FI-144 TEORIA DE GRUPOS
Lista #4

Guillermo Cabrera

Entrega: 01 de junho de 2016
Só entregar os itens destacados com *

1. * **Regras de Seleção**

   Determine como se separam os níveis (s, p, d, f) de um átomo sem *spin* quando colocado em campos cristalinos de simetria

   $$\mathbf{D}_{3h}, \quad \mathbf{D}_6, \quad \mathbf{T}_h.$$

   Determine também **todas** as transições permitidas para radiação dipolar elétrica em todos os casos. ■

2. **Redução da simetria para orbitais atômicos**

   Considere os estados com momento angular $l = 2, 3$, para uma partícula na presença de um potencial central (orbitais atômicos de uma partícula). Logo ela é submetida a um campo externo com simetria $\mathcal{D}_4$:

   (a) Descreva a separação (*splitting*) que sofrem os níveis energéticos sem considerar o *spin* da partícula.

   (b) Encontre a parte angular das diferentes funções de onda em primeira ordem de teoria de perturbações para os diferentes níveis separados. Expresse essas funções como combinações lineares dos polinômios harmônicos

   $$\psi^l_m(x, y, z) \ = \ r^l Y^l_m(\theta, \varphi), \quad -l \leq m \leq l.$$

   Dica. Use os operadores de projeção.

   (c) Determine todas as transições permitidas para radiação dipolar elétrica e magnética, primeiro na presença de simetria central e depois com o campo de simetria $\mathcal{D}_4$. Considere separadamente os casos de elementos de matriz diagonais. ■

3. * **Momentos Multipolares e Teorema de Wigner-Eckart**

As componentes irredutíveis de um tensor esférico $T_q^{(k)}$ de ordem k (com $(2k+1)$ componentes) são definidas a partir da lei de transformação

$$O(R)\; T_q^{(k)} O^{\dagger}(R) = \sum_{m=-k}^{k} T_m^{(k)} \Gamma_{mq}^{(k)}(R) \;, \tag{1}$$

onde $\Gamma^{(k)}$ é uma representação irredutível do grupo de rotações e $R \in SO(3)$ é uma rotação arbitrária. Considere apenas o caso de k sendo inteiro.

(a) O momento quadrupolar elétrico $\mathbf{Q}$ é definido como um operador tensorial simétrico de ordem 2 e de traço nulo, como

$$Q_{ij} = x_i x_j - \frac{1}{3}\mathbf{r}^2 \delta_{ij} \;, \tag{2}$$

onde $x_i, x_j = x, y, z$ são as componentes do operador posição e $\mathbf{r}^2 = x^2+y^2+z^2$. Note que $\mathbf{Q}$ tem 5 componentes independentes. A partir de (2), construa tensores esféricos irredutíveis que transformam como harmônicos esféricos.

Hint: Seguindo a receita dada em Sakurai, 'MQM', Cap.3, expresse os harmônicos esféricos em termo das variáveis $(x/r, y/r, z/r)$. Para as funções quadráticas de (2) terá que analisar os harmônicos esféricos Y_m^2.

(b) Queremos agora calcular elementos de matriz de $\mathbf{Q}$ entre estados de momentum angular definido $\{|n; lm\rangle\}$, onde o número quântico n depende da dinâmica (considere o caso de uma partícula sem spin, na presença de um potencial central, onde n rotula a parte radial da função de onda) e l é inteiro. Em coordenadas polares esféricas (r, θ, φ) temos:

$$< r; \theta, \varphi | n; l, m >= \mathbf{F}_n(r) Y_m^l(\theta, \varphi) \;,$$

onde $\mathbf{F}_n(r)$ é a função radial e a parte angular é dada pelo harmônico esférico $Y_m^l(\theta, \varphi)$. Usando o *Teorema de Wigner-Eckart*, formule regras de seleção para os elementos de matriz de $\mathbf{Q}$. Complemente as regras de seleção, considerando a ação do operador *Paridade (Inversão)* e mostre que os elementos de matriz para um mesmo *multipleto* (com $l' = l$) são não nulos em geral.

