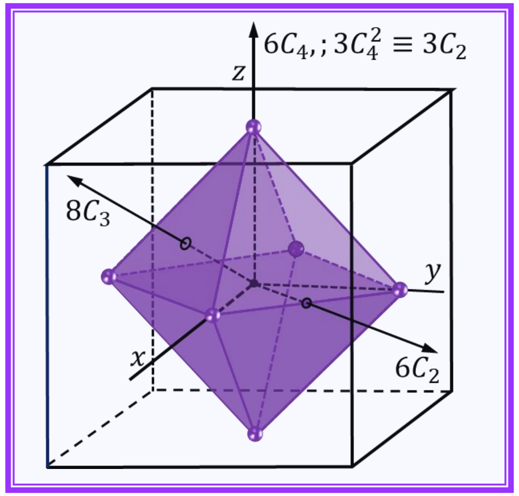
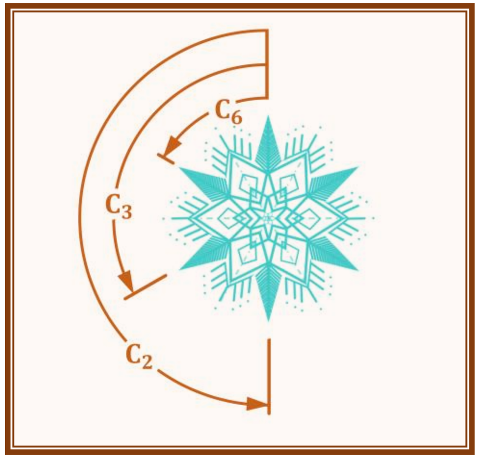
Teoria de grupos aplicada em moléculas e sólidos - PGF5261

Grupos e tensores aplicados à ciência dos materiais - 4300409



Lucy V. C. Assali

Instituto de Física
Universidade de São Paulo



Aula 6 – 14/04

1º Semestre/2023

Revisão: conceitos básicos de álgebra linear

Definições Básicas:

Espaço Vetorial Complexo — Um conjunto $\mathbb{V}$ de vetores $\{\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}, \ldots\}$ é um *espaço vetorial complexo* se os seguintes axiomas estiverem satisfeitos:

I) A cada par de vetores $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{V}$ corresponde um vetor $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} \in \mathbb{V}$, chamado *adição* de $\boldsymbol{x}$ e $\boldsymbol{y}$, tal que:

a) $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} = \boldsymbol{y} + \boldsymbol{x}$;

b) $\boldsymbol{x} + (\boldsymbol{y} + \boldsymbol{z}) = (\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) + \boldsymbol{z}, \quad \boldsymbol{z} \in \mathbb{V}$;

c) $\exists$ um único vetor $\mathbf{0} \in \mathbb{V}$, chamado vetor *nulo*, tal que $\boldsymbol{x} + \mathbf{0} = \boldsymbol{x}, \forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{V}$;

d) para cada vetor $\boldsymbol{x} \in \mathbb{V}$, $\exists$ um único vetor $\boldsymbol{x}' \in \mathbb{V}$, indicado por $-\boldsymbol{x}$, tal que $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{x}' = \boldsymbol{x} + (-\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$.

II) A cada vetor $\boldsymbol{x} \in \mathbb{V}$ e a cada número complexo α, corresponde um vetor $\alpha\boldsymbol{x} \in \mathbb{V}$, com as propriedades:

a) $\alpha(\beta\, \boldsymbol{x}) = (\alpha\beta)\boldsymbol{x}, \beta \in C$;

b) $(\alpha + \beta)\boldsymbol{x} = \alpha\, \boldsymbol{x} + \beta\, \boldsymbol{x}$;

c) $\alpha(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) = \alpha\boldsymbol{x} + \alpha\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{V}$;

d) $1\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}, \quad \forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{V}$.

Combinação Linear de Vetores — Um vetor $\boldsymbol{x} \in \mathbb{V}$ é uma *combinação linear* de $\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n \in \mathbb{V}$, se existirem números complexos $\alpha_1, \cdots, \alpha_n$ tais que:

$$\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \boldsymbol{x}_i \,.$$

Revisão: conceitos básicos de álgebra linear

Definições Básicas:

Dependência Linear de Vetores — Um conjunto de n vetores não nulos $\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n \in \mathbb{V}$, são *linearmente dependentes* (LD) se existirem números complexos $\alpha_1, \cdots, \alpha_n$ não simultaneamente nulos tais que:

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \boldsymbol{x}_i = 0$$

$\Longrightarrow$ se só for satisfeita para $\alpha_1 = \cdots = \alpha_n = 0$, então $\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n$ são *linearmente independentes* (LI)

Espaço Vetorial $\boldsymbol{n}$-dimensional — Um espaço vetorial $\mathbb{V}$ é n-dimensional se:

1. $\exists$ conjuntos de n vetores $\mathrm{LI} \in \mathbb{V}$;
2. $\forall$ conjunto de $n + 1$ vetores $\in \mathbb{V}$ é LD.

