Eq.(37). Por exemplo, consideramos o vetor,

$$\vec{e}_S = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Então, obviamente

$$M_1 \vec{e}_S = \vec{e}_S,$$

e para outras matrizes verficamos facilmente que

$$M_i \vec{e}_S = \vec{e}_S, \ i = 1, 2, .., 6.$$

Isto porque, as matrizes $M_i's$ possui sempre apenas um elemento 1 em cada linha.

O resultado acima mostra que o subespaço (unidimensional) formado do vetor $\vec{e}_S$ é não alterado pelas aplicações dos elementos do grupo. O tal espaço é chamado subespaço invariante da representação do grupo.

Podemos ver que exite um outro subespaço invariante na representação fiel para o grupo S_3. Dedinindo

$$\vec{e}_A = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

verificamos facilente que

$$\begin{aligned} M_1 \vec{e}_A &= \vec{e}_A, \\ M_2 \vec{e}_A &= -\vec{e}_A, \\ M_3 \vec{e}_A &= -\vec{e}_A, \\ M_4 \vec{e}_A &= -\vec{e}_A, \\ M_5 \vec{e}_A &= \vec{e}_A, \\ M_6 \vec{e}_A &= \vec{e}_A, \end{aligned}$$

o que mostra que o subespaço formado pelo vetor $\vec{e}_A$ (unidimensional) é novamente invariante sob operações de matrizes $\{M_i, \ i = 1, .., 6\}$. Isto porque, os elementos de $\vec{e}_A$ com sinais negativos correspondem aos elementos do grupo S_3 com sinais de permutação netativa.

Note que os dois vetores, $\vec{e}_S$ e $\vec{e}_A$ são ortogonais.

$$(\vec{e}_A \cdot \vec{e}_S) = 0.$$

Assim, o espaço vetorial original de dimensão 6 fica decomposto com

$$\{6\} = \{1\}_S \oplus \{1\}_A \oplus \{4\}\,. \tag{39}$$

Podemos construir a base do subespaço de dimensão 4 com 4 vetores ortogonais a $\vec{e}_A$ e $\vec{e}_S$. Para isto, temos que achar 4 vetores ortogonais entre si e tambem ortogonal a $\vec{e}_S$ e $\vec{e}_A$.Vamos denotar tais vetores como

$$\vec{e}_i = \begin{pmatrix} a_i \\ b_i \\ c_i \\ d_i \\ e_i \\ f_i \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2, 3, 4.$$

A condi;áo de ortogonalidade com $\vec{e}_S$ fica

$$a_i + b_i + c_i + d_i + e_i + f_i = 0,$$

e com $\vec{e}_A$ fica

$$a_i - b_i - c_i - d_i + e_i + f_i = 0.$$

Com isto, temos dois grupos separados, correspondente aos espaços de sinal de permutação positiva e negativa.

$$\begin{aligned} a_i + e_i + f_i &= 0, \\ b_i + c_i + d_i &= 0. \end{aligned}$$

Uma possible conjunto de 4 soluções linearmente independentes para esse sistema é, por exemplo,

$$\begin{aligned} &a_1 = 1,\ e_1 = -1,\ f_1 = 0, \\ &b_1 = 0,\ c_1 = 0,\ d_1 = 0, \\[1em] &a_2 = 1,\ e_2 = 1,\ f_2 = -2, \\ &b_2 = 0,\ c_2 = 0,\ d_2 = 0, \\[1em] &a_3 = 0,\ e_3 = 0,\ f_3 = 0, \\ &b_3 = 1,\ c_3 = -1,\ d_3 = 0, \\[1em] &a_4 = 0,\ e_4 = 0,\ f_4 = 0, \\ &b_4 = 1,\ c_4 = 1,\ d_4 = -2, \end{aligned}$$

de tal forma que os normalized vetores, $\vec{e}_i$ ficam

$$\vec{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \ \vec{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix}, \ \vec{e}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \ \vec{e}_4 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ -2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Esses vetores formam uma base ortonormal no subespaço $\{4\}$ ortogonal a $\{\vec{e}_S\}$ e $\{\vec{e}_A\}$. É fácil de verificar que a aplicação de qualquer elemento do grupo do S_3 nunca ter componentes dos $\{\vec{e}_S\}$ e $\{\vec{e}_A\}$. Ou seja,