(c) Calcule todos os elementos de matriz para todas as componentes de $\mathbf{Q}$ para um mesmo multipleto,

$$\left\langle n; lm' \left| T_q^{(k)} \right| n; lm \right\rangle$$

nos caso de $l = 0$ e $l = 1$. Para isso, use a tabela anexa de coeficientes de Clebsch-Gordan, onde os estados produtos estão indicados na coluna da esquerda e os estados de momentum angular total estão na linha de cima. É necessário colocar $\sqrt{}$ em todos os valores dados. Os coeficientes devem ser entendidos como os produtos (bra-c-kets)

$$(\langle j_1 m_1 | \langle j_2 m |) \, | JM \rangle \, .$$

Hint: Avalie explicitamente o elemento de matriz $\left\langle n;10 \left| T_0^{(2)} \right| n;10 \right\rangle$ para o multipleto com $l = 1$ e daí obtenha o elemento reduzido de matriz

$$\left\langle n;1 \right| \left| T^{(2)} \right| \left| n;1 \right\rangle .$$

Indique seus resultados em termos de valores médios sobre a função radial.

(d) Mostre o seguinte Teorema:

"Seja um sistema de momentum angular j . O valor médio (elementos diagonais) do operador momento de multipolo elétrico ou magnético de ordem 2^k ($k = 0$, monopolo; $k = 1$, dipolo; $k = 2$, quadrupolo; etc.) será nulo, a menos que $k \leq 2j$."

Corolários: Uma partícula de spin zero não possui momento de dipolo magnético. Uma partícula de spin 1/2 não possui momento de quadrupolo elétrico. ■

4. **Álgebra de quaternions**

Os *quaternions* são objetos construídos tendo uma parte escalar e outra vetorial, na forma:

$$A \equiv (\alpha_0, \vec{\mathbf{a}}) \ ,$$

onde α_0 é real e $\vec{\mathbf{a}}$ é um vetor em R^3. Escrevemos $\vec{\mathbf{a}}$ em termos de uma base ortonormal $(\hat{\imath}, \hat{\jmath}, \hat{k})$ como:

$$\vec{\mathbf{a}} = \alpha_1 \hat{\imath} + \alpha_2 \hat{\jmath} + \alpha_3 \hat{k} \ .$$

Os quaternions puramente escalares $A \equiv (\alpha_0, \mathbf{0})$ são identificados com R e os puramente vetorias $A \equiv (0, \vec{\mathbf{a}})$ como pertencendo ao espaço linear de R^3. Na álgebra, definimos a soma e o produto de dois quaternions $A \equiv (\alpha_0, \vec{\mathbf{a}})$ e $B \equiv \left(\beta_0, \vec{\mathbf{b}}\right)$, por:

$$\begin{aligned} A + B &\equiv \left(\alpha_0 + \beta_0, \vec{\mathbf{a}} + \vec{\mathbf{b}}\right) \ , \\ AB &\equiv \left(\alpha_0 \beta_0 - \vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}}, \ \alpha_0 \vec{\mathbf{b}} + \beta_0 \vec{\mathbf{a}} + \vec{\mathbf{a}} \times \vec{\mathbf{b}}\right) \ , \end{aligned} \tag{3}$$

onde $\vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}}$ é o produto escalar dos vetores e $\vec{\mathbf{a}} \times \vec{\mathbf{b}}$ é o produto vetorial. Em particular, os vetores da base satisfazem

$$\hat{\imath}^2 = \hat{\jmath}^2 = \hat{k}^2 = -1 \ ,$$

que é a generalização do complexo imaginário puro i da álgebra dos numeros complexos.

Definimos o quaternion conjugado A^* por:

$$A^* \equiv (\alpha_0, -\vec{\mathbf{a}}) \ .$$

Note que o produto $AA^* = A^*A = (\alpha_0^2 + |\vec{\mathbf{a}}|^2, \mathbf{0})$ é um escalar não negativo e define a norma dos quaternions:

$$\|A\| \equiv \sqrt{\alpha_0^2 + |\vec{\mathbf{a}}|^2} \geq 0 \ .$$

Falamos que um quaternion é unitário quando $\|A\| = 1$. Estes quaternions unitários formam um grupo.

