SÉRIES E COEFICIENTES DE CLEBSCH-GORDAN

O espaço de rep. do produto Kronecker $\Gamma \times \Gamma'$ de duas rep. é gerado pelas funções produto $\psi_j(\underline{r})\,\phi'_k(\underline{r})$.

Quando o produto Kronecker é de RI de um grupo usaremos uma notação especial

$$\Gamma^{(\nu)} \times \Gamma^{(\mu)} = \sum_{\lambda} (\nu\mu\lambda)\, \Gamma^{(\lambda)}$$

Este desenvolvimento se chama série de <u>Clebsch-Gordan</u>. Como o produto é comutativo os coeficientes $(\nu\mu\lambda)$ são simétricos em relação aos dois primeiros índices:

$$(\nu\mu\lambda) = (\mu\nu\lambda)$$

$$(\nu\mu\lambda) = \frac{1}{h} \sum_{g\in G} \chi^{(\lambda)*}(g)\, \chi^{(\nu\times\mu)}(g) = \frac{1}{h} \sum_{g\in G} \chi^{(\lambda)*}(g)\, \chi^{(\nu)}(g)\, \chi^{(\mu)}(g)$$

<u>Resultado</u>: Se os carateres das RI de um grupo G são reais, então os coeficientes $(\nu\mu\lambda)$ são completamente simétricos em relação aos 3 índices. Em efeito

$$(\nu\mu\lambda) = \frac{1}{h} \sum_{g\in G} \chi^{(\lambda)*}(g)\, \chi^{(\nu)}(g)\, \chi^{(\mu)}(g) = \frac{1}{h} \sum_{g\in G} \chi^{(\lambda)}(g)\, \chi^{(\nu)}(g)\, \chi^{(\mu)}(g)$$

$$= \frac{1}{h} \sum_{g\in G} \chi^{(\nu)}\chi^{(\lambda)}\chi^{(\mu)} = (\nu\lambda\mu) = \frac{1}{h} \sum_{g\in G} \chi^{(\nu)}\chi^{(\mu)}\bar{\chi}^{(\lambda)} = (\nu\mu\lambda)$$

$$= (\mu\nu)$$

$$(\nu\mu\lambda) = (\mu\nu\lambda) = (\nu\lambda\mu) = (\lambda\nu\mu) = \quad (\lambda\mu\nu) = (\mu\lambda\nu)$$

Os coeficientes $(\nu\mu\lambda)$ são numeros inteiros não negativos.

Como construir as funções bases?

Sabemos que o espaço de rep. de $\Gamma^{(\nu)} \times \Gamma^{(\mu)}$ é gerado pelas funções produtos.

Seja $\psi_j^{(\nu)}(\underline{r})$ base da RI $\Gamma^{(\nu)}$, e seja $\phi_k^{(\mu)}(\underline{r})$ base da RI $\Gamma^{(\mu)}$.

Base de $\Gamma^{(\nu)} \times \Gamma^{(\mu)}$ é o conjunto $\psi_j^{(\nu)}(\underline{r})\,\phi_k^{(\mu)}(\underline{r})$. Agora deve ser possível escrever as funções base das RI $\Gamma^{(\lambda)}$ da decomposição de $\Gamma^{(\nu)} \times \Gamma^{(\mu)}$ em termos das funções produtos (combinações lineares convenientes). Se o coef. $(\nu\mu\lambda)$ for maior que 1, significa que a RI $\Gamma^{(\lambda)}$ aparecerá mais de uma vez, e portanto deverá ser possível escrever várias bases de $\Gamma^{(\lambda)}$ em termos dos produtos. Portanto as funções bases das $\Gamma^{(\lambda)}$ deverão levar, além do (λ), um outro índice que distingue as funções bases dos distintos espaços $\Gamma^{(\lambda)}$.

Estas combinações lineares se escrevem como

$$\boxed{\Phi_i^{(\lambda)\,m}(\underline{r}) = \sum_{\substack{j=1,\dots,n_\nu \\ k=1,\dots,n_\mu}} (\nu j, \mu k \,|\, \lambda\ m\, i)\, \psi_j^{(\nu)}(\underline{r})\, \phi_k^{(\mu)}(\underline{r}) \qquad (i=1,2,\dots,n_\lambda)\ \ (m=1,2,\dots,(\nu\mu\lambda))}$$

Os coeficientes do desenvolvimento $(\nu j, \mu k \,|\, \lambda\, \lambda_m\, i)$ são chamados de <u>coeficientes de Clebsch-Gordan</u>. O número total de funções assim formadas tem que ser igual ao número total de funções produtos que é $n_\nu n_\mu$

$$\sum_\lambda (\nu\mu\lambda)\, n_\lambda = n_\nu n_\mu ,$$

de maneira que os coef. de C-G são elementos de uma matriz de $(n_\nu n_\mu \times n_\nu n_\mu)$ que faz a mudança de base $\psi_j^{(\nu)} \phi_k^{(\mu)} \longrightarrow \Phi_i^{(\lambda)\,m}$

Um caso importante das séries de Clebsch-Gordan são aquelas para RI de SO(3).

Seja o produto Kronecker $\Gamma^{(\ell_1)} \times \Gamma^{(\ell_2)}$

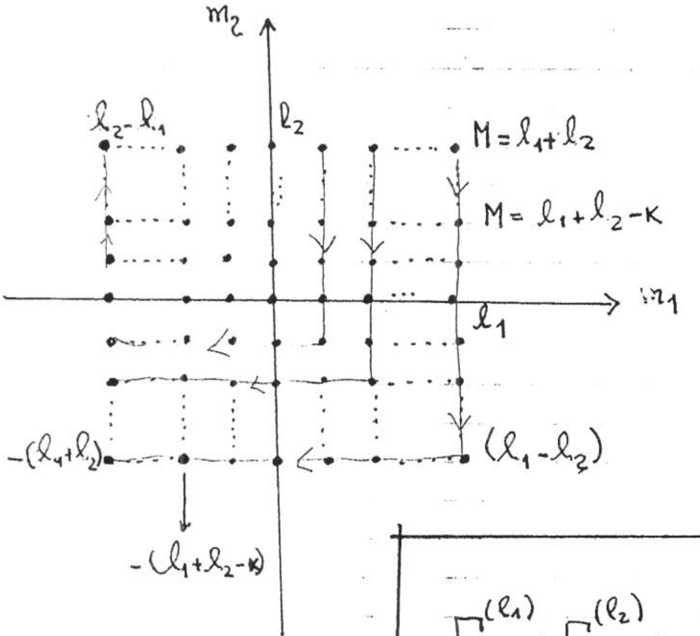
$$\chi^{(\ell)}(\alpha) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} e^{im\alpha}$$

Então

$$\chi^{(\ell_1 \times \ell_2)}(\alpha) = \chi^{(\ell_1)}(\alpha)\,\chi^{(\ell_2)}(\alpha) = \sum_{m_1=-\ell_1}^{\ell_1} e^{im_1\alpha} \sum_{m_2=-\ell_2}^{\ell_2} e^{im_2\alpha}$$

$$= \sum_{m_1=-\ell_1}^{\ell_1} \sum_{m_2=-\ell_2}^{\ell_2} e^{i(m_1+m_2)\alpha} = \sum_{L} \sum_{M=-L} e^{iM\alpha}$$

Mudar agora de variável $\quad M \equiv m_1+m_2$



$$= \sum_{L=|\ell_1-\ell_2|}^{\ell_1+\ell_2} \sum_{M=L}^{L} e^{iM\alpha}$$

$$= \sum_{L=|\ell_1-\ell_2|}^{\ell_1+\ell_2} \chi^{(L)}(\alpha)$$

Daqui obtemos então a decomposição do produto Kronecker

$$\boxed{\Gamma^{(\ell_1)} \times \Gamma^{(\ell_2)} = \sum_{L=|\ell_1-\ell_2|}^{\ell_1+\ell_2} \Gamma^{(L)}}$$

para RI de SO(3)

Exemplo:

$$\Gamma^{(1)} \times \Gamma^{(3)} = \Gamma^{(4)} \oplus \Gamma^{(3)} \oplus \Gamma^{(2)}$$

A fórmula de decomposição para acoplamento do momentum angular pode ser mostrada também assim:

$$\chi_{(\alpha)}^{(\ell_1 \times \ell_2)} = \chi_{\alpha}^{(\ell_1)} \cdot \chi_{\alpha}^{(\ell_2)} = \sum_{m_1=-\ell_1}^{\ell_1} e^{im_1\alpha} \cdot \sum_{m_2=-\ell_2}^{\ell_2} e^{im_2\alpha}$$

$$= \frac{\operatorname{sen}(2\ell_1+1)\alpha/2}{\operatorname{sen}\frac{\alpha}{2}} \cdot \frac{\operatorname{sen}(2\ell_2+1)\alpha/2}{\operatorname{sen}\frac{\alpha}{2}}$$

$$= \frac{\operatorname{sen}(\ell_1+\frac{1}{2})\alpha \cdot \operatorname{sen}(\ell_2+\frac{1}{2})\alpha}{\operatorname{sen}^2\frac{\alpha}{2}}$$

Usamos a identidade trigonométrica:

$$\operatorname{sen} A \operatorname{sen} B = \frac{-\cos(A+B) + \cos(A-B)}{2}$$

$$\chi_{\alpha}^{(\ell_1 \times \ell_2)} = \frac{-\cos(\ell_1+\ell_2+1)\alpha + \cos(\ell_1-\ell_2)\alpha}{2\operatorname{sen}^2\frac{\alpha}{2}}$$

sem perda de generalidade podemos assumir que

$$\ell_1 \geq \ell_2$$

Agora: $\cos(\ell_1+\ell_2+1)\alpha - \cos(\ell_1+\ell_2)\alpha = -2\operatorname{sen}\left[(\ell_1+\ell_2+\frac{1}{2})\alpha\right]\operatorname{sen}\frac{\alpha}{2}$

$$\chi_{\alpha}^{(\ell_1 \times \ell_2)} = \frac{2\operatorname{sen}(\ell_1+\ell_2+\frac{1}{2})\alpha \operatorname{sen}\alpha/2 - \cos(\ell_1+\ell_2)\alpha + \cos(\ell_1-\ell_2)\alpha}{2\operatorname{sen}^2\frac{\alpha}{2}}$$

$$\chi_\alpha^{(\ell_1\times\ell_2)} = \frac{\operatorname{sen}(\ell_1+\ell_2+\frac{1}{2})\alpha}{\operatorname{sen}\frac{\alpha}{2}} + \frac{\operatorname{sen}(\ell_1\alpha)\operatorname{sen}(\ell_2\alpha)}{\operatorname{sen}^2\frac{\alpha}{2}}$$

$$\chi_\alpha^{(\ell_1\times\ell_2)} = \chi_\alpha^{(\ell_1+\ell_2)} + \frac{\operatorname{sen}(\ell_1\alpha)\ \operatorname{sen}(\ell_2\alpha)}{\operatorname{sen}^2\frac{\alpha}{2}}$$

$$= \chi_\alpha^{(\ell_1+\ell_2)} + \chi_\alpha^{(\ell_1-\frac{1}{2})}\chi_\alpha^{(\ell_2-\frac{1}{2})}$$

Operando por indução:

$$\chi_\alpha^{(\ell_1\times\ell_2)} = \chi_\alpha^{(\ell_1+\ell_2)} + \chi_\alpha^{(\ell_1+\ell_2-1)} + \chi_\alpha^{(\ell_1-1)}\chi_\alpha^{(\ell_2-1)}$$

Este processo continua até chegar na representação idêntica $\chi_\alpha^{(0)} = 1$ (depois de $2\ell_2-2$ processos elementares)

Assim, por indução obtemos a decomposição:

$$\chi_\alpha^{(\ell_1\times\ell_2)} = \chi_\alpha^{(\ell_1+\ell_2)} + \chi_\alpha^{(\ell_1+\ell_2-1)} + \cdots + \chi_\alpha^{(\ell_1-\ell_2)}\cdot 1 ,$$

e a fórmula:

$$\chi_\alpha^{(\ell_1\times\ell_2)} = \chi_\alpha^{(\ell_1)}\cdot\chi_\alpha^{(\ell_2)} = \sum_{L=|\ell_1-\ell_2|}^{\ell_1+\ell_2}\chi_\alpha^{(L)}$$

Este resultado pode ser checado verificando as dimensões a ambos lados da decomposição:

$$\Gamma^{(\ell_1)} \times \Gamma^{(\ell_2)} = \sum_{L=|\ell_1-\ell_2|}^{\ell_1+\ell_2} \Gamma^{(L)}$$

$$\dim\left[\Gamma^{(\ell_1)} \times \Gamma^{(\ell_2)}\right] = (2\ell_1+1)(2\ell_2+1)$$

$$\dim\left(\sum_{L=|\ell_1-\ell_2|}^{\ell_1+\ell_2} \Gamma^{(L)}\right) = \sum_{L=|\ell_1-\ell_2|}^{\ell_1+\ell_2} (2L+1) .$$

Assumir outra vez que $\ell_1 \geq \ell_2$

$$\sum_{L=\ell_1-\ell_2}^{\ell_1+\ell_2} (2L+1) = \sum_{L=0}^{\ell_1+\ell_2} (2L+1) - \sum_{L=0}^{\ell_1-\ell_2-1} (2L+1)$$

$$= \cancel{2}\,\frac{(\ell_1+\ell_2)(\ell_1+\ell_2+1)}{\cancel{2}} - \frac{\cancel{2}\,(\ell_1-\ell_2-1)(\ell_1-\ell_2)}{\cancel{2}}$$

$$+\left[\ell_1+\ell_2-(\ell_1-\ell_2)\right]+1$$

$$= (\ell_1+\ell_2)^2+(\ell_1+\ell_2) - (\ell_1-\ell_2)^2 + \cancel{(\ell_1-\ell_2)} + (\ell_1+\ell_2) - \cancel{(\ell_1-\ell_2)} + 1$$

$$= 2\ell_1 \cdot 2\ell_2 + 2(\ell_1+\ell_2) + 1$$

$$= 2\ell_1 \cdot 2\ell_2 + 2\ell_1 + 2\ell_2 + 1 = (2\ell_1+1)(2\ell_2+1)$$

OK!