Espaço Vetorial ∞-dimensional — Um espaço vetorial é ∞-dimensional se, para qualquer inteiro k, for possível encontrar k vetores LI $\in$ a este espaço.

Base do Espaço Vetorial — Um conjunto de n vetores não nulos $\{\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n\}$, LI, é uma base do espaço n-dimensional se todo vetor $\boldsymbol{x} \in$ a este espaço puder ser escrito como

$$\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i \boldsymbol{e}_i$$

$\Longrightarrow$ essa representação é única e num espaço n-dimensional qq conjunto de n vetores não nulos e LI forma uma base.

Lucy V.C. Assali

Revisão: conceitos básicos de álgebra linear

Definições Básicas:

Produto Escalar — É uma função que a cada par ordenado de vetores $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{V}$ associa um número complexo $(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y})$ com as propriedades

a)$(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x})^*$;

b) se $\boldsymbol{p} = \alpha\boldsymbol{y} + \beta\boldsymbol{z}$, com $\alpha, \beta \in C$, então $(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{p}) = \alpha(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y}) + \beta(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{z})$;

c) $(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}) \geq \mathbf{0}$, com $(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$ se, e somente se, $\boldsymbol{x} = \mathbf{0}$.

Norma de um vetor — A norma de um vetor $\boldsymbol{x}$, não nulo, é escrita como $||\boldsymbol{x}|| = (\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x})^{1/2}$ e o vetor $\boldsymbol{y} = \frac{e^{i\delta}}{||\boldsymbol{x}||}\boldsymbol{x}$, com $\delta \in \mathbb{R}$, tem norma unitária. Um vetor de norma unitária é dito *normalizado* e o procedimento de se obter $\boldsymbol{y}$ a partir de $\boldsymbol{x}$, como definido acima, é denominado *normalização* $\Longrightarrow$ qualquer vetor não nulo pode ser normalizado e o resultado é determinado a menos de uma fase $e^{i\delta}$.

Espaço Euclidiano Complexo — $\mathbb{E}_n^{(c)}$ $\Longrightarrow$ é um espaço vetorial n-dimensional munido de produto escalar.

Vetores Ortogonais — Os vetores $\boldsymbol{x}$ e $\boldsymbol{y}$ são ortogonais se $(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y}) = 0$. Um conjunto de vetores *ortogonal* é composto por vetores ortogonais dois a dois. Os vetores não nulos de um conjunto ortogonal são LI.

Conjunto Ortonormal de Vetores — Um conjunto de k vetores não nulos $\{\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_k\}$ é ortonormal se $\left(\boldsymbol{x}_i|\boldsymbol{x}_j\right) = \delta_{ij}$ para todo $i, j = 1, \cdots, k$.

Base Ortonormal — Uma base que consiste de vetores ortonormais.

Revisão: conceitos básicos de álgebra linear

Operadores Lineares:

Operadores — $\hat{F}$ é um operador e define uma regra que associa $\boldsymbol{x} \in \mathbb{V}$ a um outro vetor $\hat{F}\boldsymbol{x}$ também $\in \mathbb{V}$.

Domínio e Contradomínio de um Operador — Um conjunto $\mathbb{S}$ de vetores $\boldsymbol{x}$ para o qual $\hat{F}\boldsymbol{x}$ é definido é o *domínio* do operador $\hat{F}$. O conjunto de todos os vetores $\hat{F}\boldsymbol{x}$ é o *contradomínio* ou imagem do operador $\hat{F}$.

Operador Linear — $\hat{O}$ é um operador linear se: $\hat{O}(\alpha\boldsymbol{x} + \beta\boldsymbol{y}) = \alpha\left(\hat{O}\boldsymbol{x}\right) + \beta(\hat{O}\boldsymbol{y})$.