(a) A descoberta admirável de Hamilton foi que as rotações tridimensionais são descritas por quaternions unitários. Quando a rotação é parametrizada pelo eixo de rotação $\hat{\mathbf{n}}$ e o ângulo de rotação θ, esse quaternion se escreve na forma (evidentemente unitária):

$$R = \left(\cos\frac{\theta}{2},\ \hat{\mathbf{n}}\sin\frac{\theta}{2}\right) \ . \tag{4}$$

A ação da rotação sobre um vetor arbitrário $\vec{\mathbf{x}}$, se define por:

$$\vec{\mathbf{x}}\,' = R\,\vec{\mathbf{x}}\,R^* \ , \tag{5}$$

onde os vetores são representados por quaternions puramente vetoriais, $\vec{\mathbf{x}} \equiv (0, \vec{\mathbf{x}})$ e $\vec{\mathbf{x}}\,' \equiv (0, \vec{\mathbf{x}}\,')$. Usando a forma de R dada por (4), encontre a forma explícita da transformação (5) e demonstre que efetivamente é uma rotação.

(b) Encontre a lei de composição das rotações, multiplicando dois quaternions unitários da forma $R_1 = \left(\cos\frac{\theta_1}{2},\ \hat{\mathbf{n}}_1\sin\frac{\theta_1}{2}\right)$ e $R_2 = \left(\cos\frac{\theta_2}{2},\ \hat{\mathbf{n}}_2\sin\frac{\theta_2}{2}\right)$, operando primeiro com R_1 e depois com R_2, isto é

$$R_3 = R_2 R_1 \ .$$

Mostre que R_3 também é unitário e encontre seus parâmetros. Mostre também que a composição não é comutativa. ■

31. CLEBSCH-GORDAN COEFFICIENTS, SPHERICAL HARMONICS, AND d FUNCTIONS

Note: A square-root sign is to be understood over *every* coefficient, *e.g.*, for $-8/15$ read $-\sqrt{8/15}$.

Notation:

	J	J	...
	M	M	...
m_1 m_2	Coefficients		
m_1 m_2			
. .			

1/2×1/2

M	m_1 m_2	$J=1$	$J=0$
+1	+1/2 +1/2	1	
0	+1/2 −1/2	1/2	1/2
0	−1/2 +1/2	1/2	−1/2
−1	−1/2 −1/2	1	

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\phi}$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\Big(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\Big)$$

$$Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}$$

$$Y_2^2 = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta\, e^{2i\phi}$$

2×1/2

M	m_1 m_2	$J=5/2$	$J=3/2$
+5/2	+2 1/2	1	
+3/2	+2 −1/2	1/5	4/5
+3/2	+1 +1/2	4/5	−1/5
+1/2	+1 −1/2	2/5	3/5
+1/2	0 +1/2	3/5	−2/5
−1/2	0 −1/2	3/5	2/5
−1/2	−1 +1/2	2/5	−3/5
−3/2	−1 −1/2	4/5	1/5
−3/2	−2 +1/2	1/5	−4/5
−5/2	−2 −1/2	1	

1×1/2

M	m_1 m_2	$J=3/2$	$J=1/2$
+3/2	+1 +1/2	1	
+1/2	+1 −1/2	1/3	2/3
+1/2	0 +1/2	2/3	−1/3
−1/2	0 −1/2	2/3	1/3
−1/2	−1 +1/2	1/3	−2/3
−3/2	−1 −1/2	1	

3/2×1/2

M	m_1 m_2	$J=2$	$J=1$
+2	+3/2 +1/2	1	
+1	+3/2 −1/2	1/4	3/4
+1	+1/2 +1/2	3/4	−1/4
0	+1/2 −1/2	1/2	1/2
0	−1/2 +1/2	1/2	−1/2
−1	−1/2 −1/2	3/4	1/4
−1	−3/2 +1/2	1/4	−3/4
−2	−3/2 −1/2	1	

2×1

M	m_1 m_2	$J=3$	$J=2$	$J=1$
+3	+2 +1	1		
+2	+2 0	1/3	2/3	
+2	+1 +1	2/3	−1/3	
+1	+2 −1	1/15	1/3	3/5
+1	+1 0	8/15	1/6	−3/10
+1	0 +1	6/15	−1/2	1/10
0	+1 −1	1/5	1/2	3/10
0	0 0	3/5	0	−2/5
0	−1 +1	1/5	−1/2	3/10
−1	0 −1	6/15	1/2	1/10
−1	−1 0	8/15	−1/6	−3/10
−1	−2 +1	1/15	−1/3	3/5
−2	−1 −1	2/3	1/3	
−2	−2 0	1/3	−2/3	
−3	−2 −1	1		