$$\vec{e}_S \cdot M_i \vec{e}_j = 0,$$
$$\vec{e}_A \cdot M_i \vec{e}_j = 0.$$

Por exemplo,

$$M_3\vec{e}_4 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ -2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

que claramente ortogonal a $\{\vec{e}_S\}$ e $\{\vec{e}_A\}$. A razão disto é que numa representação fiel, a aplicaçao de qualquer elemento do grupo resulta em permutação dos elementos do vetor. Também, os componentes no subespaço de um determinado sinal de permutação passa para o subespaço de outra se o sinal do elemento do grupo for negativo, e permanece no mesmo subespaçco se o sinal for positivo.

Podemos calcular os elementos de matrizes,

$$\langle \vec{e}_i | M_\alpha | \vec{e}_j \rangle$$

que constituirá a representação matricial de dimensão 4. Entretanto, em vez desta base, $\{\vec{e}_i,\ i = 1, 2, 3, 4\}$, vamos utilizar uma outra base,

$$\vec{\zeta}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{e}_1 + \vec{e}_3), \quad \vec{\zeta}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{e}_1 - \vec{e}_3),$$
$$\vec{\zeta}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{e}_2 + \vec{e}_4), \quad \vec{\zeta}_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{e}_2 + \vec{e}_4),$$

e construimos matrizes $M_\alpha^{(4)},\ \alpha = 1, ..., 6$, formadas de elementos de matriz $\langle \vec{\zeta}_i | M_\alpha | \vec{\zeta}_j \rangle$. Temos

$$M_1^{(4)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \ M_2^{(4)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \ M_3^{(4)} = \begin{pmatrix} -1/2 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & 1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix},$$

$$M_4^{(4)} = \begin{pmatrix} -1/2 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}, \ M_5^{(4)} = \begin{pmatrix} -1/2 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix},$$

$$M_6^{(4)} = \begin{pmatrix} -1/2 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix}.$$

Observando cuidadosamente na forma matricial acima, percebemos que existe dois subespaços invariantes no subespaço $\{4\}$. Ou seja, se consideramos o subespaço formado apenas $\left\{\vec{\zeta}_1, \vec{\zeta}_4\right\}$, os elementos do grupo ficam mapeados à matrizes (2×2) como

$$P1 \to M_1^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \; P2 \to M_2^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \; P3 \to M_3^{(2)} = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$
$$P4 \to M_4^{(2)} = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}, \; P5 \to M_5^{(2)} = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}, \; P6 \to M_6^{(2)} = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix} \tag{40}$$

Podemos verificar que a regra de multiplicação está preservada. Por exemplo,

$$\begin{aligned} P5 \times P3 &\to \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \to P4 \end{aligned}$$

(veja a tabela (23)). O mapeamento forma a representação do grupo S_3 de dimensão 2,e vamos denotar como $\{2\}$.

O subespaço formado de $\left\{\vec{\zeta}_2, \vec{\zeta}_3\right\}$ também é invariante. Neste espaço, temos o mapeamento,

$$P1 \to \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \; P2 \to \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \; P3 \to \begin{pmatrix} 1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}$$
$$P4 \to \begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}, \; P5 \to \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}, \; P6 \to \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}. \tag{41}$$

o que também constitui uma representação de dimensão 2 que denotamos como $\{2'\}$. Finalmente, a representação inicial (representação fiel) do grupo de dimensão 6 fica decomposto em 4 distintas representações menores, correspondendo a decomposição do o espaço vetorial original de dimensão 6 em espaços vetoriais invariantes sob o grupo, como

$$\{6\} = \{1\}_S \oplus \{1\}_A \oplus \{2\} \oplus \{2'\}. \tag{42}$$

Essa decomposição pode ser feito através de uma transformação unitária que faz a mudança da base da partir da base original para as novas bases em subespaços invariantes,

$$\left\{\vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2, \vec{\xi}_3, \vec{\xi}_4, \vec{\xi}_5, \vec{\xi}_6\right\} \xrightarrow{U} \left\{\vec{e}_S, \vec{e}_A, \vec{\zeta}_1, \vec{\zeta}_4, \vec{\zeta}_2, \vec{\zeta}_3\right\} \tag{43}$$