Álgebra de Operadores Lineares — Sejam $\hat{A}$ e $\hat{B}$ operadores lineares em um espaço $\mathbb{S}$ de vetores $\boldsymbol{x}$:

a) $\hat{A} = \hat{B} \Longrightarrow \hat{A}\boldsymbol{x} = \hat{B}\boldsymbol{x}, \quad \forall\, \boldsymbol{x} \in \mathbb{S}$

b) adição: $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B} \Longrightarrow \hat{C}\boldsymbol{x} = \hat{A}\boldsymbol{x} + \hat{B}\boldsymbol{x}$, $\forall\, \boldsymbol{x} \in \mathbb{S}$

c) multiplicação: $\hat{D} = \hat{A} \cdot \hat{B} \Longrightarrow \hat{D}\boldsymbol{x} = (\hat{A} \cdot \hat{B})\boldsymbol{x} = \hat{A} \cdot (\hat{B}\boldsymbol{x})$

d) potência: $\hat{A}^m\boldsymbol{x} = \underbrace{\hat{A} \cdots \hat{A}}_{m \text{ fatores}}\,\boldsymbol{x}$

Operador Adjunto — Um operador $\hat{X}$ satisfazendo $(\boldsymbol{x}|\hat{X}|\boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{y}|\hat{A}|x)^*, \forall\, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{V}$, com produto escalar definido, é chamado de operador adjunto de $\hat{A}$ e é denotado por $\hat{A}^\dagger$. Assim $(\boldsymbol{x}|\hat{A}^\dagger|\boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{y}|\hat{A}|x)^*$. Propriedades:

a) $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$

b) $(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$

Operador Hermiteano — É um operador $\hat{H}$ que satisfaz: $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$.

Operador Unitário — É um operador $\hat{U}$ que satisfaz: $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$.

Lucy V. C. Assali

Revisão: conceitos básicos de álgebra linear

Operadores Lineares e Matrizes:

$$\boldsymbol{x} = \sum_{j=1}^{n} x_j \boldsymbol{e}_j \quad \Longrightarrow \boldsymbol{x} \in \mathbb{V}$$ expresso em termos das componentes x_j em relação à base ortonormal $\{\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n\}$

$\boldsymbol{y} = \hat{L}\,\boldsymbol{x} \;\Longrightarrow \boldsymbol{y} \in \mathbb{V}$ e $\hat{L}$ um operador linear $\Longrightarrow$ $\boldsymbol{y} = \hat{L}\sum_{j=1}^{n} x_j \boldsymbol{e}_j = \sum_{j=1}^{n} x_j \underbrace{\hat{L}\,\boldsymbol{e}_j}$

$$\hat{L}\,\boldsymbol{e}_j = \sum_{k=1}^{n} L_{kj}\,\boldsymbol{e}_k\,, \qquad j = 1, \cdots, n$$

$L_{kj} \rightarrow n^2$ números complexos que descrevem o efeito da aplicação de $\hat{L}$ em todos os vetores da base $\{\boldsymbol{e}_j\}$. Uma matriz $n \times n$ cujos elementos são os n^2 números complexos L_{kj} é a *matriz* L *de representação do operador linear* $\hat{L}$ com relação à base $\{\boldsymbol{e}_j\}$.

Relação entre as componentes $\{y_k\}$ de $\boldsymbol{y}$ com as componentes $\{x_j\}$ de $\boldsymbol{x}$ relativo à base $\{\boldsymbol{e}_k\}$:

$$\boldsymbol{y} = \sum_{k=1}^{n} y_k \boldsymbol{e}_k = \hat{L}\,\boldsymbol{x} = \sum_{j=1}^{n} x_j \left(\sum_{k=1}^{n} L_{kj}\,\boldsymbol{e}_k\right) = \sum_{k=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{n} L_{kj} x_j\right)\boldsymbol{e}_k \Longrightarrow L_{kj} = \left(\boldsymbol{e}_j \middle| \hat{L}\,\boldsymbol{e}_k\right)$$

$\therefore\, y_k = \sum_{j=1}^{n} L_{kj} x_j\,, k = 1, \cdots, n \;\Longrightarrow$ notação matricial: $\mathrm{Y} = \mathrm{L}\,\mathrm{X}$, onde X e Y são matrizes coluna com componentes $\{x_k\}$ e $\{y_k\}$

Revisão: conceitos básicos de álgebra linear

Operadores Lineares e Matrizes:

Mudança de base: $\{\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n\} \Longrightarrow \{\boldsymbol{e}'_1, \cdots, \boldsymbol{e}'_n\}$, também ortoganal $\therefore \boldsymbol{e}_j = \sum_{k=1}^{n} P_{kj}\boldsymbol{e}'_k \,, j = 1, \cdots, n$

$\Longrightarrow \boldsymbol{x} \in \mathbb{V}$ expresso em termos das componentes x'_k em relação à base ortonormal $\{\boldsymbol{e}'_1, \cdots, \boldsymbol{e}'_n\} \Rightarrow$

$$\boldsymbol{x} = \sum_{j=1}^{n} x_j\, \boldsymbol{e}_j \Longrightarrow \boldsymbol{x} = \sum_{j=1}^{n} x_j \left(\sum_{k=1}^{n} P_{kj}\, \boldsymbol{e}'_k\right) = \sum_{k=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{n} P_{kj} x_j\right)\boldsymbol{e}'_k \Longrightarrow x'_k = \sum_{j=1}^{n} P_{kj} x_j \,, k = 1, \cdots, n \Longrightarrow \mathrm{X}' = \mathrm{P}\,\mathrm{X}$$