3/2×1

M	m_1 m_2	$J=5/2$	$J=3/2$	$J=1/2$
+5/2	+3/2 +1	1		
+3/2	+3/2 0	2/5	3/5	
+3/2	+1/2 +1	3/5	−2/5	
+1/2	+3/2 −1	1/10	2/5	1/2
+1/2	+1/2 0	3/5	1/15	−1/3
+1/2	−1/2 +1	3/10	−8/15	1/6
−1/2	+1/2 −1	3/10	8/15	1/6
−1/2	−1/2 0	3/5	−1/15	−1/3
−1/2	−3/2 +1	1/10	−2/5	1/2
−3/2	−1/2 −1	3/5	2/5	
−3/2	−3/2 0	2/5	−3/5	
−5/2	−3/2 −1	1		

1×1

M	m_1 m_2	$J=2$	$J=1$	$J=0$
+2	+1 +1	1		
+1	+1 0	1/2	1/2	
+1	0 +1	1/2	−1/2	
0	+1 −1	1/6	1/2	1/3
0	0 0	2/3	0	−1/3
0	−1 +1	1/6	−1/2	1/3
−1	0 −1	1/2	1/2	
−1	−1 0	1/2	−1/2	
−2	−1 −1	1		

$$Y_\ell^{-m} = (-1)^m Y_\ell^{m*}$$

$$d^{\,\ell}_{m,0} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}}\, Y_\ell^m\, e^{-im\phi}$$

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 J M\rangle = (-1)^{J-j_1-j_2}\langle j_2 j_1 m_2 m_1 | j_2 j_1 J M\rangle$$

$$d^{\,j}_{m',m} = (-1)^{m-m'} d^{\,j}_{m,m'} = d^{\,j}_{-m,-m'}$$

3/2×3/2

M	m_1 m_2	$J=3$	$J=2$	$J=1$	$J=0$
+3	+3/2 +3/2	1			
+2	+3/2 +1/2	1/2	1/2		
+2	+1/2 +3/2	1/2	−1/2		
+1	+3/2 −1/2	1/5	1/2	3/10	
+1	+1/2 +1/2	3/5	0	−2/5	
+1	−1/2 +3/2	1/5	−1/2	3/10	
0	+3/2 −3/2	1/20	1/4	9/20	1/4
0	+1/2 −1/2	9/20	1/4	−1/20	−1/4
0	−1/2 +1/2	9/20	−1/4	−1/20	1/4
0	−3/2 +3/2	1/20	−1/4	9/20	−1/4
−1	+1/2 −3/2	1/5	1/2	3/10	
−1	−1/2 −1/2	3/5	0	−2/5	
−1	−3/2 +1/2	1/5	−1/2	3/10	
−2	−1/2 −3/2	1/2	1/2		
−2	−3/2 −1/2	1/2	−1/2		
−3	−3/2 −3/2	1			

$$d^{\,1}_{0,0} = \cos\theta \qquad d^{\,1/2}_{1/2,1/2} = \cos\frac{\theta}{2} \qquad d^{\,1}_{1,1} = \frac{1+\cos\theta}{2}$$

$$d^{\,1/2}_{1/2,-1/2} = -\sin\frac{\theta}{2} \qquad d^{\,1}_{1,0} = -\frac{\sin\theta}{\sqrt{2}}$$

$$d^{\,1}_{1,-1} = \frac{1-\cos\theta}{2}$$

2×3/2

M	m_1 m_2	$J=7/2$	$J=5/2$	$J=3/2$	$J=1/2$
+7/2	+2 +3/2	1			
+5/2	+2 +1/2	3/7	4/7		
+5/2	+1 +3/2	4/7	−3/7		
+3/2	+2 −1/2	1/7	16/35	2/5	
+3/2	+1 +1/2	4/7	1/35	−2/5	
+3/2	0 +3/2	2/7	−18/35	1/5	
+1/2	+2 −3/2	1/35	6/35	2/5	2/5
+1/2	+1 −1/2	12/35	5/14	0	−3/10
+1/2	0 1/2	18/35	−3/35	−1/5	1/5
+1/2	−1 3/2	4/35	−27/70	2/5	−1/10
−1/2	+1 −3/2	4/35	27/70	2/5	1/10
−1/2	0 −1/2	18/35	3/35	−1/5	−1/5
−1/2	−1 1/2	12/35	−5/14	0	3/10
−1/2	−2 3/2	1/35	−6/35	2/5	−2/5
−3/2	0 −3/2	2/7	18/35	1/5	
−3/2	−1 −1/2	4/7	−1/35	−2/5	
−3/2	−2 1/2	1/7	−16/35	2/5	
−5/2	−1 −3/2	4/7	3/7		
−5/2	−2 −1/2	3/7	−4/7		
−7/2	−2 −3/2	1			

