

FI-144 TEORIA DE GRUPOS

Lista #2

Guillermo Cabrera

Entrega: 15 de abril de 2016
Só entregar os itens destacados com *

1. Grupo de simetria de um potencial

Das operações de simetria $\{C_n, \sigma_v, U_2, \sigma_h\}$, reconheça quais deixam invariante o potencial:

$$V(x, y, z) = a \frac{z}{x^2 + y^2} + b \frac{z^2}{(x^2 - y^2)^2} + c \frac{x^2 y^2}{(x^2 + y^2)^2 z^4},$$

onde (a, b, c) são constantes (com dimensões diferentes). A geometria é a usual, sendo z o eixo da rotação C_n , σ_v um plano de reflexão vertical que contém o eixo z , U_2 uma rotação de 180° com eixo perpendicular ao eixo z , e finalmente σ_h é um plano de reflexão horizontal.

- (a) Determine o máximo valor de n que deixa invariante o potencial. Qual é o grupo de simetria obtido ?
- (b) Determine a estrutura de classes conjugadas do grupo. ■

2. * Representação bidimensional do grupo C_{3V} .

Para o grupo C_{3V} , representamos os geradores pelas matrizes

$$\Gamma(C_3) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad \Gamma(\sigma_V) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Encontre todas as matrizes da representação e verifique que trata-se de uma ‘representação fiel’. Mostre que ela é irredutível. ■

3. * Molécula Triangular

Considere uma molécula triangular (planar), formada por três átomos idênticos nas posições equivalentes $(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3)$, como mostrado na figura anexa:

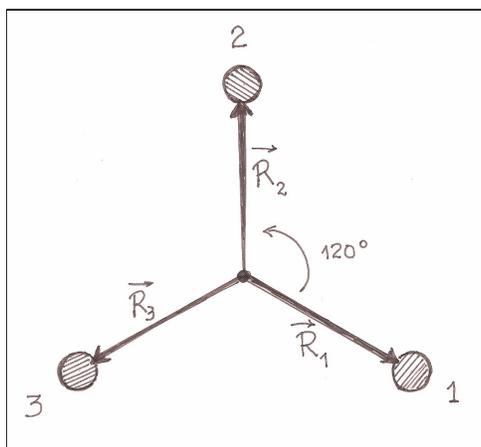


Figure 1:

Considere também um orbital atômico ϕ por átomo, centrado e localizado em torno de cada átomo. Supondo que o orbital tem simetria esférica, escrevemos

$$\psi_i(\vec{x}) \equiv \phi(\vec{x} - \vec{R}_i) = \phi(|\vec{x} - \vec{R}_i|),$$

com $i = 1, 2, 3$. A partir dessas funções, queremos formar estados da molécula que levem em conta a simetria (chamamos informalmente esses estados de *orbitais moleculares*). Note que os orbitais $\{\psi_i(\vec{x})\}$ definidos acima, embora normalizados, não são ortogonais. Supondo os orbitais reais, definimos a integral de *overlap* por:

$$J \equiv \int d^3x \psi_i(\vec{x})\psi_j(\vec{x}),$$

com $i \neq j$. Por simetria, todas as integrais de overlap são idênticas.

- Construa uma representação do grupo C_{3V} com as funções $(\psi_1(\vec{x}), \psi_2(\vec{x}), \psi_3(\vec{x}))$ e mostre que ela é redutível. Encontre sua decomposição em representações irredutíveis do grupo.
- Construa funções base para todas as *RI*'s encontradas acima. Verifique que as funções são ortogonais e normalizadas (bases ortonormais) e forneça uma interpretação física das funções, como estados da molécula. ■

4. * Grupo C_{4V} , grupo do quadrado

Construa a tabela de caracteres de C_{4V} . Lembre que para Representações Irredutíveis (RI) unidimensionais temos:

$$\chi(g_1g_2) = \chi(g_1)\chi(g_2)$$

- (a) Diga de que RI são funções base as coordenadas (x, y, z) e expressões quadráticas das coordenadas.
- (b) Escreva o desenvolvimento mais geral até quarta ordem de um potencial invariante sobre \mathbf{C}_{4V} .
- (c) Que tipo de níveis energéticos terá um sistema cujo grupo de simetria é dado por \mathbf{C}_{4V} ? ■

5. Coeficientes de Clebsch-Gordan para o grupo \mathbf{D}_4

Se o eixo z das coordenadas é orientado ao longo do eixo principal de \mathbf{D}_4 , as funções coordenadas (x, y) transformam segundo a representação bidimensional E de \mathbf{D}_4 . As funções produto

$$(x_1x_2, x_1y_2, y_1x_2, y_1y_2)$$

para as coordenadas de um par de partículas, transformam segundo a representação produto Krönecker ($E \times E$). Encontre a série de Clebsch-Gordan para este produto e por projeção construa as bases das RI's da decomposição. Forneça agora a matriz dos coeficientes de Clebsch-Gordan. ■