Matriz Ortogonal — É uma matriz P com a propriedade: $P^t = P^{-1}$ $(P^t P = I) \Longrightarrow$ se $\{\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n\}$ é uma base ortonormal de $\mathbb{V}$ e

$$\boldsymbol{e}'_i = \sum_{j=1}^{n} P_{ij}\, \boldsymbol{e}_j, \qquad i = 1, \cdots, n$$

então $\{\boldsymbol{e}'_1, \cdots, \boldsymbol{e}'_n\}$ também é uma base ortonormal de $\mathbb{V}$ e o determinante de P é $+1$ ou -1.

Revisão: conceitos básicos de álgebra linear

Operadores Lineares e Matrizes:

Transformação de Semalhança

Se $Y = L\,X$, $Y' = P\,Y$ e $X' = P\,X$ $\Longrightarrow Y' = P\,L\,X = P\,L\,P^{-1}X'$

Então $Y' = L'\,X'$ com $\boxed{L' = P\,L\,P^{-1}}$ $\Longrightarrow$ ***transformação de semalhança***

L' e L são ***equivalentes*** $\Rightarrow$ representam o mesmo operador $\hat{L}$ com relação a duas bases diferentes em $\mathbb{V}$

Propriedades:

1. Os *traços* de L e L' são iguais.
2. Os *determinantes* de L e L' são iguais.

Representação de um Grupo

Representação ⇒ uso de entidades matemáticas (homomórficas ao grupo original)

Matrizes quadradas lineares e não singulares: $\mathbf{\Gamma}(A)$ para cada elemento A do grupo $\mathbb{G}$:

$$\mathbf{\Gamma}(A)\mathbf{\Gamma}(B) = \mathbf{\Gamma}(AB)$$

Matrizes – satisfazem a tabela de multiplicação do grupo e $\mathbf{\Gamma}(\mathrm{E}) = \mathrm{E} = \mathbf{I}$ (matriz identidade)

– cada elemento do grupo é representado por uma matriz diferente

Dimensionalidade da representação – número de linhas e colunas da matriz

Propriedades das representações matriciais:

a) $\mathbf{\Gamma}(A) = 0$ ou 1 → representações triviais do grupo $\mathbb{G}$

b) $\mathbf{\Gamma}(B^{-1}) = \mathbf{\Gamma}^{-1}(B)$

c) Se $\underbrace{\mathbf{\Gamma}'(A) = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{\Gamma}(A)\mathbf{S}}$ então $\mathbf{\Gamma}'(A)\mathbf{\Gamma}'(B) = \mathbf{\Gamma}'(AB) \Longrightarrow \mathbf{\Gamma}'(A)\mathbf{\Gamma}'(B) = [\mathbf{S}^{-1}\mathbf{\Gamma}(A)\mathbf{S}][\mathbf{S}^{-1}\mathbf{\Gamma}(B)\mathbf{S}] =$

$$\mathbf{S}^{-1}\mathbf{\Gamma}(A)\mathbf{\Gamma}(B)\mathbf{S} = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{\Gamma}(AB)\mathbf{S} = \mathbf{\Gamma}'(AB)$$

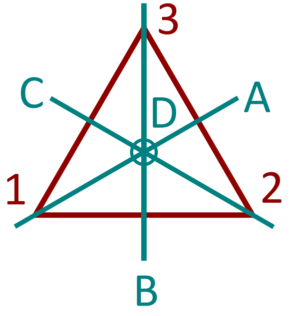
uma transformação de semelhança não altera as equações matriciais e as matrizes $\mathbf{\Gamma}'$, como as matrizes $\mathbf{\Gamma}$, também formam uma representação equivalente do grupo $\mathbb{G}$

essa transformação pode ser uma mudança de base

Representação de um Grupo

Exemplo ⇒ Grupo de ordem 6: grupo do triângulo equilátero ou grupo de permutação $\mathcal{P}_3$ (isomorfos)

	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
A	A	E	D	F	B	C
B	B	F	E	D	C	A
C	C	D	F	E	A	B
D	D	C	A	B	F	E
F	F	B	C	A	E	D