2×2

M	m_1 m_2	$J=4$	$J=3$	$J=2$	$J=1$	$J=0$
+4	+2 +2	1				
+3	+2 +1	1/2	1/2			
+3	+1 +2	1/2	−1/2			
+2	+2 0	3/14	1/2	2/7		
+2	+1 1	4/7	0	−3/7		
+2	0 2	3/14	−1/2	2/7		
+1	+2 −1	1/14	3/10	3/7	1/5	
+1	+1 0	3/7	1/5	−1/14	−3/10	
+1	0 1	3/7	−1/5	−1/14	3/10	
+1	−1 2	1/14	−3/10	3/7	−1/5	
0	+2 −2	1/70	1/10	2/7	2/5	1/5
0	+1 −1	8/35	2/5	1/14	−1/10	−1/5
0	0 0	18/35	0	−2/7	0	1/5
0	−1 1	8/35	−2/5	1/14	1/10	−1/5
0	−2 2	1/70	−1/10	2/7	−2/5	1/5
−1	+1 −2	1/14	3/10	3/7	1/5	
−1	0 −1	3/7	1/5	−1/14	−3/10	
−1	−1 0	3/7	−1/5	−1/14	3/10	
−1	−2 1	1/14	−3/10	3/7	−1/5	
−2	0 −2	3/14	1/2	2/7		
−2	−1 −1	4/7	0	−3/7		
−2	−2 0	3/14	−1/2	2/7		
−3	−1 −2	1/2	1/2			
−3	−2 −1	1/2	−1/2			
−4	−2 −2	1				

$$d^{\,3/2}_{3/2,3/2} = \frac{1+\cos\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}$$

$$d^{\,3/2}_{3/2,1/2} = -\sqrt{3}\,\frac{1+\cos\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} \qquad d^{\,2}_{2,2} = \Big(\frac{1+\cos\theta}{2}\Big)^2$$

$$d^{\,3/2}_{3/2,-1/2} = \sqrt{3}\,\frac{1-\cos\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2} \qquad d^{\,2}_{2,1} = -\frac{1+\cos\theta}{2}\sin\theta$$

$$d^{\,3/2}_{3/2,-3/2} = -\frac{1-\cos\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} \qquad d^{\,2}_{2,0} = \frac{\sqrt{6}}{4}\sin^2\theta \qquad d^{\,2}_{1,1} = \frac{1+\cos\theta}{2}(2\cos\theta-1)$$

$$d^{\,3/2}_{1/2,1/2} = \frac{3\cos\theta-1}{2}\cos\frac{\theta}{2} \qquad d^{\,2}_{2,-1} = -\frac{1-\cos\theta}{2}\sin\theta \qquad d^{\,2}_{1,0} = -\sqrt{\frac{3}{2}}\sin\theta\cos\theta$$

$$d^{\,3/2}_{1/2,-1/2} = -\frac{3\cos\theta+1}{2}\sin\frac{\theta}{2} \qquad d^{\,2}_{2,-2} = \Big(\frac{1-\cos\theta}{2}\Big)^2 \qquad d^{\,2}_{1,-1} = \frac{1-\cos\theta}{2}(2\cos\theta+1) \qquad d^{\,2}_{0,0} = \Big(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\Big)$$

Figure 31.1: The sign convention is that of Wigner (*Group Theory*, Academic Press, New York, 1959), also used by Condon and Shortley (*The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge Univ. Press, New York, 1953), Rose (*Elementary Theory of Angular Momentum*, Wiley, New York, 1957), and Cohen (*Tables of the Clebsch-Gordan Coefficients*, North American Rockwell Science Center, Thousand Oaks, Calif., 1974). The coefficients here have been calculated using computer programs written independently by Cohen and at LBNL.