SISTEMAS ACOPLADOS

Vamos supor que temos inicialmente dois sistemas independentes de coordenadas $\underset{\sim}{r}$ e $\underset{\sim}{\bar{r}}$. Os Hamiltonianos dos sistemas são iguais (tem a mesma forma) e são invariantes frente ao mesmo grupo de simetria G.

Sejam R e $\bar{R}$ a mesma transformação geometrica quando aplicadas no sistema 1 e 2 respetivamente (por extensão chamaremos $\bar{G}$ o grupo de simetria do sistema 2 mesmo quando é o próprio grupo G).

Chamaremos de $\hat{O}_R$ e $\hat{O}_{\bar{R}}$ os correspondentes operadores de Wigner.

Considerando os sistemas separadamente, cada um deles tem os seus níveis de energia classificados segundo as RI de G. Designamos por $\{\psi_j^{(\nu)}\}$ e $\{\bar{\Psi}_j^{(\nu)}\}$ as funções bases respectivas.

Quando os sistemas não estão acoplados (por exemplo quando os sistemas estão "infinitamente" separados) a energia total é a soma das energias dos sistemas separados e o Hamiltoniano é

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)}(\underset{\sim}{r}) + \mathcal{H}^{(2)}(\underset{\sim}{\bar{r}}).$$

$\mathcal{H}$ é invariante frente às operações $O_R O_{\bar{S}}$ de $G \times \bar{G}$, e as autofunções do sistema são as funções produtos

$$\Phi_{jk}^{(\nu\mu)}(r,\bar{r}) \equiv \psi_j^{(\nu)}(\underset{\sim}{r})\,\bar{\phi}_k^{(\mu)}(\underset{\sim}{\bar{r}})$$

$$\mathcal{H}^{(1)}(\underset{\sim}{r})\,\psi_j^{(\nu)}(\underset{\sim}{r}) = E_1^{(\nu)}\psi_j^{(\nu)}(\underset{\sim}{r}) \quad , \quad \mathcal{H}^{(2)}(\underset{\sim}{\bar{r}})\,\bar{\phi}_k^{(\mu)}(\underset{\sim}{\bar{r}}) = E_2^{(\mu)}\bar{\phi}_k^{(\mu)}(\underset{\sim}{\bar{r}})$$

$$\left[\mathcal{H}^{(1)}(\underset{\sim}{r}) + \mathcal{H}^{(2)}(\underset{\sim}{\bar{r}})\right]\psi_j^{(\nu)}(\underset{\sim}{r})\bar{\phi}_k^{(\mu)}(\underset{\sim}{\bar{r}}) = \left[\mathcal{H}^{(1)}(\underset{\sim}{r})\psi_j^{(\nu)}(\underset{\sim}{r})\right]\bar{\phi}_k^{(\mu)}(\underset{\sim}{r}) +$$

$$+ \psi_j^{(\nu)}(\underset{\sim}{r})\left[\mathcal{H}^{(2)}(\underset{\sim}{\bar{r}})\bar{\phi}_k^{(\mu)}(\underset{\sim}{\bar{r}})\right]$$

$$= \left(E_1^{(\nu)} + E_2^{(\mu)}\right)\psi_j^{(\nu)}(\underset{\sim}{r})\bar{\phi}_k^{(\mu)}(\underset{\sim}{\bar{r}})$$

$$\mathcal{H}(\underset{\sim}{r},\underset{\sim}{\bar r})\,\Phi^{(\nu\mu)}_{jk}(\underset{\sim}{r},\underset{\sim}{\bar r}) = \left(E^{(\nu)}_1 + E^{(\mu)}_2\right)\Phi^{(\nu\mu)}_{jk}(\underset{\sim}{r},\underset{\sim}{\bar r})$$

Os operadores $O_R O_{\bar S}$ de $G\times\bar G$ também agem separadamente sobre as funções ~~produtos~~ que formam os produtos

$$O_R O_{\bar S}\quad \psi^{(\nu)}_j(\underset{\sim}{r})\bar\phi^{(\mu)}_k(\underset{\sim}{\bar r}) = \left[O_R\psi^{(\nu)}_j(\underset{\sim}{r})\right]\left[O_{\bar S}\bar\phi^{(\mu)}_k(\underset{\sim}{\bar r})\right]$$

$$= \psi^{(\nu)}_j(R^{-1}\underset{\sim}{r})\,\bar\phi^{(\mu)}_k(\bar S^{-1}\underset{\sim}{\bar r})$$

$$= \sum_i \psi^{(\nu)}_i(\underset{\sim}{r})\Gamma^{(\nu)}_{ij}(R)\sum_m \bar\phi^{(\mu)}_m(\underset{\sim}{\bar r})\bar\Gamma^{(\mu)}_{mk}(\bar S)$$

$$= \sum_{im} \psi^{(\nu)}_i(\underset{\sim}{r})\bar\phi^{(\mu)}_m(\underset{\sim}{\bar r})\left(\Gamma^{(\nu)}_{ij}(R)\bar\Gamma^{(\mu)}_{mk}(\bar S)\right)$$

Imaginemos agora que os sistemas são acoplados mediante um potêncial $V(|\underset{\sim}{r}-\underset{\sim}{\bar r}|)$. Por causa de $|\underset{\sim}{r}-\underset{\sim}{\bar r}|$ uma operação geral $O_R O_{\bar S}$ não deixará o sistema invariante, à menos que

$$R = S\ ,$$

isto é que operemos simultâneamente com a mesma operação nos dois sistêmas. O novo grupo de simetría agora é o conjunto de operações $O_R O_{\bar R}$. Este grupo é evidentemente isomorfo ao próprio grupo G. A introdução do acoplamento reduz a simetria de $G\times\bar G$ para G. Podemos então usar o mesmo formalismo já desenvolvido no caso de potenciais perturbativos. As RI de $G\times\bar G$ em geral serão Rep. Red. de G e os níveis de energía se desdobrarão na presença do acoplamento.

Escolhemos as mesmas matrizes para representar G e $\bar G$, de maneira que

$$\bar{\Gamma}^{(\nu)}_{ij}(\bar{R}) \equiv \Gamma^{(\nu)}_{ij}(R) \qquad , \bar{\Phi}^{(\nu)}_{j}(\bar{\underset{\sim}{r}}) \equiv \bar{\Psi}^{(\nu)}_{j}(\bar{\underset{\sim}{r}})$$

$$O_R O_{\bar{R}} \; \Psi^{(\nu)}_j(\underset{\sim}{r})\bar{\Psi}^{(\mu)}_k(\bar{\underset{\sim}{r}}) = \left[O_R \Psi^{(\nu)}_j(\underset{\sim}{r})\right]\left[O_{\bar{R}} \bar{\Psi}^{(\mu)}_k(\bar{\underset{\sim}{r}})\right]$$

$$= \sum_{im} \Psi^{(\nu)}_i(\underset{\sim}{r})\bar{\Psi}^{(\mu)}_m(\bar{\underset{\sim}{r}}) \left[\Gamma^{(\nu)}_{ij}(R)\,\Gamma^{(\mu)}_{mk}(R)\right]$$

$$= \sum_{im} \Psi^{(\nu)}_i(\underset{\sim}{r})\bar{\Psi}^{(\mu)}_m(\bar{\underset{\sim}{r}}) \;\; \Gamma^{(\nu\times\mu)}_{im,jk}(R)$$

O problema é então reduzir os produtos Kronecker $\Gamma^{(\nu)} \times \Gamma^{(\mu)}$ em RI de G. As funções bases das correspondentes RI podem-se escrever como combinações lineares das funções produtos $\Psi^{(\nu)}_i(\underset{\sim}{r})\bar{\Psi}^{(\mu)}_m(\bar{\underset{\sim}{r}})$ (por exemplo usando os projetores). Este processo permite achar os coeficientes de Clebsch-Gordan.

Exemplo.

Considerar os estados eletrônicos num átomo num campo cristalino. Seja o grupo cristalino C_{3v}.

	C_{3v}	E	$C_3(2)$	$\sigma_v(3)$
$\psi^{(a_1)}_1$	A_1	1	1	1
$\psi^{(a_2)}_1$	A_2	1	1	-1
$[\psi^{(e)}_1, \psi^{(e)}_2]$	E	2	-1	0

Peguemos um eletron no átomo. Se o campo cristalino é forte seus níveis se classificarão como as RI de C_{3v}. Para eletrones individuais chamaremos (a_1, a_2, e) estas RI. Peguemos agora um segundo eletron no átomo e acoplemo-lo com o primeiro (~~agora~~ por enquanto consideramos os eletrons como partículas distinguíveis).

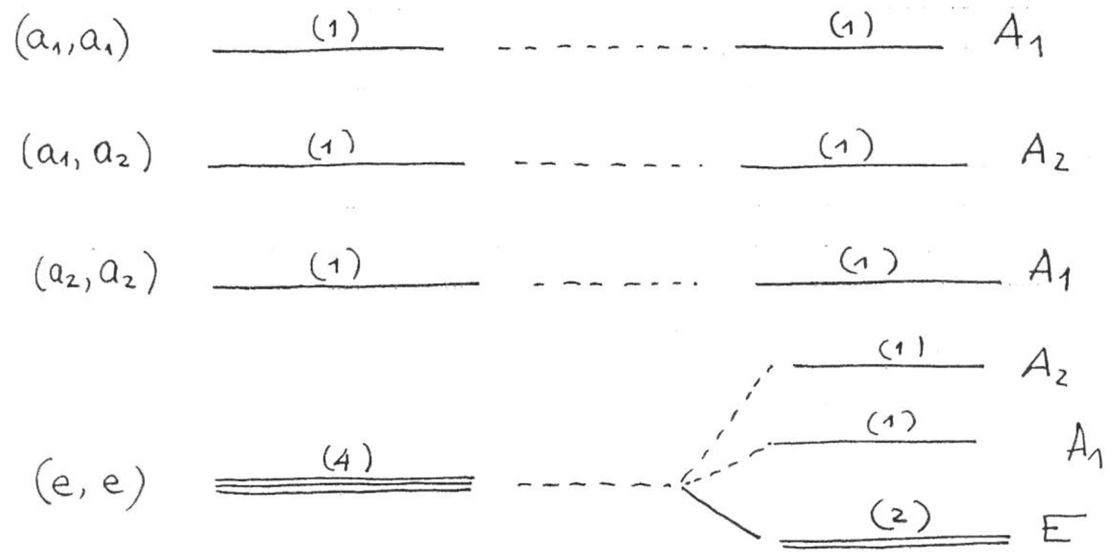
Todos os produtos Kronecker possíveis dão

$$a_1 \times a_1 = A_1, \qquad a_1 \times a_2 = A_2 \quad , \qquad a_2 \times a_2 = A_1$$

$$a_1 \times e = E \ , \qquad a_2 \times e = E$$

$$e \times e = A_1 \oplus A_2 \oplus E$$

Estados sem acoplamento — Com acoplamento



funções bases:

Consideremos o caso $e \times e$

$$\{ \psi_1\bar{\psi}_1 , \psi_1\bar{\psi}_2 , \psi_2\bar{\psi}_1 , \psi_2\bar{\psi}_2 \}$$

C_{3v} :

$$\epsilon = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} , \quad \alpha = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix} , \quad \beta = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}$$

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} , \quad \lambda = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ +\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix} , \quad \mu = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

– Projetemos em A_1

$$P^{(A_1)} = \frac{1}{6}\left[\epsilon + \alpha + \beta + \sigma + \lambda + \mu \right]$$

$$P^{(A_1)}\psi_1\bar{\psi}_1 = \frac{1}{6}\Big[2\psi_1\bar{\psi}_1 + 2\left(-\tfrac{1}{2}\psi_1 + \tfrac{\sqrt{3}}{2}\psi_2\right)\left(-\tfrac{1}{2}\bar{\psi}_1 + \tfrac{\sqrt{3}}{2}\bar{\psi}_2\right) + 2\left(-\tfrac{1}{2}\psi_1 - \tfrac{\sqrt{3}}{2}\psi_2\right)\left(-\tfrac{1}{2}\bar{\psi}_1 - \tfrac{\sqrt{3}}{2}\bar{\psi}_2\right)$$
$$+ \cancel{\psi_1\bar{\psi}_1} + \cancel{(-\tfrac{1}{2}\ldots)(\ldots)} + \cancel{(\ )(\ )} \Big]$$

$$= \frac{1}{3}\left[\psi_1\bar{\psi}_1 + \frac{1}{4}\psi_1\bar{\psi}_1 + \frac{3}{4}\psi_2\bar{\psi}_2 + \frac{1}{4}\psi_1\bar{\psi}_1 + \frac{3}{4}\psi_2\bar{\psi}_2\right]$$

$$= \frac{1}{3}\left[\frac{3}{2}(\psi_1\bar{\psi}_1 + \psi_2\bar{\psi}_2)\right] = \frac{1}{2}(\psi_1\bar{\psi}_1 + \psi_2\bar{\psi}_2)$$

