

# Bases da Teoria da Representação e Aplicações em Física

114388/2020-2

Vinícius Pereira Pinto  
Orientador: Igor Mencattini

Período: 03/08/2019 a 31/07/2021

# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>2</b>
1.1	Algumas Definições Iniciais de Grupo e Representação . . . . .	2
1.1.1	Grupos . . . . .	2
1.1.2	Representações . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Propriedades de Grupos e Representações</b>	<b>5</b>
2.1	SO(3), SU(2), SO(4) e suas propriedades . . . . .	5
2.1.1	Definições . . . . .	5
2.1.2	Ângulos de Euler . . . . .	6
2.1.3	Teorema Espectral e Recobrimento Duplo . . . . .	6
2.1.4	Representação de SO(3) em $L^2(\mathbb{R}^3)$ . . . . .	7
2.1.5	Representações de SU(2) em Polinômios Homogêneos de Duas Variáveis .	7
2.2	Representações em Mecânica Quântica . . . . .	8
2.3	Composição de Representações . . . . .	9
2.3.1	Subrepresentações . . . . .	9
2.3.2	Subrepresentações na Mecânica Quântica . . . . .	10
2.3.3	Soma Direta e Produto Direto . . . . .	11
2.3.4	Composições de Estados . . . . .	11
2.4	Representações Irredutíveis . . . . .	11
2.4.1	Definições e o <i>Lema de Schur</i> . . . . .	12
2.4.2	Integração Invariante . . . . .	12
2.4.3	Decomposições Isotípicas . . . . .	14
2.4.4	Classificação das Representações Irredutíveis de SU(2) e SO(3) . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Estados Elementares de um Sistema Quântico</b>	<b>16</b>
<b>4</b>	<b>Representações e Simetrias do Átomo de Hidrogênio</b>	<b>17</b>
4.1	Representações de SO(3) e Harmônicos Esféricos . . . . .	17
4.2	Álgebra de simetria do átomo de Hidrogênio . . . . .	18
4.2.1	Definições de Álgebras de Lie . . . . .	18
4.2.2	Representações de Álgebras de Lie . . . . .	21
4.2.3	Representações Irredutíveis de su(2) e so(4) . . . . .	22
4.3	O Átomo de Hidrogênio . . . . .	23
4.3.1	Alguns Conceitos Básicos de Mecânica Quântica . . . . .	23
4.3.2	Estados Confinados do Átomo de Hidrogênio . . . . .	25
4.3.3	Representação de so(4) do Hidrogênio . . . . .	26
<b>5</b>	<b>Visualização dos Orbitais Atômicos</b>	<b>28</b>
5.1	Harmônicos Esféricos do Átomo de Hidrogênio . . . . .	28
5.2	Funções de Onda do Elétron . . . . .	28
5.3	Visualização das Soluções Calculadas em Python . . . . .	29
<b>A</b>	<b>Tabela dos Harmônicos Esféricos</b>	<b>33</b>
<b>B</b>	<b>Tabela das Funções de Onda</b>	<b>34</b>

# 1 Introdução

A teoria da representação de grupos tem uma larga lista de aplicações na matemática, física e química, sendo algumas delas a análise de estruturas atômicas, cristalografia e a classificação das simetrias de um sistema físico. Esta teoria faz uso de álgebra linear e abstrata e da análise de forma combinada que formando bases matemáticas da mecânica quântica, permitindo as previsões dos estados elementares dos sistemas quânticos a partir de suas simetrias.

Este projeto tem como objetivo expor o estudante a bases da teoria da representação de grupos de Lie compactos com o intuito de analisar os orbitais eletrônicos e o momento angular dos modelos atômicos, com ênfase no caso particular do átomo de hidrogênio, uma vez que sua generalização fornece análises para outros átomos e permite a introdução da tabela periódica dos elementos.

Por isso, este trabalho apresenta um extenso desenvolvimento das ferramentas matemáticas, a aplicação para simetria esférica do átomo de hidrogênio, a forma funcional do potencial de Coulomb e uma visualização dos orbitais atômicos a partir da representação da função de onda do elétron por harmônicos esféricos.