Com isso, as matrizes da representação original se torna na forma *diagonal em blocos*,

$$UM_iU^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M^{(2)}_{i\ (1,1)} & M^{(2)}_{i\ (1,2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M^{(2)}_{i\ (2,1)} & M^{(2)}_{i\ (2,2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M'^{(2)}_{i\ (1,1)} & M'^{(2)}_{i\ (1,2)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M'^{(2)}_{i\ (2,1)} & M'^{(2)}_{i\ (2,2)} \end{pmatrix}, \quad i = 1, .., 6 \tag{44}$$

onde ϵ representa ± 1, de acordo com o sinal da permutação M_i, e $M^{(2)}_{i\ (\alpha,\beta)}$ é o (α, β)-elemento da matriz da representação em $\{2\}$.

Nos subespaços $\{2\}$ e $\{2'\}$, não existe nenhum subespaço menor. Neste caso, não podemos achar as representações de menor dimensão, e $\{2\}$ e $\{2\prime\}$ são ditas as *representações irredutíveis.*

O procedimento acima esclarece a idéia de como chegar a decomposição completa de representação do grupo S_3, mas no caso de S_n o método se torna impraticável. Por exemplo, o proximo grupo, S_4, temos que trabalhar com o espaço vetorial de dimensão $4! = 24$. As matrizes ficam 24×24. Entretanto, existe uma forma mais poderosa para identificar os subespaços invariantes.

0.3

0.4 Representação Irredutível e Lemma de Schur

Uma representação de grupo é dita *reditível* quando existe um ou mais subespaços invariantes no espaço de representação. Quando não existe nenhum subespaço invariante, a representação é dita *irredutível.* Para de uma representação irredutível de um grupo, existe a seguinte propriedade:

Lemma de Schur: Uma matriz que comutam com todas as matrizes de uma representação irredutível de um grupo é porporcional a matriz identidade.

Prova: Seja $g = \{a, b, ..\}$ o grupo e denotamos a matriz de representação do elemento de grupo, por exemplo a, por $M(a)$. Seja Z um matriz que comutam com todas as M,

$$\forall a \in g, \quad [Z, M(a)] = 0 \tag{45}$$

Já que Z comuta com todas as M, podemos encontrar uma base $\{|i>\}$ que diagonaliza Z e ao mesmo tempo diagonaliza a matriz de um elemento do grupo, digamos a, simultaneamente.

$$M(a)|i\rangle = m_i|i\rangle, \quad Z|i\rangle = z_i|i\rangle \tag{46}$$

onde m_i e z_i são i-esimo autovalor de $M(a)$ e Z, respectivamente. Agora utlizando Eq.(45) temos

$$\forall b \in g, \quad 0 = \langle j|\,[Z, M(b)]\,|i\rangle = (z_i - z_j)\langle j|M(b)|i\rangle \tag{47}$$

Isto é, se $z_i \neq z_j$, $\langle j|M(b)|i\rangle = 0$ para todo b. Isto implicaria que todas as matrizes ficariam na forma de diagonal em blocos como vimos na Eq.(**??**). Mas neste caso, surgem subespaços invariantes sob o grupo, o que contradiz a condição de irredutibilidade da representação. Assim, concluimos que $z_i = z_j$ para todos i e j. Consequentemente Z é uma matriz diagonal com todos elementos diagonais iguais. Ou seja Z é proporcional a matriz identidade.

A Lemma de Schur garante que se encontramos uma representação irredutível de um grupo de transformação que preserva o Hamiltoniano invariante, então qualquer vetor no espaço desta representação tem o mesmo autovalor do Hamiltoniano.

0.5