Base de A_1: $\quad \Phi_1^{(A_1)} = \frac{1}{2}(\psi_1\bar{\psi}_1 + \psi_2\bar{\psi}_2)\cdot C$

C é uma constante de normalização

$$\langle \Phi_1^{(A_1)}, \Phi_1^{(A_1)} \rangle = |C|^2 \cdot \frac{1}{4}\left[\langle\psi_1,\psi_1\rangle\langle\bar{\psi}_1,\bar{\psi}_1\rangle + \langle\psi_2,\psi_2\rangle\langle\bar{\psi}_2,\bar{\psi}_2\rangle\right]$$

$$= |C|^2 \cdot \frac{1}{4}\cdot 2 = \frac{1}{2}|C|^2 = 1 \Rightarrow |C| = \sqrt{2}.$$

função normalizada:

$$\boxed{\Phi_1^{(A_1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1\bar{\psi}_1 + \psi_2\bar{\psi}_2)}$$

coeficientes de Clebsch-Gordan

$$(e1, e1 \mid A_1\, 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad , \quad (e2, e2 \mid A_1\, 1) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$(e1, e2 \mid A_1\, 1) = (e2, e1 \mid A_1\, 1) = 0$$

– Projetemos em A_2:

$$\mathcal{P}^{(A_2)} = \frac{1}{6}\left[\epsilon + \alpha + \beta - \sigma - \lambda - \mu\right]$$

$$\mathcal{P}^{(A_2)}\psi_1\bar{\psi}_1 = \frac{1}{6}\left[\;\cdots\;\right]\psi_1\bar{\psi}_1 = 0$$

mesma coisa para $\psi_2\bar{\psi}_2$: $\mathcal{P}^{(A_1)}\psi_2\bar{\psi}_2 = 0$

Tentar com as outras funções bases:

$$\mathcal{P}^{(A_2)}\psi_1\bar{\psi}_2 = \frac{1}{6}\Big[\psi_1\bar{\psi}_2 + \left(-\tfrac{1}{2}\psi_1 + \tfrac{\sqrt{3}}{2}\psi_2\right)\left(-\tfrac{\sqrt{3}}{2}\bar{\psi}_1 - \tfrac{1}{2}\bar{\psi}_2\right) + \left(-\tfrac{1}{2}\psi_1 - \tfrac{\sqrt{3}}{2}\psi_2\right)\left(\tfrac{\sqrt{3}}{2}\bar{\psi}_1 - \tfrac{1}{2}\bar{\psi}_2\right) +$$
$$+ \psi_1\bar{\psi}_2 + (-)\left(-\tfrac{1}{2}\psi_1 + \tfrac{\sqrt{3}}{2}\psi_2\right)\left(-\tfrac{\sqrt{3}}{2}\bar{\psi}_1 + \tfrac{1}{2}\bar{\psi}_2\right) + \left(+\tfrac{1}{2}\psi_1 + \tfrac{\sqrt{3}}{2}\psi_2\right)\left(\tfrac{\sqrt{3}}{2}\bar{\psi}_1 + \tfrac{1}{2}\bar{\psi}_2\right)\Big]$$

$$\wp^{(A_2)}\psi_1\bar\psi_2 = \frac{1}{6}\left[2\psi_1\bar\psi_2 + 2\left(-\tfrac{1}{2}\psi_1 + \tfrac{\sqrt3}{2}\psi_2\right)\left(-\tfrac{\sqrt3}{2}\bar\psi_1 - \tfrac{1}{2}\bar\psi_2\right) + 2\left(-\tfrac{1}{2}\psi_1 - \tfrac{\sqrt3}{2}\psi_2\right)\left(\tfrac{\sqrt3}{2}\bar\psi_1 - \tfrac{1}{2}\bar\psi_2\right)\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left(\psi_1\bar\psi_2 - \psi_2\bar\psi_1\right)$$

Normalizando obtemos:

$$\boxed{\Phi_1^{(A_2)} = \frac{1}{\sqrt2}\left(\psi_1\bar\psi_2 - \psi_2\bar\psi_1\right)}$$

Coeficientes de Clebsch-Gordan:

$$(e1, e1 \mid A_2\ 1) = (e2, e2 \mid A_2\ 1) = 0$$

$$(e1, e2 \mid A_2\ 1) = -(e2, e1 \mid A_2\ 1) = \frac{1}{\sqrt2}$$

– Projetar sobre E:

$$\wp_1^{(E)} = \frac{1}{3}\left[\epsilon - \tfrac{1}{2}\alpha - \tfrac{1}{2}\beta + \sigma - \tfrac{1}{2}\lambda - \tfrac{1}{2}\mu\right]$$

$$\wp_1^{(E)} = \frac{1}{3}\left[2\psi_1\bar\psi_1 - \left(-\tfrac{1}{2}\psi_1 + \tfrac{\sqrt3}{2}\psi_2\right)\left(-\tfrac{1}{2}\bar\psi_1 + \tfrac{\sqrt3}{2}\bar\psi_2\right) - \left(\tfrac{1}{2}\psi_1 + \tfrac{\sqrt3}{2}\psi_2\right)\left(\tfrac{1}{2}\bar\psi_1 + \tfrac{\sqrt3}{2}\bar\psi_2\right)\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left(\psi_1\bar\psi_1 - \psi_2\bar\psi_2\right)$$

Normalizando obtemos

$$\boxed{\Phi_1^{(E)} = \frac{1}{\sqrt2}\left(\psi_1\bar\psi_1 - \psi_2\bar\psi_2\right)}$$

Achamos a outra função por ortogonalidade

	$\psi_1\bar\psi_1$	$\psi_2\bar\psi_2$	$\psi_1\bar\psi_2$	$\psi_2\bar\psi_1$
A_1	$\frac{1}{\sqrt2}$	$\frac{1}{\sqrt2}$	0	0
A_2	0	0	$\frac{1}{\sqrt2}$	$-\frac{1}{\sqrt2}$
E	$\frac{1}{\sqrt2}$	$-\frac{1}{\sqrt2}$	0	0
	0	0	$\frac{1}{\sqrt2}$	$\frac{1}{\sqrt2}$

A matriz de 4x4 da-nos os coeficientes de Clebsch-Gordan

$$\boxed{\Phi_2^{(E)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1\bar{\psi}_2 + \psi_2\bar{\psi}_1\right)}$$

§ Relações de Ortogonalidade para as representações de SO(3)

Precisamos generalizar para o caso contínuo as relações de ortogonalidade para os caracteres. Certamente, a soma sobre os elementos do grupo deverá ser substituída por uma integração no espaço dos parâmetros do grupo. No caso de um grupo finito temos:

$$\sum_{g \in G} \chi^{(i)*}_{(g)} \chi^{(j)}_{(g)} = h\, \delta_{ij}$$

No caso de SO(3), os caracteres só dependem do ângulo de rotação (seja este α). Teremos que introduzir uma medida para:

$$\frac{1}{h} \sum_{g \in G} \chi^{(i)*}_{(g)} \chi^{(j)}_{(g)} = \delta_{ij} \longrightarrow \frac{1}{\Omega_g} \int d\tau_R \, \times$$

$$\times\, \chi^{(\ell_1)*}_{(R)} \chi^{(\ell_2)}_{(R)} \stackrel{?}{=} \delta_{\ell_1 \ell_2}$$

O fator Ω_g é chamado de 'volume do grupo' e é dado por

$$\sum_{g \in G} = h \longrightarrow \Omega_g = \int d\tau_R$$

[Espaço dos parâmetros]

Escolhemos a medida da seguinte maneira:

$$d\tau_R = \alpha^2 \rho(\alpha) d\alpha \left(\operatorname{sen}\theta \, d\theta \, d\varphi \right) ,$$

$$= \alpha^2 \rho(\alpha) d\alpha \, d\Omega$$

onde o grupo é parametrizado com a direção do eixo ($\operatorname{sen}\theta\cos\varphi, \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\varphi, \cos\theta$), que barre o ângulo sólido completo (4π), e o ângulo de rotação α, que varia no intervalo $[0, \pi]$. O espaço dos parâmetros é representado por uma esfera de raio π. Uma rotação é representada por um vetor dentro da esfera, onde o módulo do vetor é o ângulo α de rotação. A direção do vetor fornece o eixo de rotação. Calculamos o volume do grupo:

$$\Omega_g = \int_0^{\pi} \alpha^2 d\alpha \rho(\alpha) \int_{4\pi} d\Omega = 4\pi \int_0^{\pi} \alpha^2 d\alpha \rho(\alpha)$$

onde temos introduzido uma função peso $\rho(\alpha)$. Ela satisfaz:

i) $\rho(\alpha) \geq 0$;

ii) deve pesar da mesma forma a vizinhança de π e $-\pi$ (esses pontos são identificados, representando a mesma rotação)

Para SO(3), os caraterēs <u>não</u> dependem da direção do eixo. A rotação inversa é conjugada com uma rotação dada:

$$\chi^{(\ell)}(-\alpha) = \chi^{(\ell)}(\alpha)$$

Para os caraterēs devemos ter:

$$\int_0^{\pi} \alpha^2 d\alpha \rho(\alpha) \int d\Omega \, \chi^{(\ell_1)*}(\alpha) \chi^{(\ell_2)}(\alpha) \stackrel{?}{=} \Omega_g \delta_{\ell_1 \ell_2}$$

$$= 4\pi \int_0^{\pi} \alpha^2 \rho(\alpha) d\alpha \, \chi^{(\ell_1)*}(\alpha) \, \chi^{(\ell_2)}(\alpha) = \Omega_g \, \delta_{\ell_1 \ell_2} .$$

Para SO(3) temos fórmulas explícitas:

$$\chi^{(\ell_1)*}(\alpha) \, \chi^{(\ell_2)}(\alpha) = \frac{\operatorname{sen}(2\ell_1+1)\alpha/2 \cdot \operatorname{sen}(2\ell_2+1)\alpha/2}{\operatorname{sen}^2 \alpha/2}$$

$$= \left\{ \frac{1}{2} \cos(\ell_1-\ell_2)\alpha - \frac{1}{2} \cos(\ell_1+\ell_2+1)\alpha \right\} / \operatorname{sen}^2 \alpha/2$$

Na seção anterior, mostramos que a função densidade $\rho(\alpha)$, deve ser escolhida como:

$$\rho(\alpha) = \frac{\operatorname{sen}^2(\alpha/2)}{(\alpha/2)^2} = \frac{2(1-\cos\alpha)}{\alpha^2} .$$

Esta escolha é motivada por:

(i) a medida $d\tau_R = d\alpha \, \rho(\alpha)$ assim proposta, pesa da mesma forma toda vizinhança infinitesimal na variedade do grupo. Em particular, pesa da mesma maneira π e $-\pi$;

ii) $\rho(\alpha) \geq 0$;

iii) está normalizada em $\rho(0) = 1$;

iv) $\int_0^{\pi} \alpha^2 d\alpha \, \rho(\alpha) = 2 \int_0^{\pi} d\alpha \, (1-\cos\alpha) = 2\pi$, é

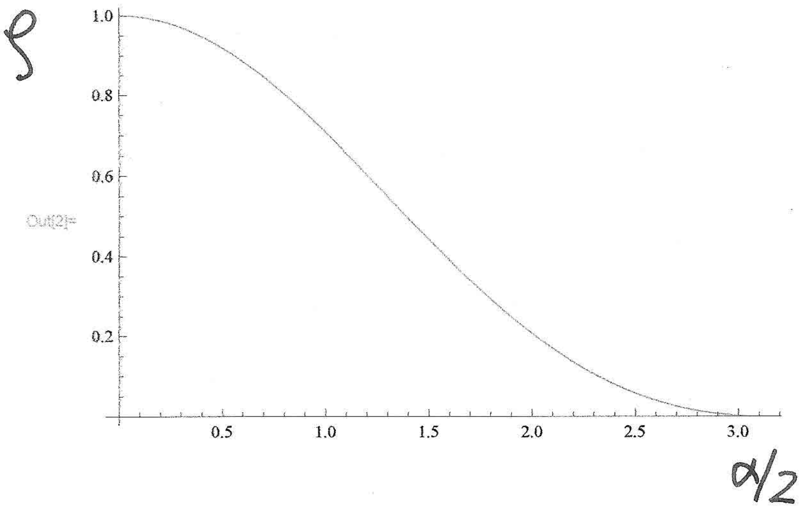
o volume do ângulo de rotação. Para o volume do grupo, temos: $\Omega_g = 4\pi \cdot 2\pi = 8\pi^2$

In[1]:= `f[x_] = Sin[x]^2 / x^2` $= \rho$

Out[1]= $\frac{\text{Sin}[x]^2}{x^2}$

In[2]:= `Plot[f[x], {x, 0., π}]`

Out[2]=



$$= 4\pi \int_0^{\pi} d\alpha\, \alpha^2 \rho(\alpha)\, \chi^{(\ell_1)*}(\alpha)\, \chi^{(\ell_2)}(\alpha) =$$

$$= 8\pi \int_0^{\pi} d\alpha \left\{ \cos[(\ell_1-\ell_2)\alpha] - \cos[(\ell_1+\ell_2+1)\alpha] \right\}$$

$$= 8\pi \left\{ \frac{\operatorname{sen}(\ell_1-\ell_2)\alpha}{\ell_1-\ell_2}\Bigg|_0^{\pi} - \underbrace{\frac{\operatorname{sen}[(\ell_1+\ell_2+1)\alpha]}{\ell_1+\ell_2+1}\Bigg|_0^{\pi}}_{0} \right\}$$

$$= 8\pi \cdot \pi\, \delta_{\ell_1\ell_2} = 8\pi^2\, \delta_{\ell_1\ell_2} = \Omega_g\, \delta_{\ell_1\ell_2}.$$

ou

$$\int d\tau_R\, \chi^{(\ell_1)*}(\alpha)\, \chi^{(\ell_2)}(\alpha) = \Omega_g\, \delta_{\ell_1\ell_2} \quad ,$$

que é a generalização da relação:

$$\sum_{R\in G} \chi^{(i)*}(R)\, \chi^{(j)}(R) = \sum_{\ell_\mu} g_{\ell_\mu}\, \chi_\mu^{(i)*}\, \chi_\mu^{(j)} = h\, \delta_{ij} \, ,$$

com os análogos:

$$g_{\ell_\mu} \longrightarrow \int d\Omega = 4\pi \, ,$$

$$h \longrightarrow \Omega_g = \int \alpha^2 d\alpha\, \rho(\alpha) \int d\Omega = \int d\tau_R = 8\pi^2$$

$$\sum_{\ell_\mu} \longrightarrow \int_0^{\pi} \alpha^2 \rho(\alpha)\, d\alpha \, .$$

A relação de ortogonalidade geral pode ser escrita como:

$$\boxed{\int d\tau_R\, \Gamma^{(\ell_1)*}_{m_1' m_1}(R)\, \Gamma^{(\ell_2)}_{m_2' m_2}(R) = \frac{\Omega_g}{2\ell_1+1}\, \delta_{\ell_1\ell_2}\, \delta_{m_1' m_2'}\, \delta_{m_1 m_2}} \quad (2)$$

onde a rotação R é parametrizada por $R(\hat{n},\alpha)$, com $\hat{n}$ dando a direção do eixo. De fato, traçando a relação (2) obtemos (1), notando que os caracteres não dependem da direção do eixo de rotação. Temos demonstrado assim, que existe uma função peso $\rho(\alpha)$, que permite a generalização das relações de ortogonalidade para o grupo contínuo SO(3).