$A \implies$ *rotação de π em torno de* A

$B \implies$ *rotação de π em torno de* B

$C \implies$ *rotação de π em torno de* C

$D \implies$ *rotação de $2[(2\pi)/3]$ em torno de* D

$F \implies$ *rotação de $(2\pi)/3$ em torno de* D

$\mathrm{E} \implies$ *identidade*

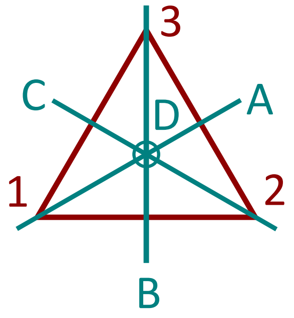
$$\mathrm{E} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \qquad A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \qquad D = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \qquad F = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

Representação de um Grupo

Exemplo ⇒ Grupo de ordem 6: grupo do triângulo equilátero ou grupo de permutação $\mathcal{P}_3$ (isomorfos)

	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
A	A	E	D	F	B	C
B	B	F	E	D	C	A
C	C	D	F	E	A	B
D	D	C	A	B	F	E
F	F	B	C	A	E	D



$$\mathrm{E} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \qquad A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \qquad D = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \qquad F = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

Grupo de matrizes quadradas 2×2 que possui a mesma tabela de multiplicação (triângulo é uma figura 2D) ⇒

$$\boldsymbol{\Gamma}(\mathrm{E}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{\Gamma}(A) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{\Gamma}(B) = \begin{bmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\Gamma}(C) = \begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{\Gamma}(D) = \begin{bmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{\Gamma}(F) = \begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix}$$

$$\Longrightarrow \boldsymbol{\Gamma}(A)\boldsymbol{\Gamma}(F) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{\Gamma}(C)$$

$$\Longrightarrow \boldsymbol{\Gamma}(F)\boldsymbol{\Gamma}(A) = \begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{\Gamma}(B)$$

Lucy V.C. Assali

Redutibilidade de uma representação

Representações redutíveis (RR) e irredutíveis (RI) $\Rightarrow$ uma representação pode ser obtida tomando-se duas ou mais representações para construir uma nova representação de dimensionalidade maior (matrizes maiores) através da combinação das matrizes. Para o elemento A, por exemplo:

$$\boldsymbol{\Gamma}(A) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Gamma}^1(A) & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\Gamma}^2(A) \end{pmatrix}$$

Matrizes representando o elemento A nas representações originais

representação de A na nova representação maior $\Rightarrow$ representação $\boldsymbol{\Gamma}(A)$ é dita redutível

Redutibilidade: pode ser ocultada pela aplicação de uma transformação de semelhança que mistura aleatoriamente linhas e colunas, levando a uma representação equivalente que não está na forma de blocos, ou vice-versa.

Critério para redutibilidade: é possível reduzir as matrizes que representam *todos* os elementos do grupo na forma de blocos (com a mesma estrutura) pela *mesma* transformação de semelhança. Se tal transformação não for possível então a representação é dita irredutível

Redutibilidade de uma representação

Representações redutíveis (RR) e irredutíveis (RI) ⇒ uma representação pode ser obtida tomando-se duas ou mais representações para construir uma nova representação de dimensionalidade maior (matrizes maiores) através da combinação das matrizes. Para o elemento A, por exemplo:

$$\boldsymbol{\Gamma}(A) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Gamma}^1(A) & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\Gamma}^2(A) \end{pmatrix}$$

Matrizes representando o elemento A nas representações originais

representação de A na nova representação maior ⇒ representação $\boldsymbol{\Gamma}(A)$ é dita redutível

Redutibilidade: pode ser ocultada pela aplicação de uma transformação de semelhança que mistura aleatoriamente linhas e colunas, levando a uma representação equivalente que não está na forma de blocos, ou vice-versa.

Critério para redutibilidade: é possível reduzir as matrizes que representam *todos* os elementos do grupo na forma de blocos (com a mesma estrutura) pela *mesma* transformação de semelhança. Se tal transformação não for possível então a representação é dita irredutível ⇒ não pode ser expressa em termos de uma representação de menor dimensionalidade. Veremos que o número de RI é igual ao número de classes do grupo de ponto.