6. * Operadores de projeção para \mathbf{D}_4

Considere a representação bidimensional do grupo \mathbf{D}_4 mostrada abaixo:

$$\begin{aligned} \Gamma(E) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & \Gamma(C_4) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \Gamma(C_4^3) &= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & \Gamma(C_2) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ \Gamma(U_2^x) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, & \Gamma(U_2^y) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ \Gamma(U_2^{d_1}) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & \Gamma(U_2^{d_2}) &= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

- (a) Mostre que a representação acima é fiel e irredutível. Identifique, para as matrizes dadas, as classes conjugadas.
- (b) Construa os dois projetores associados com a representação acima e encontre bases de representação com harmônicos esféricos de ordem arbitrária Y_m^l ($-l \leq m \leq l$). Use coordenadas polares esféricas para analisar a ação das transformações do grupo sobre os Y_m^l . Mostre que a projeção é nula se o índice m for par. ■

7. Grupo \mathbf{D}_3

- (a) Determine a representação de \mathbf{D}_3 gerada pela função $F(x, y, z) = x^2zg(r)$, onde z é o eixo principal e $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$ é a distância à origem. Quais as outras funções *parceiras* da representação?

- (b) Mostre que a representação assim construída é redutível, e encontre a sua decomposição em representações irredutíveis do grupo.
- (c) Expresse a função dada $F(x, y, z) = x^2 z g(r)$ como combinação linear de funções que transformam segundo as representações irredutíveis. ■

8. Grupo próprio do Octaedro, \mathbf{O} .

- (a) Mostre que \mathbf{O} pode ser gerado por 3 eixos de ordem 4 mutuamente ortogonais. Chamamos estas rotações como C_4^x , C_4^y e C_4^z respectivamente.
- (b) Enumere todos os subgrupos não triviais de \mathbf{O} e procure os subgrupos invariantes.
- (c) Construa uma representação de \mathbf{O} , usando como base as funções coordenadas (x, y, z) e mostre que a representação é irredutível.
- (d) Construa agora uma representação matricial tridimensional usando como funções de base o conjunto (xy, xz, yz) . Mostre que esta representação é irredutível e **não** é equivalente à anterior. ■

9. Tabela das RI's de um grupo

Usando os resultados da Álgebra do Grupo, junto com as relações de ortogonalidade para os caracteres, obtenha a tabela de caracteres das *Representações Irredutíveis* do grupo estudado na lista anterior (\mathbf{C}_{6V}). Gere os produtos das classes (caracteres de Dirac) nos casos em que seja conveniente, usando a tabela de multiplicação do grupo. Dessa maneira, uma tabela de caracteres pode ser obtida com métodos puramente algébricos, sem conhecer em detalhe as matrizes das representações. ■

- 10. Tomando os produtos de σ_d com rotações, mostre que o eixo principal de \mathbf{D}_{nd} é um eixo de roto-reflexão de ordem $2n$. ■

11. * Representação adjunta

Seja $\Gamma(G)$ uma representação não necessariamente unitária e seja $\bar{\Gamma}(G)$ a representação adjunta. Uma representação geral pode ser decomposta em RI's do grupo, como:

$$\Gamma(g) = \sum_{i \in RI} a_i \Gamma^{(i)},$$

onde o coeficiente a_i é um número inteiro ou zero.

- (a) Mostre que temos a relação:

$$\sum_{\mathcal{C}_\mu} g_{\mathcal{C}_\mu} \chi_\mu \bar{\chi}_\mu = h \sum_{i \in RI} a_i^2,$$

onde h é a ordem do grupo, $g_{\mathcal{C}_\mu}$ é o número de elementos da classe conjugada \mathcal{C}_μ e $\bar{\chi}_\mu$ são os caracteres da representação adjunta.

(b) Sejam agora duas representações Γ e Γ' . Em geral escrevemos:

$$\Gamma(g) = \sum_{i \in RI} a_i \Gamma^{(i)} ,$$

$$\Gamma'(g) = \sum_{j \in RI} b_j \Gamma^{(j)} ,$$

para as decomposições em RI 's. Mostre que temos a relação:

$$\sum_{\mathcal{C}_\mu} g_{\mathcal{C}_\mu} \chi_\mu \bar{\chi}'_\mu = h \sum_{i \in RI} a_i b_i ,$$

onde $\bar{\chi}'_\mu$ é o caractere da representação adjunta de Γ para a classe \mathcal{C}_μ . ■