Teorema de Ortogonalidade para as funções base

Queremos calcular o produto escalar $\langle \psi^{(\ell_1)}_{m_1}, \phi^{(\ell_2)}_{m_2} \rangle$, onde as funções $\{\psi\}$ e $\{\phi\}$ transformam como as RI's $\Gamma^{(\ell_1)}$ e $\Gamma^{(\ell_2)}$, respectivamente. Repetimos a demonstração de grupos finitos:

$$\langle \psi^{(\ell_1)}_{m_1}, \phi^{(\ell_2)}_{m_2} \rangle = \langle \hat{O}_R \psi^{(\ell_1)}_{m_1}, \hat{O}_R \phi^{(\ell_2)}_{m_2} \rangle =$$

$$= \frac{1}{\Omega_g} \int d\tau_R \langle \hat{O}_R \psi^{(\ell_1)}_{m_1}, \hat{O}_R \phi^{(\ell_2)}_{m_2} \rangle$$

$$= \sum_{m_1', m_2'} \langle \psi^{(\ell_1)}_{m_1'}, \phi^{(\ell_2)}_{m_2'} \rangle \frac{1}{\Omega_g} \int d\tau_R\, \Gamma^{(\ell_1)*}_{m_1' m_1}(R)\, \Gamma^{(\ell_2)}_{m_2' m_2}(R)$$

agora usamos a relação de ortogonalidade (2).

$$= \sum_{m_1', m_2'} \langle \psi^{(\ell_1)}_{m_1'}, \phi^{(\ell_2)}_{m_2'} \rangle \; \frac{\delta_{\ell_1 \ell_2}}{2\ell_1+1} \delta_{m_1' m_2'} \delta_{m_1 m_2}$$

$$= \delta_{\ell_1\ell_2} \delta_{m_1 m_2} \left(\frac{1}{2\ell_1+1} \sum_{m} \langle \psi^{(\ell_1)}_{m}, \phi^{(\ell_2)}_{m} \rangle \right)$$

$$= \delta_{\ell_1\ell_2} \delta_{m_1 m_2} \left(\frac{1}{2\ell_1+1} \sum_{m} \langle \psi^{(\ell_1)}_{m}, \phi^{(\ell_1)}_{m} \rangle \right),$$

portanto as funções são ortogonais, mas quando $\ell_1 = \ell_2$; $m_1 = m_2$, o produto escalar não depende do número magnético m . Este teorema é a base da demonstração do Teorema de Wigner-Eckart para SO(3).

A partir de um operador arbitrário, sempre podemos construir uma família $\{\hat{T}_\alpha\}$ que transforma segundo uma representação do grupo. Esta representação pode ser sempre reduzida em RI's do grupo. Para o teorema de W-E, trabalhamos com essas componentes irredutíveis. Usamos as seguintes definições (ver abaixo). Sejam $\{\Gamma^{(\ell)}\}$ as RI's de SO(3) construídas com os harmônicos esféricos.

▸ **Def.** Componentes irredutíveis de um tensor esférico de ordem ℓ , $\{\hat{T}^{(\ell)}_m\}$

São 'objetos' que transformam por rotações como

$$\boxed{\hat{O}_R \hat{T}^{(\ell)}_m \hat{O}_R^{-1} = \sum_{m'} \hat{T}^{(\ell)}_{m'} \Gamma^{(\ell)}_{m'm}(R)}$$

<u>Ex</u>. Operador vetorial , $\ell = 1$

$$\hat{V}_1 \equiv \hat{T}^{(1)}_1 , \quad \hat{V}_0 \equiv \hat{T}^{(1)}_0 , \quad \hat{V}_{-1} \equiv \hat{T}^{(1)}_{-1}$$

$$\hat{\Theta}_R \hat{V}_k \hat{\Theta}_R^{-1} = \sum_{k'=\pm 1, 0} V_{k'} \Gamma^{(1)}_{k'k}(R) .$$

Para uma rotação infinitesimal, temos

$$\hat{\Theta}_R \cong 1 - i\delta\varphi \hat{L}_m$$

$$(1 - i\delta\varphi \hat{L}_m) \hat{V}_k (1 + i\delta\varphi \hat{L}_m) \approx V_k - i\delta\varphi [\hat{L}_m , \hat{V}_k]$$

$$= \sum_{k'=0,\pm 1} V_{k'} \Gamma^{(1)}_{k'k}(R(\delta\varphi))$$

Seja o caso de uma rotação com eixo $\underline{z}$, $R_z(\delta\varphi)$:

$$\Gamma^{(1)}(\delta\varphi) = \begin{pmatrix} 1 - i\delta\varphi & & \\ & 1 & \\ & & 1 + i\delta\varphi \end{pmatrix}$$

obtemos:

$$V_1 - i\delta\varphi [\hat{L}_z , V_1] = V_1 - i\delta\varphi V_1$$

$$V_0 - i\delta\varphi [\hat{L}_z , V_0] = V_0$$

$$V_{-1} - i\delta\varphi [\hat{L}_z , V_{-1}] = V_{-1} + i\delta\varphi V_{-1}$$

Obtemos : $[\hat{L}_z, \hat{V}_0] = 0$,

$$[\hat{L}_z, \hat{V}_{\pm 1}] = \pm \hat{V}_{\pm 1} ,$$

ou usando o número magnético $m = 0, \pm 1$,

$$\boxed{[\hat{L}_z, \hat{V}_m] = m \hat{V}_m} ,$$

que é um caso particular das fórmulas de Racah.

— o —

Queremos calcular elementos de matriz do tipo

$$\left\langle \psi^{(\ell_1)}_{m_1} , \hat{T}^{(\ell)}_m \phi^{(\ell_2)}_{m_2} \right\rangle$$

As funções $\hat{T}^{(\ell)}_m \phi^{(\ell_2)}_{m_2}$ transformam como o produto Krönecker:

$$\Gamma^{(\ell)} \times \Gamma^{(\ell_2)} = \sum_{L=|\ell-\ell_2|}^{\ell+\ell_2} \Gamma^{(L)} .$$

As funções produto podem ser escritas como combinações lineares das bases de $\Gamma^{(L)}$ usando os coeficient de Clebsch-Gordan:

$$\hat{T}^{(\ell)}_m \phi^{(\ell_2)}_{m_2} = \sum_{\substack{M=m+m_2 \\ |\ell-\ell_2| \leq L \leq \ell+\ell_2}} \Psi^{(L)}_M \, (\ell m ; \ell_2 m_2 | \ell \ell_2 ; LM)^* .$$

Assim, o produto escalar requerido tem a forma:

$$\left\langle \psi^{(\ell_1)}_{m_1}, \hat{T}^{(\ell)}_m \phi^{(\ell_2)}_{m_2} \right\rangle = \sum_{\substack{M\\L}} (\ell m; \ell_2 m_2 | \ell \ell_2; LM)^* \cdot \left\langle \psi^{(\ell_1)}_{m_1}, \Psi^{(L)}_M \right\rangle$$

aqui usamos o Teorema de Ortogonalidade:

$$\left\langle \psi^{(\ell_1)}_{m_1}, \hat{T}^{(\ell)}_m \phi^{(\ell_2)}_{m_2} \right\rangle = \sum_{M,L} (\ell m; \ell_2 m_2 | \ell \ell_2; LM)^* \times \delta_{L\ell_1} \delta_{m_1 M} \times \left(\frac{1}{2\ell_1+1} \sum_{M'} \left\langle \psi^{(\ell_1)}_{M'}, \Psi^{(\ell_1)}_{M'} \right\rangle \right)$$

e obtemos o Teorema de Wigner - Eckart:

$$\left\langle \psi^{(\ell_1)}_{m_1}, \hat{T}^{(\ell)}_m \phi^{(\ell_2)}_{m_2} \right\rangle = (\ell m; \ell_2 m_2 | \ell \ell_2; \ell_1 m_1)^* \times \left(\frac{1}{\sqrt{2\ell_1+1}} \sum_{M'} \frac{\left\langle \psi^{(\ell_1)}_{M'}, \Psi^{(\ell_1)}_{M'} \right\rangle}{\sqrt{2\ell_1+1}} \right)$$

o fator no parêntesis <u>não</u> depende dos índices magnéti
(m_1, m, m_2).

▲ <u>Def</u>. <u>Elemento reduzido de matriz</u>

$$\langle \ell_1 \| \hat{T}^{(\ell)} \| \ell_2 \rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2\ell_1+1}} \sum_{M'} \left\langle \psi^{(\ell_1)}_{M'}, \Psi^{(\ell_1)}_{M'} \right\rangle$$

a notação mostra que só depende das representações

O Teorema de Wigner-Eckart toma a forma:

$$\boxed{\left\langle \psi^{(\ell_1)}_{m_1}, \hat{T}^{(\ell)}_{m} \phi^{(\ell_2)}_{m_2} \right\rangle = \left(\ell m ; \ell m_2 | \ell \ell_2 ; \ell_1 m_1\right)^{*} \times \frac{\left\langle \ell_1 \| \hat{T}^{(\ell)} \| \ell_2 \right\rangle}{\sqrt{2\ell_1+1}} .}$$

(Teorema de Wigner-Eckart)

Toda a dependência nos índices magnéticos está contida nos coeficientes de Clebsch-Gordan e o elemento reduzido de matriz precisa ser calculado apenas uma vez para cada triada (ℓ_1, ℓ, ℓ_2).

§ Álgebra de Momentum Angular

Obtemos propriedades intrínsecas, produto da álgebra. As componentes de $\vec{J}$ geram uma álgebra de Lie:

$$[J_i, J_j] = i\,\epsilon_{ijk} J_k \quad ; \quad i,j,k = 1,2,3 .$$

Mas $J^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$ comuta com todas as componentes:

$$[J^2, J_i] = 0 , \quad i = 1,2,3 .$$

Diagonalizamos simultaneamente J^2 e uma component
Seja ela J_3. Sejam $|\lambda,\mu\rangle$ os auto-estad

$$J^2|\lambda\mu\rangle = \lambda|\lambda\mu\rangle$$
$$J_z|\lambda\mu\rangle = \mu|\lambda\mu\rangle$$

Está claro que $\langle\lambda\mu|J^2|\lambda\mu\rangle = \lambda \geq \langle\lambda\mu|J_z^2|\lambda\mu\rangle$

$$= \mu^2 ,$$

isto é $\quad \lambda \geq \mu^2 \quad (*)$

• Def. Operadores escadas:

$$J_\pm \equiv J_x \pm i J_y$$

Usando as relações de comutaçaõ, obtemos as relações

$$J_\pm J_\mp = J^2 - J_z^2 \pm J_z$$

e $$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm.$$

O último comutador implica na prop. de escada de fato:

$$J_z(J_+|\lambda\mu\rangle) = (J_+J_z + J_+)|\lambda\mu\rangle$$

$$= (\mu+1)(J_+|\lambda\mu\rangle),$$

de maneira que o estado $J_+|\lambda\mu\rangle$ tem autovalor $(\mu+1)$ de J_z. Agora

$$J^2(J_+|\lambda\mu\rangle) = J_+(J^2|\lambda\mu\rangle) = \lambda(J_+|\lambda\mu\rangle)$$

O autovalor λ não muda em $J_+|\lambda\mu\rangle$, mas o autovalor de J_z incrementa em uma unidade. O autovalor μ tem um limite superior, se não a desigualdade $(*)$ poderia ser violada. Seja portanto μ_0 o máximo valor de μ, compatível com $(*)$. Necessariamente temos:

$$J_+|\lambda,\mu_0\rangle \equiv 0, \text{ com } |\lambda,\mu_0\rangle \neq 0.$$