Redutibilidade de uma representação

Representações redutíveis (RR) e irredutíveis (RI) ⇒ uma representação pode ser obtida tomando-se duas ou mais representações para construir uma nova representação de dimensionalidade maior (matrizes maiores) através da combinação das matrizes. Para o elemento A, por exemplo:

$$\mathbf{\Gamma}(A) = \begin{pmatrix} \mathbf{\Gamma}^1(A) & 0 \\ 0 & \mathbf{\Gamma}^2(A) \end{pmatrix}$$

Matrizes representando o elemento A nas representações originais

representação de A na nova representação maior ⇒ representação $\mathbf{\Gamma}(A)$ é dita redutível

$\Longrightarrow \mathbf{\Gamma}(A)$ redutível

transformação de semelhança

$$\mathbf{S}^{-1}\mathbf{\Gamma}'(A)\mathbf{S} = \mathbf{\Gamma}(A) = \begin{pmatrix} \mathbf{\Gamma}^1(A) & 0 \\ 0 & \mathbf{\Gamma}^2(A) \end{pmatrix} = \mathbf{\Gamma}^1(A) \oplus \mathbf{\Gamma}^2(A)$$

representação que não está na forma de blocos

representação que está na forma de blocos

Definição ⇒ a matriz $\mathbf{\Gamma}(A)$ é dita ser a $\boxed{\text{soma direta}}$ de $\mathbf{\Gamma}^1(A)$ e $\mathbf{\Gamma}^2(A)$. Em geral: $\mathbf{\Gamma} = \sum a_i \mathbf{\Gamma}^i$, com $a_i \in \mathbb{N}$, ou seja $\mathbf{\Gamma} = a_1\mathbf{\Gamma}^1 \oplus \cdots \oplus a_n\mathbf{\Gamma}^n \oplus \cdots \oplus a_p\mathbf{\Gamma}^p$. Observação: As matrizes $\mathbf{\Gamma}^i$ são RI.

Lucy V. C. Assali

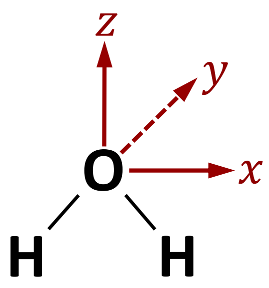
Representação matricial das operações de simetria de um grupo de ponto

- ✓ Cada operação de simetria de um grupo de ponto pode ser expressa como uma transformação matricial do tipo

Novas coordenadas = (matriz transformação) antigas coordenadas

- ✓ As matrizes devem se comportar da mesma forma que os elementos do grupo e $\mathbf{\Gamma}(A)\mathbf{\Gamma}(B) = \mathbf{\Gamma}(AB)$
- ✓ A representação deve estar em correspondência com a tabela de multiplicação do grupo
- ✓ A forma dessas matrizes depende da base escolhida
- ✓ Muitas representações são, em geral, possíveis e a ordem das matrizes pode variar

Exemplo ⇒ sistema: molécula de água
base: vetores cartesianos



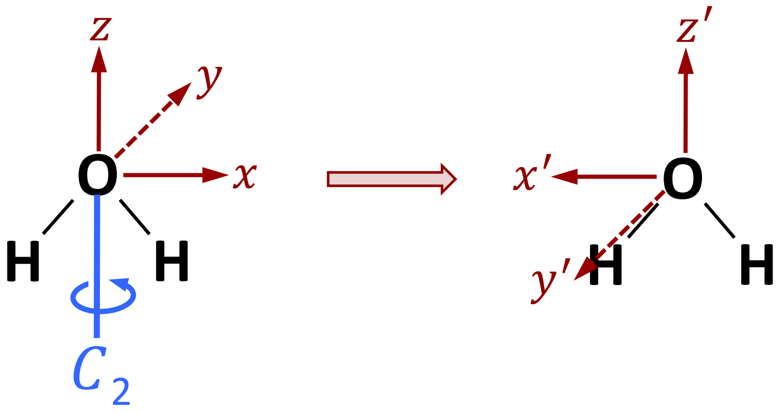
sistema de coordenadas

$$x = \begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix} \quad y = \begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix} \quad z = \begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$$

Lucy V.C. Assali

Representação matricial das operações de simetria de um grupo de ponto

$C_2 \Rightarrow$ Rotação própria de $2\pi/2$ em torno de z



$x' =$ novo $x = -x$
$y' =$ novo $y = -y$
$z' =$ novo $z = z$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{\text{matriz que representa } C_2} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -y \\ z \end{bmatrix}$$

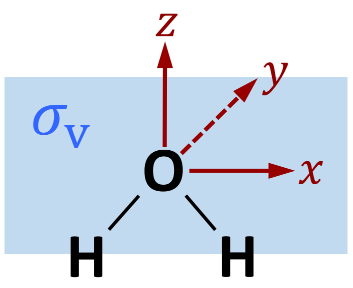
$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -y \\ z \end{bmatrix} \Longrightarrow \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -y \\ z \end{bmatrix}$$

