FI-144 TEORIA DE GRUPOS
Lista #2

Guillermo Cabrera

Entrega: 16 de abril de 2018
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:
   $$V(x,y,z) = a\frac{z}{x^2+y^2} + b\frac{z^2}{(x^2-y^2)^2} + c\frac{x^2y^2}{(x^2+y^2)^2z^4},$$
   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 contem o eixo z, U_2 uma rotação de 180^0 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. **Teorema**

   Mostre que se cada elemento de um grupo G, diferente da identidade, é de ordem 2, G é abeliano e sua ordem é uma potência de 2 (2^k onde k é o número de geradores do grupo). ■

3. **Representação bidimensional do grupo $\mathbf{C}_{3V}$.**

   Para o grupo $\mathbf{C}_{3V}$, representamos os geradores pelas matrizes
   $$\Gamma(C_3) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \qquad \Gamma(\sigma_V) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$
   Encontre todas as matrizes da representação e verifique que trata-se de uma '*representação fiel*'. Mostre que ela é irredutível. ■

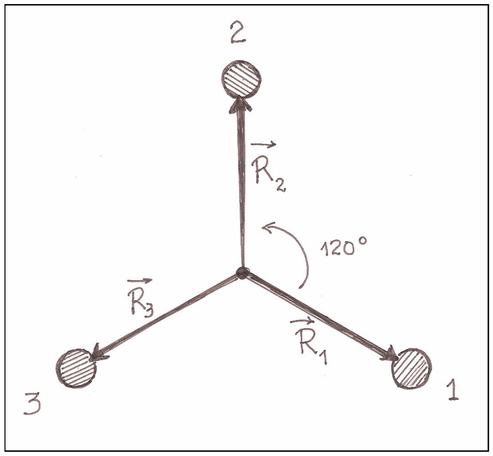

Figure 1:

4. * **Molécula Triangular**

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

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

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

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

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

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

(a) Construa uma representação do grupo $\mathbf{C}_{3V}$ com as funções $(\psi_1(\vec{\mathbf{x}}),\psi_2(\vec{\mathbf{x}}),\psi_3(\vec{\mathbf{x}}))$ e mostre que ela é redutível. Encontre sua decomposição em representações irredutíveis do grupo.

(b) 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. ■

5. * **Grupo $\mathbf{C}_{4V}$, grupo do quadrado**

   O objetivo do problema é construir a tabela de carateres de $\mathbf{C}_{4V}$. Lembre que para Representações Irredutíveis (RI) unidimensionais temos:

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

   (a) Encontre todos os caracteres de Dirac e obtenha sua tabela de multiplicação (use a tabela de multiplicação do grupo obtida na lista anterior).

   (b) Obtenha todos os autovalores associados aos caracteres de Dirac e construa a tabela de carateres.

   (c) Diga de que RI são funções base as coordenadas (x, y, z) e expressões quadráticas das coordenadas.

   (d) Escreva o desenvolvimento mais geral até quarta ordem de um potencial invariante sobre $\mathbf{C}_{4V}$.

   (e) Que tipo de níveis energéticos terá um sistema cujo grupo de simetria é dado por $\mathbf{C}_{4V}$? ■

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** D_3

   (a) Determine a representação de D_3 gerada pela função $F(x, y, z) = x^2 z g(r)$, 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 construida 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**, **O**.

   (a) Mostre que **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 **O** e procure os subgrupos invariantes.

   (c) Construa uma representação de **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 $\mathbf{C}_{6V}$. 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 rotoreflexão 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 $\mathcal{C}_\mu$ 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 relaçaõ:

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

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