Assim:

$$0 = J_-(J_+|\lambda\mu_0\rangle) = (J^2 - J_z^2 - J_z)|\lambda\mu_0\rangle$$

$$= (\lambda - \mu_0^2 - \mu_0)|\lambda\mu_0\rangle$$

$$\Longrightarrow \qquad \lambda = \mu_0(\mu_0+1).$$

Este processo sobe no espectro. Podemos também baixar com J_-. Operamos $\underline{n}$ vezes:

$$J_z(J_-^n|\lambda,\mu_0\rangle) = (\mu_0 - n) \qquad (J_-^n|\lambda,\mu_0\rangle)$$

O autovalor (μ_0-n) tem que ser limitado inferiormente, para não violar a desigualdade $(*)$.
Seja n_0 o máximo valor de n; temos necessariamente:

$$J_-|\lambda,\mu_0-n_0\rangle \equiv 0$$

Assim:

$$0 = J_+(J_-|\lambda,\mu_0-n_0\rangle) = (J^2 - J_z^2 + J_z)|\lambda,\mu_0-n_0\rangle$$

$$= [\lambda - (\mu_0-n_0)^2 + \mu_0 - n_0]\,|\lambda,\mu_0-n_0\rangle = 0$$

Obtemos:

$$\lambda = (\mu_0-n_0)^2 - (\mu_0-n_0)$$

$$= \mu_0(\mu_0+1) = \cancel{\mu_0^2} + \underline{\mu_0}$$

$$= \cancel{\mu_0^2} - 2\underline{\mu_0}n_0 + n_0^2 - \underline{\mu_0} + n_0$$

ou seja:

$$2\mu_0\,\cancel{(n_0+1)} = n_0\,\cancel{(n_0+1)}$$

Resultado: $\boxed{\mu_0 = \dfrac{n_0}{2}}$

Para n_0 par, o autovalor μ_0 é inteiro (reproduz as RI's que foram construídas com harmônicos esféricos). Mas se n_0 for ímpar, μ_0 resulta ser semi-inteiro. Neste caso, obtem espaços de momentum angular, para um λ dado, de dimensão par. A mais elementar é de dimensão 2 ($j=s=1/2$). Escrevemos esta transformação como um mapeamento linear

$$\begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \equiv M \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

Por enquanto não damos uma interpetração física às 'coordenadas' (u, v). Esta rep. elementar corresponde a $\Gamma^{(1/2)}$ e é irredutível por construção. Se a fórmula para as séries de Clebsch-Gordan permanecer as mesmas para j semi-inteiro (a fórmula recursiva dada no Sakurai, 'MQM' parece indicar que sim), temos

$$\Gamma^{(1/2)} \times \Gamma^{(1/2)} = \Gamma^{(1)} + \Gamma^{(0)}$$

Quer dizer que, por produtos construímos uma rep. com $j=1$ (que deve corresponder à construída antes) e um invariante. Pesquisamos o invariante:

$$\underset{(u_1, v_1)}{\Gamma^{(1/2)}} \times \underset{(u_2, v_2)}{\Gamma^{(1/2)}} = \Gamma^{(1)} + \Gamma^{(0)}$$

O invariante tem momentum angular nulo

e portanto terá que ser construído com os produtos $(u_1 v_2, u_2 v_1)$:

$$u_1 v_2 \longrightarrow (a u_1 + b v_1)(c u_2 + d v_2) =$$

$$= ac\, u_1 u_2 + bd\, v_1 v_2 + ad\, u_1 v_2 + bc\, u_2 v_1$$

$$v_1 u_2 \longrightarrow (c u_1 + d v_1)(a u_2 + b v_2) =$$

$$= ac\, u_1 u_2 + bd\, v_1 v_2 + ad\, u_2 v_1 + bc\, u_1 v_2$$

Vemos que a diferença $(u_1 v_2 - v_1 u_2)$ é base de uma representação unidimensional, pois:

$$u_1 v_2 - v_1 u_2 \longrightarrow (ad - bc)(u_1 v_2 - u_2 v_1)$$

Para ser um invariante, devemos ter:

$$\boxed{ad - bc = \det M = 1} \, .$$

Portanto obtemos um grupo unimodular.
Desde o ponto de vista físico, se o 'spinor' $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ representa o estado φ de um sistema quântico devemos requerer que $(u^*, v^*)\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \varphi^\dagger \cdot \varphi$ seja um invariante $|\varphi|^2 = |u|^2 + |v|^2$. Tratamos portanto com transformações unitárias M, com

$$\det M = +1$$

Este grupo é chamado de $SU(2)$. Unitaridade significa:

$$|a|^2+|c|^2=1=|b|^2+|d|^2,$$
$$ab^*+cd^*=0\ ,$$
$$|a|^2+|b|^2=1=|c|^2+|d|^2,$$
$$ac^*+bd^*=0\ ,$$

mais a condição

$$ad-bc=1.$$

A solução tem apenas 3 parâmetros livres <u>reais</u>:

$$c=-b^*,\quad d=a^*$$

Representações Bivalentes do Grupo de Rotações: O spin e o Homomorfismo entre SU(2) e SO(3)

Até agora construimos RI de SO(3) (e O(3)) que correspondem a valores inteiros do momentum angular. É só para valores inteiros de l que os harmônicos esféricos estão bem definidos. Porém sabemos que o elétron e outras partículas (e muitos sistemas físicos) podem ter spin semi-inteiro e o momentum angular total também pode ser semi-inteiro.

Tentaremos construir também estas representações (para momentum angular semi-inteiro).

Imaginemos que as fórmulas para os caracteres ficam as mesmas para l semi-inteiro

$$\chi^{(l)}(\alpha) = \frac{\operatorname{sen}(2l+1)\alpha/2}{\operatorname{sen}\alpha/2}$$

Consideremos agora uma rotação em $(\alpha+2\pi)$ com l semi-inteiro

$$\chi^{(l)}(\alpha+2\pi) = \frac{\operatorname{sen}[(l+1/2)(\alpha+2\pi)]}{\operatorname{sen}(\alpha/2+\pi)} = \frac{\operatorname{sen}[(l+1/2)\alpha]\cdot\cos[2\pi(l+1/2)]}{\left[\operatorname{sen}\frac{\alpha}{2}\right](-1)}$$

$$= \frac{\operatorname{sen}(l+1/2)\alpha\,\cdot\,\cos[\pi(2l+1)]}{(-1)\operatorname{sen}\alpha/2} = \frac{(-1)^{2l+1}}{(-1)}\left(\frac{\operatorname{sen}(l+1/2)\alpha}{\operatorname{sen}\alpha/2}\right)$$

$$= (-1)^{2l}\chi^{(l)}(\alpha)$$

Quando l é inteiro obtemos

$$\chi^{(l)}(\alpha+2\pi) = \chi^{(l)}(\alpha)$$

como era de esperar. Mas para l semi-inteiro nos obtemos

$$\chi^{(l)}(\alpha+2\pi) = -\chi^{(l)}(\alpha) \quad ,$$

que é um resultado surprendente (a primeira vista). Isto é (se a formu linha para os carateres continuar válida) uma rotação em 2π no espaço de momentum angular semi-inteiro não corresponde à identidade.

Teremos então as relações

$$\chi^{(\ell)}(0) = 2\ell+1 \quad , \quad \chi^{(\ell)}(2\pi) = -(2\ell+1) \quad , \quad \chi^{(\ell)}(\pm 4\pi) = 2\ell+1 \, .$$

Se obtem desta maneira uma representação bivalente do grupo SO(3), pois obtemos duas operações representando a mesma rotação no espaço tridimensional. Então um átomo num nível de multiplicidade par (momentum angular semi-inteiro) tem associada uma rep. bivalente do grupo de rotações.

Consideremos primeiro o caso de spin 1/2. Os possíveis estados do eletron são descritos por spinores α, β:

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Um spinor arbitrário φ sera uma combinação linear deles

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \varphi_1 \cdot \alpha + \varphi_2 \cdot \beta \qquad \varphi^{+} = (\varphi_1^*, \varphi_2^*)$$

Se o spin é quantizado na direção z ele é descrito por uma matriz de (2×2)

$$\hat{s}_z = \tfrac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_z = \tfrac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$$

cujos autovetores são os spinores α e β

$$\hat{\sigma}_z \alpha = \alpha \quad , \quad \hat{\sigma}_z \beta = -\beta \, .$$

Mas a direção de quantização é arbitrária (sem campo magnético o espaço é isótropo) e qualquer eixo de quantização será equivalente. Daqui então resulta natural estudar as rotações induzidas no espaço dos spinores. Estudemos transformações lineares complexas do tipo

$$z_1' = a z_1 + b z_2$$

$$z_2' = c z_1 + d z_2$$

e em forma matrizal

$$\begin{pmatrix} z_1' \\ z_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = \hat{M} \cdot \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}$$

Condição de unitaridade:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{\dagger} = \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1}$$

(1) $|a|^2 + |b|^2 = 1$

(2) $|c|^2 + |d|^2 = 1$

(1) e (2): duas condições reais ,

(3) $a c^* + b d^* = 0$ 1 condição complexa = 2 condições reais .

Estas matrizes complexas unitárias formam evidentemente um grupo: o grupo unitário $U(2)$. Este grupo tem 4 parâmetros . Se nos restringirmos só aquele subgrupo com det $= +1$, obtemos mais uma condição

(4) $$\det \hat{M} = ad - cb = +1 ,$$

de onde obtemos um <u>grupo triparamétrico</u> : $SU(2)$.

Os três parâmetros deste grupo nos dizem muita coisa intuitivamente , porque as rotações espaciais (dim 3) precisam de três parâmetros para ser definidas (dois parâmetros para determinar o eixo de rotação e um para o ângulo).

De (3) obtemos $c = -\frac{b^*}{a^*} d$, $c^* = -\frac{b}{a} d^*$

e sustituindo em (2) da obtemos

$$1 = dd^* + \frac{b^* b}{aa^*} dd^* = \frac{dd^*}{aa^*}\left(aa^* + bb^*\right)$$

e usando (1) obtemos

$$dd^* = aa^* \Rightarrow |d| = |a| \quad , \quad d = aa^*/d^*$$

Equivalentemente de (3) podemos escrever

$$d = -\frac{a^*}{b^*} c$$

e sustituindo outra vez em (2) obtemos:

$$1 = cc^*\left(1 + \frac{aa^*}{bb^*}\right) \Rightarrow cc^* = bb^* \Longrightarrow c = \frac{b^*}{c^*} b$$

Sustituindo agora na condição do det M = 1 , relação (4)

$$1 = ad - cb = ad + \frac{bb^* d}{a^*} = \frac{d}{a^*}\left(\underbrace{aa^* + bb^*}_{1}\right) = \frac{d}{a^*}$$

$$\boxed{d = a^*}$$

Sustituindo agora d

$$1 = -\frac{aa^*}{b^*} c - cb = -\frac{c}{b^*}\left(aa^* + bb^*\right) = -\frac{c}{b^*}$$

$$\boxed{c = -b^*}$$

A condição (4) então fica

$$\det M = ad - bc = 1 = aa^* + bb^* = |a|^2 + |b|^2$$

A forma geral das matrizes de $SU(2)$ é

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \text{ com } \det M = |a|^2 + |b|^2 = 1.$$

$SU(2)$ chama-se o grupo UNIMODULAR de dim 2.

Tentemos agora mostrar que este grupo tem ligação direta com rotações tridimensionais. Vamos introduzir agora as outras matrizes de Pauli. Já vimos o que é $\hat{\sigma}_z$. Também temos

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Propriedades gerais:

(1) $\mathrm{Tr}\,\hat{\sigma}_z = \mathrm{Tr}\,\hat{\sigma}_y = \mathrm{Tr}\,\hat{\sigma}_x = 0$

Também são hermitianas

(2) $\hat{\sigma}_z^\dagger = \hat{\sigma}_z, \quad \hat{\sigma}_y^\dagger = \hat{\sigma}_y, \quad \hat{\sigma}_x^\dagger = \hat{\sigma}_x$

(3) Junto com a identidade (2×2) complexa $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ as matrizes de Pauli $(\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ formam uma base deste espaço de matrizes complexas. Isto é toda matriz complexa (2×2) póde-se escrever como combinação linear das (matrizes de Pauli + identidade)

$$\mathbb{P} = \alpha \hat{1} + \beta \hat{\sigma}_x + \gamma \hat{\sigma}_y + \delta \hat{\sigma}_z$$

Daqui, e por causa de (1) obtemos

$$\mathrm{Tr}\,\mathbb{P} = 2\alpha$$

Por causa de (2)

$$\mathbb{P}^\dagger = \alpha^* 1 + \beta^* \hat{\sigma}_x + \gamma^* \hat{\sigma}_y + \delta^* \hat{\sigma}_z$$

Resultado:

$\boxed{\text{Toda matriz complexa, hermitiana de } (2\times 2) \text{ e traço nulo, é uma combinação linear das matrizes de Pauli } (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z) \text{ com coeficientes reais}}$

Em particular sejam (x, y, z) as coordenadas reais de um ponto no espaço. Formamos uma matriz hermitiana de traço nulo por

$$\mathbb{P}(x,y,z) = x\hat{\sigma}_x + y\hat{\sigma}_y + z\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} z & x-iy \\ x+iy & -z \end{pmatrix}$$

Vejamos que é o det $\mathbb{P}$:

$$\det \mathbb{P}(x,y,z) = -(z^2+y^2+x^2) = -r^2$$

Pergunta:

Como transforma $\mathbb{P}$ frente à uma transformação unitária $\mathbb{M}$ de $SU(2)$?

$$\mathbb{P} \rightarrow \mathbb{M}\circ\mathbb{P}\circ\mathbb{M}^\dagger \equiv \mathbb{P}'$$