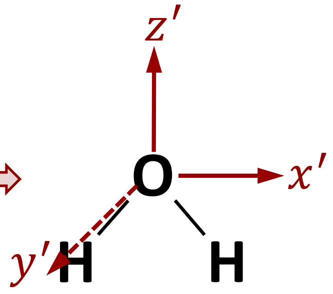
$$\begin{bmatrix} \text{novas} \\ \text{coordenadas} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{matriz de} \\ \text{transformação} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \text{velhas} \\ \text{coordenadas} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{novas coordenadas} \\ \text{em termos das velhas} \end{bmatrix}$$

Lucy V.C. Assali

Representação matricial das operações de simetria de um grupo de ponto

$\sigma_\mathrm{v} \Rightarrow$ Reflexão no plano xz

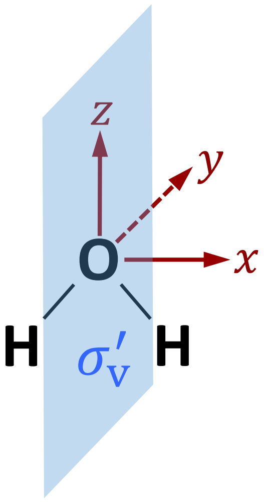


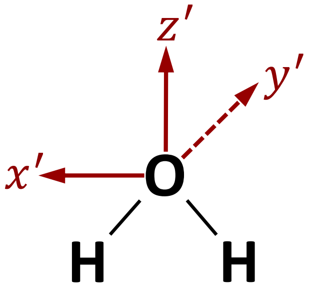


$x' =$ novo $x = x$
$y' =$ novo $y = -y$
$z' =$ novo $z = z$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{\text{matriz que representa } \sigma_\mathrm{v}} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ -y \\ z \end{bmatrix}$$

$\sigma'_\mathrm{v} \Rightarrow$ Reflexão no plano yz





$x' =$ novo $x = -x$
$y' =$ novo $y = y$
$z' =$ novo $z = z$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{\text{matriz que representa } \sigma'_\mathrm{v}} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

Lucy V.C. Assali

Representação matricial das operações de simetria de um grupo de ponto

Uma representação possível do grupo $C_{2\mathrm{v}}$, associada à base (x, y, z), é formada pelas matrizes:

$$\boldsymbol{\Gamma}(\mathrm{E}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\Gamma}(C_2) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\Gamma}(\sigma_\mathrm{v}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\Gamma}(\sigma_\mathrm{v}') = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Exemplo de verificação de representações matriciais:

$$\boxed{\boldsymbol{\Gamma}(C_2)\boldsymbol{\Gamma}(\sigma_\mathrm{v}) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \boldsymbol{\Gamma}(\sigma_\mathrm{v}')}$$

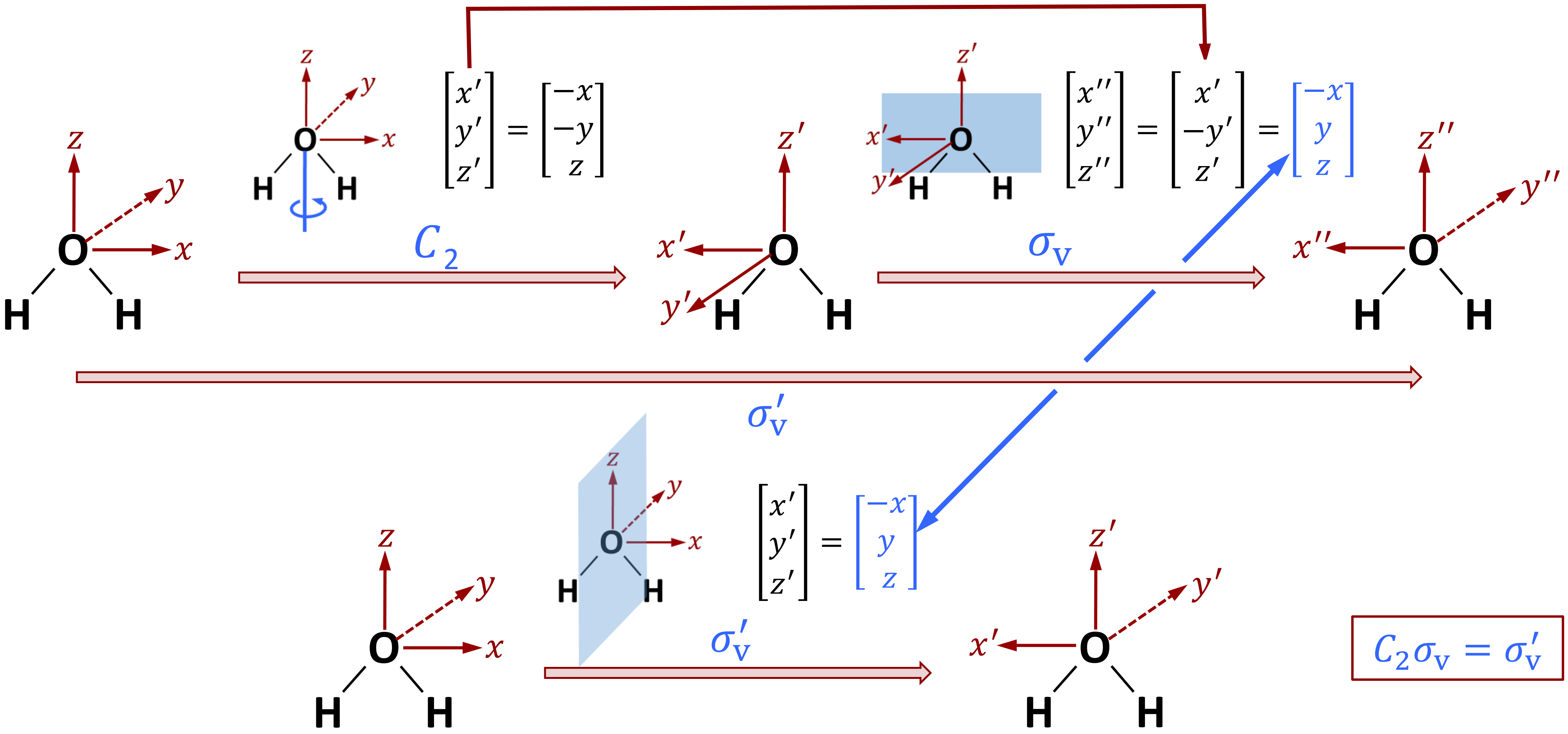
$$[\boldsymbol{\Gamma}(C_2)\,\boldsymbol{\Gamma}(\sigma_\mathrm{v}')]\boldsymbol{\Gamma}(\sigma_\mathrm{v}) = \left\{\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\right\}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \boldsymbol{\Gamma}(\mathrm{E})$$