(a) $\mathbb{P}'$ também é hermitiana

$$\mathbb{P}'^\dagger = (\mathbb{M}\circ\mathbb{P}\circ\mathbb{M}^\dagger)^\dagger = \mathbb{M}\circ\mathbb{P}^\dagger\circ\mathbb{M}^\dagger = \mathbb{M}\circ\mathbb{P}\circ\mathbb{M}^\dagger = \mathbb{P}'$$

(b) tem traço nulo. O traço é um invariante frente a uma mudança de base

$$Tr\,\mathbb{P}' = Tr(\mathbb{M}\cdot\mathbb{P}\cdot\mathbb{M}^\dagger) = Tr(\mathbb{P}\,\mathbb{M}^\dagger\mathbb{M}) = Tr\,\mathbb{P} = 0$$

(c) o determinante é um outro invariante. Então

$$\det\mathbb{P}' = \det\mathbb{P} = -(x^2+y^2+z^2)$$

Destas propriedades obtemos que

$$\mathbb{P}' = x'\hat{\sigma}_x + y'\hat{\sigma}_y + z'\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} z' & x'-iy' \\ x'+iy' & -z' \end{pmatrix}$$

com (x', y', z') reais e

$$x'^2 + y'^2 + z'^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

Isto é a transformação $\mathbb{M} \in SU(2)$ induz no espaço tridimensional uma outra transformação linear que conserva a distância à origem. Escrevamos:

$$(x, y, z) \xrightarrow{\mathbb{R}(\mathbb{M})} (x', y', z')$$

Esta transformação pode ser achada explicitamente

$$\begin{pmatrix} z' & x'-iy' \\ x'+iy' & -z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} z & x-iy \\ x+iy & -z \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} a^*z + b^*(x-iy) & -bz + a(x-iy) \\ a^*(x+iy) - b^*z & -b(x+iy) - az \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} |a|^2 z + ab^*(x-iy) + ba^*(x+iy) - |b|^2 z & \dots \\ -2a^*b^*z + (b^*)^2(x-iy) + (a^*)^2(x+iy) & \dots \end{pmatrix}$$

Daqui tiramos a transformação:

$$\begin{cases} z' = (|a|^2 - |b|^2)z + 2\,\mathrm{Re}\left[ab^*(x-iy)\right] \\ x' = -2z\,\mathrm{Re}(a^*b^*) + \mathrm{Re}\left[(a^*)^2(x+iy) + (b^*)^2(x-iy)\right] \\ y' = -2z\,\mathrm{Im}(a^*b^*) + \mathrm{Im}\left[(a^*)^2(x+iy) + (b^*)^2(x-iy)\right] \end{cases}$$

É possível escrever então a matriz da transformação $R(\mathbb{M})$ no espaço tridimensional em termos dos parâmetros (a,b):

$$R(M) = \begin{pmatrix} \frac{a^2+a^{*2}-b^2-b^{*2}}{2} & i\left(\frac{a^{*2}-a^2+b^{*2}-b^2}{2}\right) & -(ab+a^*b^*) \\ i\left(\frac{a^2-a^{*2}+b^{*2}-b^2}{2}\right) & \frac{a^2+a^{*2}+b^2+b^{*2}}{2} & i(a^*b^*-ab) \\ a^*b+ab^* & i(a^*b-ab^*) & a^*a-bb^* \end{pmatrix}.$$

a matriz $R(M)$ é real!

<u>Exercício</u>. Mostre que $\det R(M) = +1$

Resultado: a transformação $R(M)$ induzida tem matriz ortogonal e deixa invariante $x^2+y^2+z^2=r^2$. Corresponde portanto à uma rotação. Observemos tambem que para a identidade em $SU(2)$

$$\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow a=1,\ b=0$$

$$R(\mathbb{1}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{I}d \quad \text{no espaço tridimensional.}$$

e $\det \mathbb{I}d = 1$. Como o det é uma função contínua dos parâmetros (a,b) teremos que $\det R = 1$, para todas as matrizes R (não existe a possibilidade de pular de $+1$ a -1). Notemos que a escolha $a=-1,\ b=0$

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

da a mesma matriz R

$$R(-\mathbb{1}) = +\mathbb{I}d.$$

A correspondência assim construída

$$M \longrightarrow R(M)$$

de $SU(2)$ em $SO(3)$ é um <u>HOMOMORFISMO</u>, sendo que para cada matriz $R \in SO(3)$ temos duas matrizes de $SU(2)$

$$\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \quad e \quad \begin{pmatrix} -a & -b \\ b^* & -a^* \end{pmatrix}$$

Falamos então que $SU(2)$ fornece uma representação BIVALENTE do grupo de rotações.

• <u>EXEMPLO</u>. Construção das rotações elementares com eixos $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$

A) <u>Rotação com ângulo φ e eixo z : $R_z(\varphi)$</u>

A rotação definida como positiva tem matriz

$$R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\operatorname{sen}\varphi & 0 \\ \operatorname{sen}\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

fornecendo as seguintes equações

$$|a|^2 - |b|^2 = 1 \quad \text{que junto com} \quad |a|^2 + |b|^2 = 1$$

dão $|b| = 0$, $|a| = 1 \implies b \equiv 0$.

Daí $\cos\varphi = \dfrac{a^2 + a^{*2}}{2}$, $\operatorname{sen}\varphi = i\,\dfrac{a^2 - a^{*2}}{2}$

isto é

$$a^2 = \cos\varphi - i\operatorname{sen}\varphi = e^{-i\varphi}$$

e a solução é

$$a = \pm e^{-i\varphi/2}.$$

As correspondentes matrizes de $SU(2)$ são

$$\begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \quad e \quad \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi/2} & 0 \\ 0 & -e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}$$

B) Rotação com eixo y e ângulo θ : $R_y(\theta)$

Temos

$$R_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \operatorname{sen}\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\operatorname{sen}\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}$$

Obtemos as seguintes equações:

$$a^*b = ab^* = (a^*b)^* \qquad ab = a^*b^* = (ab)^*$$

implicando que $a^*/a = 1$ real $\Longrightarrow$ b real também.
porque $a^2+b^2=1$

Finalmente

$$a^2 - b^2 = \cos\theta = \cos^2\theta/2 - \operatorname{sen}^2\theta/2$$

$$2ab = -\operatorname{sen}\theta = -2\operatorname{sen}\theta/2\cos\theta/2.$$

Soluções :

$$a = \pm\cos\theta/2 \qquad b = \mp\operatorname{sen}\theta/2$$

ou

$$\pm\begin{pmatrix} \cos\theta/2 & -\operatorname{sen}\theta/2 \\ \operatorname{sen}\theta/2 & \cos\theta/2 \end{pmatrix}$$

C) Rotação com eixo x e ângulo ψ : $R_x(\psi)$

$$R_x(\psi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\psi & -\operatorname{sen}\psi \\ 0 & \operatorname{sen}\psi & \cos\psi \end{pmatrix}$$

$$a^*b = -ab^* = -(a^*b)^* \qquad ab = -(a^*b^*) = -(ab)^*$$

Daí temos $\operatorname{Re}(a^*b) = 0 = \operatorname{Re}(ab)$ $\Big\{$ um deles é real e o outro imaginário puro

Da razão das duas relações acima obtemos.

$$\frac{a^*b}{ab} = \frac{ab^*}{a^*b^*} = \frac{a}{a^*} = \frac{a^*}{a} \quad \text{ou} \quad a^2 = (a^*)^2$$

Do produto

$$aa^*b^2 = aa^*(b^*)^2 \qquad \text{ou} \qquad b^2 = (b^*)^2.$$

Para o elemento R_{11} obtemos:

$$\frac{a^2+a^{*2}-b^2-b^{*2}}{2} = 1 = a^2-b^2$$

Única possibilidade: $\underline{a}$ real e $\underline{b}$ imaginário puro.

Escrevemos então:

$$a \equiv \alpha \qquad b \equiv i\beta$$

com as seguintes equações

$$\alpha^2+\beta^2=1$$

$$\alpha^2-\beta^2 = \cos\psi = \cos^2\psi/2 - \operatorname{sen}^2\psi/2$$

$$-2\alpha\beta = +\operatorname{sen}\psi = 2\operatorname{sen}\psi/2\,\cos\psi/2.$$

as soluções são:

$$\alpha = \pm\cos\psi/2\,, \quad \beta = \mp\operatorname{sen}\psi/2$$

e as matrizes de SU(2) são dadas por

$$\pm\begin{pmatrix} \cos\psi/2 & -i\operatorname{sen}\psi/2 \\ -i\operatorname{sen}\psi/2 & \cos\psi/2 \end{pmatrix} = \pm\, M_x(\psi)$$

O fato de aparecer o ângulo meio nas matrizes M de SU(2) significa que uma rotação em 2π não é a identidade em nosso espaço. Por exemplo consideremos

$$M_x(\psi+2\pi) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\psi}{2}+\pi\right) & -i\operatorname{sen}\left(\frac{\psi}{2}+\pi\right) \\ -i\operatorname{sen}\left(\frac{\psi}{2}+\pi\right) & \cos\left(\frac{\psi}{2}+\pi\right) \end{pmatrix}$$

$$\left.\begin{aligned} \cos\left(\frac{\psi}{2}+\pi\right) &= -\cos\frac{\psi}{2} \\ \operatorname{sen}\left(\frac{\psi}{2}+\pi\right) &= -\operatorname{sen}\frac{\psi}{2} \end{aligned}\right\} \text{ de onde } \quad M_x(\psi+2\pi) = -M_x(\psi)$$

As matrizes $\mathbb{M}$ podem ser escritas em termos das matrizes de Pauli

$$\mathbb{M}_z(\varphi) = \cos(\varphi/2)\,\mathbb{1} - i\,\mathrm{sen}(\varphi/2)\,\hat{\sigma}_z$$

$$\mathbb{M}_x(\psi) = \cos(\psi/2)\,\mathbb{1} - i\,\mathrm{sen}(\psi/2)\,\hat{\sigma}_x$$

$$\mathbb{M}_y(\theta) = \cos(\theta/2)\,\mathbb{1} - i\,\mathrm{sen}(\theta/2)\,\hat{\sigma}_y$$

Facilmente pode ser mostrado que essas matrizes podem ser escritas na forma exponencial:

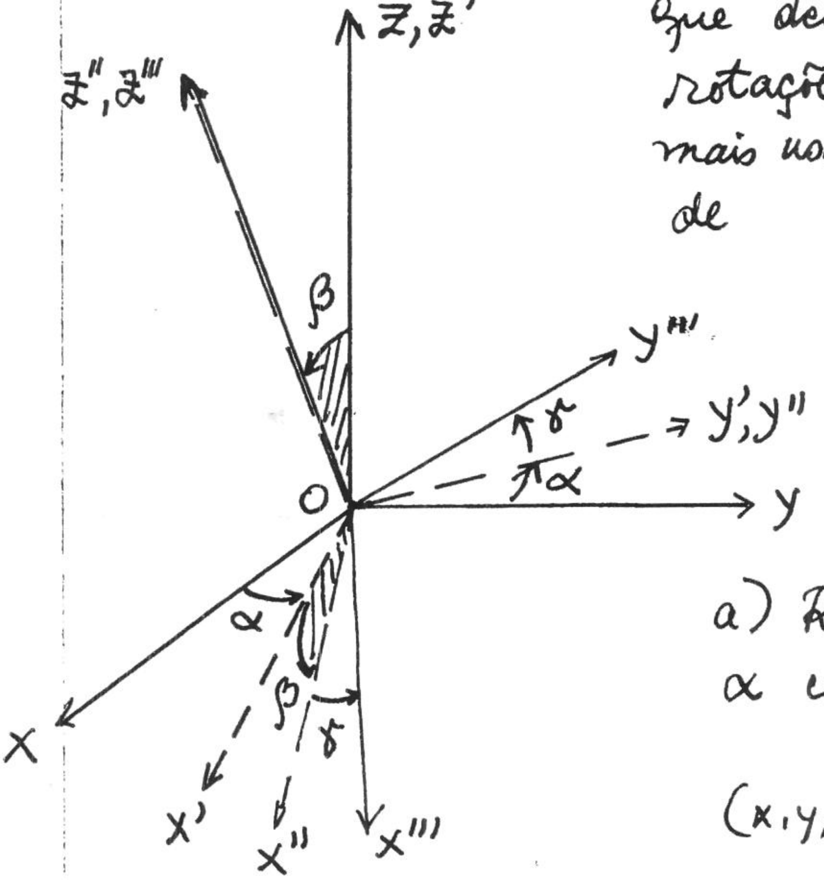
$$\boxed{\mathbb{M}_x(\psi) = e^{-i\frac{\psi}{2}\hat{\sigma}_x}\,, \quad \mathbb{M}_y(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{\sigma}_y}\,, \quad \mathbb{M}_z(\varphi) = e^{-i\frac{\varphi}{2}\hat{\sigma}_z}}$$

Daqui obtemos o resultado importante: as matrizes de Pauli $(\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ são os geradores infinitesimais do grupo SU(2).

Estas fórmulas são obtidas facilmente notando que as matrizes de Pauli satisfazem

$$(\hat{\sigma}_i)^{2k} = 1\,, \quad (\hat{\sigma}_i)^{2k+1} = \hat{\sigma}_i\,, \quad i = x, y, z$$

§ Ângulos de Euler (α, β, γ)



São três ângulos (parâmetros) que descrevem o grupo de rotações. Usaremos a convenção mais usada em Física, chamada de (ZYZ). Uma rotação arbitrária é obtida por três rotações elementares em sequência:

a) Rotação $R_Z(\alpha)$ em ângulo α com eixo OZ:

$$(x, y, z) \xrightarrow{R_Z(\alpha)} (x', y', z');$$

b) Rotação $R_{y'}(\beta)$ em ângulo β com eixo OY':

$$(x', y', z') \xrightarrow{R_{y'}(\beta)} (x'', y'', z'') \quad ;$$

c) Rotação $R_{z''}(\gamma)$ em ângulo γ com eixo $OZ'' = OZ'''$

$$(x'', y'', z'') \xrightarrow{R_{z''}(\gamma)} (x''', y''', z''')$$

Escrevemos então:

$$R(\alpha\beta\gamma) = R_{z''}(\gamma)\, R_{y'}(\beta)\, R_z(\alpha)$$

É melhor transformar esta expressão para outra usando sempre o sistema de eixos fixos (X,Y,Z). Temos

$$R_{z''}(\gamma) = R_{y'}(\beta)\, R_z(\gamma)\, R_{y'}^{-1}(\beta) .$$

Assim temos:

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = R_{y'}(\beta)\, R_z(\gamma)\, \cancel{R_{y'}^{-1}(\beta)}\, \cancel{R_{y'}(\beta)}\, R_z(\alpha)$$

$$= R_{y'}(\beta)\, R_z(\alpha)\, R_z(\gamma) ,$$

lembrando que rotações pelo mesmo eixo comutam.
Também:

$$R_{y'}(\beta) = R_z(\alpha)\, R_y(\beta)\, R_z^{-1}(\alpha) ,$$

de maneira que:

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = R_z(\alpha)\, R_y(\beta)\, R_z(\gamma) ,$$

daqui o nome (ZYZ) para esta convenção. Representamos estas rotações por matrizes em $SU(2)$:

$$R(\alpha\beta\gamma) = R_z(\alpha)\, R_y(\beta)\, R_z(\gamma)$$

$$\updownarrow \quad e^{-i\frac{\alpha}{2}\sigma_z} \quad e^{-i\frac{\beta}{2}\sigma_y} \quad e^{-i\frac{\gamma}{2}\sigma_z}$$

$$= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\operatorname{sen}\frac{\beta}{2} \\ \operatorname{sen}\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\gamma}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\gamma}{2}} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} e^{-i\left(\frac{\alpha+\gamma}{2}\right)} \cos\frac{\beta}{2} & -e^{-i\frac{(\alpha-\gamma)}{2}} \operatorname{sen}\frac{\beta}{2} \\ e^{i\frac{(\alpha-\gamma)}{2}} \operatorname{sen}\frac{\beta}{2} & e^{i\frac{(\alpha+\gamma)}{2}} \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}$$

$$= \mathbb{M}(\alpha,\beta,\gamma) = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^{*} & a^{*} \end{pmatrix},$$

e obtemos os parâmetros de Cayley-Klein em função dos ângulos de Euler

$$\begin{cases} a = e^{-i\left(\frac{\alpha+\gamma}{2}\right)} \cos\frac{\beta}{2}, \\ b = -e^{-i\frac{(\alpha-\gamma)}{2}} \operatorname{sen}\frac{\beta}{2}, \end{cases}$$

com

$$|a|^2 + |b|^2 = \cos^2\frac{\beta}{2} + \operatorname{sen}^2\frac{\beta}{2} = 1$$

A matriz da rotação espacial fica

$$R(\alpha\beta\gamma) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\operatorname{sen}\alpha & 0 \\ +\operatorname{sen}\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & +\operatorname{sen}\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\operatorname{sen}\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\gamma & -\operatorname{sen}\gamma & 0 \\ +\operatorname{sen}\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\beta\cos\alpha\cos\gamma - \operatorname{sen}\alpha\operatorname{sen}\gamma & -\cos\beta\operatorname{sen}\gamma\cos\alpha - \cos\gamma\operatorname{sen}\alpha & +\operatorname{sen}\beta\cos\alpha \\ +\cos\beta\cos\gamma\operatorname{sen}\alpha + \operatorname{sen}\gamma\cos\alpha & -\cos\beta\operatorname{sen}\gamma\operatorname{sen}\alpha + \cos\alpha\cos\gamma & \operatorname{sen}\beta\operatorname{sen}\alpha \\ -\operatorname{sen}\beta\cos\gamma & +\operatorname{sen}\beta\operatorname{sen}\gamma & \cos\alpha \end{pmatrix}$$

Podemos então obter formulas explícitas para os operadores de rotação: Seja l inteiro:

$$O_R \psi^l_m(\underset{\sim}{r}) = \sum_{m'} \psi^l_{m'}(\underset{\sim}{r})\, \Gamma^{(l)}_{m'm}(R)$$
$$= e^{-i\alpha\hat{L}_z}\, e^{-i\beta\hat{L}_y}\, e^{-i\gamma\hat{L}_z}\, \psi^l_m(\underset{\sim}{r})$$
$$= e^{-im\gamma}\, e^{-i\alpha\hat{L}_z}\, e^{-i\beta\hat{L}_y}\, \psi^l_m(\underset{\sim}{r})$$

$$\langle \psi^l_\mu, O_R\psi^l_m \rangle = \sum_{m'} \langle \psi^l_\mu, \psi^l_{m'} \rangle\, \Gamma^{(l)}_{m'm}(R) = \Gamma^{(l)}_{\mu m}[R(\alpha\beta\gamma)]$$
$$= e^{-im\gamma} \langle \psi^l_\mu, e^{-i\alpha\hat{L}_z} e^{-i\beta\hat{L}_y} \psi^l_m \rangle$$
$$= e^{-im\gamma} \langle e^{+i\alpha\hat{L}_z} \psi^l_\mu, e^{-i\beta\hat{L}_y} \psi^l_m \rangle$$
$$= e^{-im\gamma} \langle e^{+i\mu\alpha} \psi^l_\mu, e^{-i\beta\hat{L}_y} \psi^l_m \rangle$$
$$= e^{-im\gamma}\, e^{-i\mu\alpha} \langle \psi^l_\mu, e^{-i\beta\hat{L}_y} \psi^l_m \rangle$$

Daqui obtemos

$$\Gamma^{(\ell)}_{\mu m}[R(\alpha\beta\gamma)] = e^{-im\gamma} e^{-i\mu\alpha} \langle \psi^{\ell}_{\mu}, e^{-i\beta \hat{L}_y} \psi^{\ell}_{m} \rangle$$

escrevendo

$$d^{(\ell)}_{\mu m}(\beta) \equiv \langle \psi^{\ell}_{\mu}, e^{-i\beta \hat{L}_y} \psi^{\ell}_{m} \rangle$$

$$\boxed{\Gamma^{(\ell)}_{\mu m}[R(\alpha\beta\gamma)] = e^{-i\mu\alpha} \cdot e^{-im\gamma} d^{(\ell)}_{\mu m}(\beta)}$$

REPRESENTAÇÕES IRREDUTÍVEIS DE SU(2).

Temos construido uma representação bidimensional de SU(2) em termos de espinores

$$\begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} u' = au + bv \\ v' = -b^*u + a^*v \end{cases} \qquad (1)$$

Sabemos que podemos gerar rep. de dimensão superior tomando produtos de funções bases. Por exemplo com

(u^2, uv, v^2) geramos uma Rep. de dim 3 ; com

(u^3, u^2v, uv^2, v^3) geramos uma rep. de dim 4.

Em geral as $(2j+1)$ funções

$$f^{(j)}_{m} = \frac{u^{j+m}\, v^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}} \quad , j = \text{inteiro o semi-inteiro} \qquad (2)$$

$$-j \leq m \leq j \qquad m = \pm j, \pm(j-1) \ldots$$

geram uma rep. de dim $(2j+1)$ em termos de produtos de grau $2j$. O fator $[(j+m)!\,(j-m)!]^{-1/2}$ é um fator de normalização para a rep. resultar unitária

Exemplos.

(a) para $j = \frac{1}{2}$ obtemos a rep. já construída

$$f^{(1/2)}_{-1/2} = v \quad , \quad f^{(1/2)}_{1/2} = u.$$

(b) $j = 1$

$$f^{(1)}_{1} = \frac{u^2}{\sqrt{2}} , \quad f^{(1)}_{0} = uv , \quad f^{(1)}_{-1} = \frac{v^2}{\sqrt{2}}$$

Como transformam as funções

$$f^{(1)}_{1} \to \frac{1}{\sqrt{2}}(au+bv)^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^2u^2 + 2abuv + b^2v^2)$$

$$= a^2 f^{(1)}_{1} + \sqrt{2}ab\, f^{(1)}_{0} + b^2 f^{(1)}_{-1}$$

$$f^{(1)}_{0} \to (au+bv)(-b^*u + a^*v) = -ab^*u^2 + (|a|^2-|b|^2)uv + a^*b\, v^2$$

$$= -\sqrt{2}\, ab^* f^{(1)}_{1} + (|a|^2-|b|^2) f^{(1)}_{0} + \sqrt{2}\, a^*b\, f^{(1)}_{-1}$$

$$f^{(1)}_{-1} \to \frac{(-b^*u + a^*v)^2}{\sqrt{2}} = (b^{*2}u^2 - 2a^*b^*uv + a^{*2}v^2)/\sqrt{2}$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2}} b^{*2} f^{(1)}_{1} - \frac{2a^*b^*}{\sqrt{2}} f^{(1)}_{0} + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2}} a^{*2} f^{(1)}_{-1}$$

Daqui obtemos a seguinte matriz:

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \longleftrightarrow \begin{pmatrix} a^2 & \sqrt{2}\,ab & b^2 \\ -\sqrt{2}\,ab^* & |a|^2-|b|^2 & \sqrt{2}\,a^*b \\ b^{*2} & -\sqrt{2}\,a^*b^* & a^{*2} \end{pmatrix} = \mathbb{R}$$

representação equivalente à obtida anteriormente, com

$$\mathrm{Tr}\, \mathbb{R} = 2\, \mathrm{Re}\, a^2 + |a|^2 - |b|^2$$

considerar $M = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{+i\alpha/2} \end{pmatrix}$

$$\mathbb{R} = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{+i\alpha} \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{Tr}\,\mathbb{R} = \chi = 1 + 2\cos\alpha$$

Temos obtido uma rep. equivalente à rep. I de SO(3) com $l = 1$.

Vejamos agora o caso geral

$$\mathbb{R}(a,b) f^{(j)}_m = \frac{1}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}} (au + bv)^{j+m} (-b^* u + a^* v)^{j-m}$$

$(j+m)$ e $(j-m)$ são inteiros mesmo sendo j semi-inteiro

$$= \frac{1}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}} \sum_{k=0}^{j+m} \binom{j+m}{k} (au)^{j+m-k} (bv)^{k} \times$$

$$\times \sum_{k'=0}^{j-m} \binom{j-m}{k'} (-b^* u)^{j-m-k'} (a^* v)^{k'}$$

$$= \sum_{k=0}^{j+m} \sum_{k'=0}^{j-m} \frac{1}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}} \frac{(j+m)!}{k!\,(j+m-k)!} \frac{(j-m)!}{(k')!\,(j-m-k')!} \times$$

$$\times\, u^{2j-k-k'} v^{k+k'} a^{j+m-k} a^{*k'} b^{k} (-b^*)^{j-m-k'}$$

escrever
$$\left.\begin{aligned} 2j-k-k' &= j+\mu \\ k+k' &= j-\mu \end{aligned}\right\} \mu = j-(k+k')$$

$$= \sum_{k=0}^{j+m} \sum_{k'=0}^{j-m} \sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}\; \frac{1}{k!\,k'!} \times \frac{1}{(j+m-k)!} \times \frac{1}{(j-m-k')!} \times a^{j+m-k} (a^*)^{k'} \times$$

$$\times\, b^{k} (-b^*)^{j-m-k'} \sqrt{(2j-k-k')!\,(k+k')!}\; \frac{u^{j+j-k-k'}\; v^{k+k'}}{\sqrt{(2j-k-k')!\;\;(k+k')!}}$$

Mudando de indice mudo

$$\mu = j - (k+k')$$

máximo valor de $\mu = j$ com $k = k' = 0$,

mínimo $\mu = j-(j+j) = -j$ para $k' = j-m$, $k = j+m$

$$= \sum_{\mu=-j}^{j} \sum_{k} \sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}\ \frac{1}{k!\,(j-\mu-k)!}\ \frac{1}{(j+m-k)!}\ \frac{1}{(\mu+k-m)!}\ (-1)^{\mu+k-m}$$

$$\times \sqrt{(j+\mu)!\,(j-\mu)!}\quad a^{j+m-k}\,(a^*)^{j-k-\mu}\, b^{k}\,(b^*)^{\mu+k-m} \times$$

$$\times\ f_{\mu}^{(j)}$$

$$= \sum_{\mu=-j}^{j} f_{\mu}^{(j)}\ \Gamma_{\mu m}^{(j)}[R(a,b)]$$

Podemos então tirar os elementos de matriz

$$\boxed{\Gamma_{\mu m}^{(j)}[R(a,b)] = \sum_{k} \frac{\left[(j+m)!\,(j-m)!\,(j+\mu)!\,(j-\mu)!\right]^{1/2}}{k!\,(j-\mu-k)!\,(j+m-k)!\,(\mu+k-m)!} \times a^{j+m-k}\,(a^*)^{j-k-\mu}\, b^{k}\,(-b^*)^{\mu+k-m}} \quad (3)$$

Os limites de variação do índice k dependem dos outros índices (j,μ,m)

(a) limite superior $\begin{cases} \text{se } j-\mu < j+m & \text{é } (j-\mu) \\ \text{se } j+m < j-\mu & \text{é } (j+m) \end{cases}$

(b) limite inferior $\begin{cases} \text{se } \mu-m > 0 & \text{é } k=0 \\ \text{se } \mu-m < 0 & \text{é } -(\mu-m) \end{cases}$

O conjunto $f_{m}^{(j)}$ forma um conjunto de funções l.i. Isto é elas são funções bases de um espaço de Hilbert de dim $(2j+1)$.