$$[\boldsymbol{\Gamma}(C_2)\boldsymbol{\Gamma}(\sigma_\mathrm{v})]\boldsymbol{\Gamma}(\sigma_\mathrm{v}') = \left\{\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\right\}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \boldsymbol{\Gamma}(\mathrm{E})$$

Lucy V.C. Assali

Representação matricial das operações de simetria de um grupo de ponto

Exemplo de verificação de representações matriciais:



$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -y \\ z \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x' \\ -y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

$$\boxed{C_2\sigma_v = \sigma'_v}$$

Lucy V.C. Assali

Representação matricial das operações de simetria de um grupo de ponto

As matrizes $\mathbf{\Gamma}$ obtidas que representam as operações de simetria do grupo de ponto $C_{2\mathrm{v}}$, associadas à base (x, y, z), já se encontram na forma de blocos, na forma de matrizes 1×1:

$$\mathbf{\Gamma}(\mathrm{E}) = \begin{bmatrix} [1] & 0 & 0 \\ 0 & [1] & 0 \\ 0 & 0 & [1] \end{bmatrix} \quad \mathbf{\Gamma}(C_2) = \begin{bmatrix} [-1] & 0 & 0 \\ 0 & [-1] & 0 \\ 0 & 0 & [1] \end{bmatrix} \quad \mathbf{\Gamma}(\sigma_\mathrm{v}) = \begin{bmatrix} [1] & 0 & 0 \\ 0 & [-1] & 0 \\ 0 & 0 & [1] \end{bmatrix} \quad \mathbf{\Gamma}(\sigma'_\mathrm{v}) = \begin{bmatrix} [-1] & 0 & 0 \\ 0 & [1] & 0 \\ 0 & 0 & [1] \end{bmatrix}$$

$\Longrightarrow$ podemos concluir que a representação matricial $\mathbf{\Gamma}$ de dimensão 3 das operações E, C_2, σ_v, σ'_v é *redutível* e que as 3 representações são formadas por matrizes 1×1:

	E	C_2	σ_v	σ'_v
1.	$[1]$,	$[-1]$,	$[1]$,	$[-1]$
2.	$[1]$,	$[-1]$,	$[-1]$,	$[1]$
3.	$[1]$,	$[1]$,	$[1]$,	$[1]$

Como este grupo possui 4 classes, então deve existir mais uma representação, além destas 3, que iremos obter mais adiante.

não podem mais ser reduzidas através de transformações do tipo $\mathbf{\Gamma}'(A) = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{\Gamma}(A)\mathbf{S}$, ou seja, são *irredutíveis*

- Qualquer representação $\mathbf{\Gamma}$ redutível de um grupo é composta por duas ou mais representações irredutíveis.

Lucy V. C. Assali