Usando a função $\Gamma(n) = (n-1)!$, a fórmula (3) pode ser escrita como:

$$\Gamma^{(j)}_{\mu m}(R(a,b)) = \sum_{k} \frac{\left[\Gamma(j+m+1)\,\Gamma(j-m+1)\,\Gamma(j+\mu+1)\,\Gamma(j-\mu+1)\right]^{1/2}}{\Gamma(k+1)\,\Gamma(j-\mu-k+1)\,\Gamma(j+m-k+1)\,\Gamma(\mu+k-m+1)} \times$$

$$\times\; a^{j+m-k}\,(a^*)^{j-k-\mu}\; b^{k}\,(-b^*)^{\mu+k-m}$$

e agora a soma pode ser extendida para todo $\underline{k}$. Quando os argumentos das funções Γ do denominador forem negativos ou nulos (a função $\Gamma(x)$ tem aí polos), esses termos serão automáticamente nulos.

Mostremos que as rep. que temos construído são unitárias.

Formemos as somas

$$\sum_{m=-j}^{j} f_m^{(j)} f_m^{(j)*} = \sum_{m=-j}^{j} |f_m^{(j)}|^2 = \sum_{m=-j}^{j} \frac{|u|^{2(j+m)} \, |v|^{2(j-m)}}{(j+m)! \, (j-m!)}$$

mudar de índice mudo

$$n = j - m$$

$$= \sum_{n=0}^{2j} \frac{1}{n!(2j-n)!} \left(|u|^2\right)^{2j-n} \left(|v|^2\right)^n \cdot \frac{(2j)!}{(2j)!}$$

$$= \frac{1}{(2j)!} \sum_{n=0}^{2j} \frac{(2j)!}{n!(2j-n)!} \left(|u|^2\right)^{2j-n} \left(|v|^2\right)^n$$

$$= \frac{1}{(2j)!} \left(|u|^2 + |v|^2\right)^{2j}$$

E para as funções transformadas teremos então:

$$\sum_m |f_m^{(j)\prime}|^2 = \frac{1}{(2j)!} \left(|u'|^2 + |v'|^2\right)^{2j}$$

Mas como a transformação original é unitária

$$|u|^2 + |v|^2 = |u'|^2 + |v'|^2$$

e finalmente

$$\sum_{m=j}^{j} |f_m^{(j)}|^2 = \sum_{m=-j}^{j} |f_m^{\prime(j)}|^2$$

q. e. d.

Vejamos alguns casos particulares destas matrizes.

(i) $\mu = j$. único termo permitido $k=0$ na soma (3)

$$\Gamma_{jm}^{(j)}[R(a,b)] = \frac{\left[(j+m)!(j-m)!\,(2j)!\right]^{1/2}}{(j+m)!\,(j-m)!} \, a^{j+m} \left(-b^*\right)^{j-m}$$

Obtemos

$$\boxed{\Gamma^{(j)}_{jm}[R(a,b)] = \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} \; a^{j+m}(-b^*)^{j-m}} \qquad (4)$$

(ii) Caso de uma matriz diagonal, $a = \bar{e}^{i\alpha/2}$, $b \equiv 0$

único termo que contribui é $k=0$, com $\mu = m$

$$\Gamma^{(j)}_{\mu m}[R(\bar{e}^{i\alpha/2},0)] = \frac{[(j+m)!(j-m)!(j+m)!(j-m)!]^{1/2}}{(j-m)!(j+m)!} \times$$

$$\times \, \delta_{\mu m} \, a^{j+m} \, a^{*\,j-m}$$

$$(5) \qquad \boxed{\Gamma^{(j)}_{\mu m}(R) = \delta_{\mu m} \, e^{-im\alpha}}$$

O traço desta ultima matriz é trivial

$$\boxed{\chi[R(\bar{e}^{i\alpha/2},0)] = \sum_{m=-j}^{j} e^{-im\alpha} = \frac{\operatorname{sen}(j+1/2)\alpha}{\operatorname{sen}\alpha/2}} \qquad (6)$$

Mostremos agora que as Representações assim construídas são irredutíveis.

Consideramos então uma matriz $\mathbb{P}$ que comuta com todas as matrizes da forma (3), e também (5) em particular

$$\Gamma^{(j)}[R(\bar{e}^{i\alpha/2},0)]\,\mathbb{P} = \mathbb{P}\cdot\Gamma^{(j)}[R(\bar{e}^{i\alpha/2},0)]$$

$$\sum_{m} \Gamma^{(j)}_{\mu m} \mathbb{P}_{m\nu} = \sum_{m'} \mathbb{P}_{\mu m'} \Gamma^{(j)}_{m'\nu}$$

$$\sum_{m} e^{-im\alpha} \delta_{\mu m} P_{m\nu} = \cancel{\sum_{m'} e^{-im'\alpha} \delta_{\mu m'} \Gamma^{(j)}_{m'\nu}} = \sum_{m'} P_{\mu m'} \delta_{m'\nu} e^{-im'\alpha}$$

$$e^{-i\mu\alpha} P_{\mu\nu} = e^{-i\nu\alpha} P_{\mu\nu}$$

$$P_{\mu\nu}(e^{-i\mu\alpha} - e^{-i\nu\alpha}) = 0$$

se $\mu \neq \nu \Rightarrow P_{\mu\nu} = 0 \Rightarrow \mathbb{P}$ é diagonal.

Seja então:
$$P_{\mu\nu} = p_\nu \delta_{\mu\nu}$$

Como $\mathbb{P}$ comuta também com as matrizes do tipo (3), deve-se ter

$$\mathbb{P} \cdot \Gamma^{(j)}(a,b) = \Gamma^{(j)}(a,b) \cdot \mathbb{P}$$

Agora bem consideremos o elemento $(\ldots)_{jm}$ desse produto ($\mu = j$, valor máximo)

$$[\mathbb{P} \cdot \Gamma^{(j)}]_{jm} = [\Gamma^{(j)}(a,b)\mathbb{P}]_{jm}$$

$$\sum_{m'} P_{jm'} \Gamma^{(j)}_{m'm} = p_j \Gamma^{(j)}_{jm} = \sum_{m'} \Gamma^{(j)}_{jm'} P_{m'm} = \Gamma^{(j)}_{jm} p_m .$$

$$\Gamma^{(j)}_{jm}(p_j - p_m) = 0$$

e como $\Gamma^{(j)}_{jm} \neq 0$, segue que

$$p_m = p_j \quad , \text{para todo } m .$$

É dizer a matriz $\mathbb{P}$ é um multiplo da identidade. Segundo um Lema de Schur (generalizado para grupos contínuos "num Ato de Fé") as matrizes $\Gamma^{(j)}[R(a,b)]$ formam uma Rep. Irredutível.

Estas RI de SU(2) nos ~~proporcionam~~ fornecem de imediato RI de SO(3). Por exemplo, as matrizes $\Gamma^{(1/2)}[R(a,b)]$ são as próprias matrizes $\mathbb{M} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$ de SU(2) que fornecem uma RI bivalente do grupo de rotações SO(3). Temos tambem uma expressão para a matriz $\mathbb{M}$ em termo dos ângulos de Euler:

$$\mathbb{M}(\alpha,\beta,\gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2}\cos\beta/2 & -e^{+i(\alpha-\gamma)/2}\,\mathrm{sen}\,\beta/2 \\ +e^{-i(\alpha-\gamma)/2}\,\mathrm{sen}\,\beta/2 & e^{+i(\alpha+\gamma)/2}\cos\beta/2 \end{pmatrix},$$

mas devemos tomar cuidado pois a nossa convenção é

$$O_{R(\alpha,\beta,\gamma)}\psi(\underset{\sim}{r}) = \psi(R^{-1}\underset{\sim}{r})$$

e as matrizes $\mathbb{M}(\alpha\beta\gamma)$ foram construídas com rotações positivas. A solução é muito simples: é só mudar $(\alpha\beta\gamma) \to (-\alpha,-\beta,-\gamma)$. Daí

$$\Gamma^{(1/2)}(\alpha,\beta,\gamma) = \begin{pmatrix} e^{+i(\alpha+\gamma)/2}\cos\beta/2 & +e^{+i(\alpha-\gamma)/2}\,\mathrm{sen}\,\beta/2 \\ -e^{-i(\alpha-\gamma)/2}\,\mathrm{sen}\,\beta/2 & e^{-i(\alpha+\gamma)/2}\cos\beta/2 \end{pmatrix}$$

Então na construção das matrizes devemos usar

$$a = e^{i(\alpha+\gamma)/2}\cos\beta/2 \qquad e^{-i(\alpha+\gamma)/2}\cos\beta/2 = a^*$$

$$b = e^{+i(\alpha-\gamma)/2}\,\mathrm{sen}\,\beta/2 \qquad -e^{-i(\alpha-\gamma)/2}\,\mathrm{sen}\,\beta/2 = -b^*$$

Daqui as rep. explícitas das matrizes para $\widetilde{SO(3)}$ são

$$\Gamma^{(j)}_{\mu m}(\alpha,\beta,\gamma) = \sum_k (-1)^{\mu+k-m}\frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+\mu)!(j-\mu)!}}{k!(j-\mu-k)!(j+m-k)!(\mu+k-m)!}\times$$

$$\times\left[e^{+i(\alpha+\gamma)/2}\cos\beta/2\right]^{j+m-k}\left[e^{-i(\alpha+\gamma)/2}\cos\beta/2\right]^{j-k-\mu}$$

$$\left[+e^{+i(\alpha-\gamma)/2}\,\mathrm{sen}\,\beta/2\right]^{k}\left[-e^{-i(\alpha-\gamma)/2}\,\mathrm{sen}\,\beta/2\right]^{\mu+k-m}$$

$$= \sum_k (-1)^k\frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+\mu)!(j-\mu)!}}{k!(j-\mu-k)!(j+m-k)!(\mu+k-m)!}\times(-1)^{\mu-m}$$

$$\times\; e^{+i[(\alpha+\gamma)/2](m+\mu)}\; e^{+i[(\alpha-\gamma)/2]\mu-m} \times (\cos\beta/2)^{2j-2k+m-\mu} \times$$

$$\times (\operatorname{sen}\beta/2)^{2k+\mu-m}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\Gamma^{(j)}_{\mu m}(\alpha,\beta,\gamma) = e^{+i\alpha\mu}\, e^{+i\gamma m} \sum_k (-1)^k \frac{[(j+m)!(j-m)!(j-\mu)!(j+\mu)!]^{1/2}}{k!(j-\mu-k)!(j+m-k)!(\mu+k-m)!}(-1)^{\mu-m} \times \\ \times (\cos\beta/2)^{2j-2k+m-\mu}(\operatorname{sen}\beta/2)^{2k+\mu-m}\end{aligned}} \quad (7)$$

Em SO(3) todas as rotações pelo mesmo ângulo são equivalentes. Para calcular os carateres basta considerar o caso

$$\alpha=\alpha,\ \beta=\gamma=0$$

único termo que da contribuição

$$2k=m-\mu$$

e só temos a possibilidade $k=0$, $m=\mu$.

$$\Gamma^{(j)}_{\mu m}(\alpha,0,0) = e^{+im\alpha}\,\delta_{\mu m}$$

$$\chi^{(j)}[R(\alpha,0,0)] = \chi^{(j)}(\alpha) = \sum_{m=-j}^{j} e^{+im\alpha} = \frac{\operatorname{sen}(j+1/2)\alpha}{\operatorname{sen}\alpha/2}.$$

$$\boxed{\chi^{(j)}(\alpha) = \frac{\operatorname{sen}(j+1/2)\alpha}{\operatorname{sen}\alpha/2},\quad j=\tfrac{1}{2},1,3/2,2,5/2\cdots} \quad (8)$$

Para j inteiro obtemos RI equivalentes as RI já construídas com os harmônicos esféricos. Para j semi-inteiro obtemos RI bivalentes de SO(3) (mas univalentes de SU(2)!) de dimensão par $(2j+1)$

O acoplamento de momenta é feito de maneira similar que para momentum angular inteiro:

$$\chi^{(j\times j')}(\alpha) = \sum_{-j\leq m\leq j} e^{im\alpha} \cdot \sum_{-j'\leq m'\leq j'} e^{im'\alpha} = \sum_{J=|j-j'|}^{j+j'} \sum_{M=-J}^{J} e^{iM\alpha}$$

$$= \sum_{J=|j-j'|}^{j+j'} \chi^{(J)}(\alpha) \,, \qquad (9)$$

de onde obtemos a série de Clebsch-Gordan

$$\Gamma^{(j)} \times \Gamma^{(j')} = \bigoplus_{J=|j-j'|}^{j+j'} \Gamma^{(J)} \qquad (10)$$

▸ Exemplo.

$$\Gamma^{(\frac{1}{2})} \times \Gamma^{(\frac{1}{2})} = \underset{\text{singleto}}{\Gamma^{(0)}} + \underset{\text{tripleto}}{\Gamma^{(1)}}$$

O problema dos coeficientes de Clebsch-Gordan está ligado a escrever as bases $\Psi_M^{(J)}$ das RI $\Gamma^{(J)}$ da decomposição (10) em termos de combinações lineares das funções produtos $\psi_m^{(j)} \psi_{m'}^{(j')}$ que geram o espaço de representação do produto Krönecker (ver seção 9.8 do Hamermesh)