A metodologia da pesquisa consiste em um estudo dirigido do livro **Linearity, Symmetry, and Prediction in the Hydrogen Atom** [1] de SINGER (2005), que é principal referência para todo o conteúdo aqui apresentado. Em particular, foi primeiramente analisada a representação dos estados elementares dos sistemas físicos, mais especificamente sistemas quânticos, que, em uma segunda etapa, foi aplicada ao caso de átomo de hidrogênio.

O estudo se resume nos seguintes pontos:

1. Estudo de Grupos, Representações, Álgebras de Lie e Representações de Álgebras de Lie, apresentando definições e propriedades.
2. Discussão sobre Representação e Estados Elementares de sistemas físicos, mais especificamente sistemas quânticos.
3. Aplicações de Teoria da Representação para o Átomo de Hidrogênio e definições usadas na Tabela Periódica.
4. Estudo de aplicações para visualização de orbitais atômicos calculando densidade de probabilidade da função de onda do elétron usando representação por harmônicos esféricos.

## 1.1 Algumas Definições Iniciais de Grupo e Representação

### 1.1.1 Grupos

Inicialmente é necessário definir o conceito de grupo. *Grupo* é um conjunto de elementos  $G$  com uma operação binária fechada  $G \times G \rightarrow G$  em que a operação é associativa, existe um elemento identidade e existe um elemento inverso para cada elemento do grupo.

Alguns exemplos de grupos utilizados no trabalho:

1. Grupo Geral Linear -  $\mathcal{GL}(\mathbb{C}^n)$ : grupo de matrizes complexas  $n \times n$  invertíveis com multiplicação de matrizes como operador.
2. Grupo Especial Unitário -  $SU(V)$ : grupo de operadores unitários no espaço vetorial  $V$ , que preserva o produto escalar hermitiano, com determinante igual a 1.

3. Circle Group -  $\mathbb{T}(e^{i\theta}, \cdot)$ : é o grupo de todos os números complexos de módulo igual a 1, ou seja,  $\mathbb{T} := \{z \in \mathbb{C} : |z| = 1\}$ .
4. Grupo Ortogonal Especial -  $SO(n)$ : é o grupo de transformações em  $\mathbb{R}^n$  em que  $SO(n) := \{M \in \mathcal{GL}(\mathbb{R}^n) : M^T M = I \text{ e } \det M = 1\}$ .
5.  $\mathcal{T}(S, S)$ : grupo das transformações invertíveis de  $S$  em  $S$ , onde  $S$  é um conjunto qualquer.
6. Quaternions -  $\mathbb{H}$ : é o grupo formado pelo conjunto de números da forma  $a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k}$  onde  $a, b, c, d \in \mathbb{R}$  e  $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$  são unidades imaginárias linearmente independentes com multiplicação como operação.

No trabalho também são definidos alguns conceitos. *Homomorfismo de grupo* é quando um há uma função  $\phi$  que mapeie um grupo em outro tal que  $\phi(gh) = \phi(g)\phi(h)$ . A composição de homomorfismos também é um homomorfismo de grupo. Quando a função é injetora e sobrejetora, diz-se que a função é um *isomorfismo de grupo*. Isto significa que dois grupos com mesmo significado intuitivo aplicados em diferentes contextos são isomórficos. Quando o conjunto de elementos é uma variedade diferenciável, cuja multiplicação e inversa são funções diferenciáveis, é chamado de *Grupo de Lie*. E se  $\phi$  é diferenciável, diz-se que  $\phi$  é um *homomorfismo de grupos de Lie*. Se  $\phi$  é isomorfismo e  $\phi^{-1}$  é diferenciável, então  $\phi$  é um *isomorfismo de grupos de Lie*.

### 1.1.2 Representações

Antes de definir o que é uma representação, é necessário entender a definição de *ação*. Uma ação de um grupo num conjunto é uma tripla  $(G, S, \sigma)$  onde  $G$  é um grupo,  $S$  é um conjunto e  $\sigma$  é um homomorfismo de  $G$  para  $\mathcal{T}(S, S)$ . A representação linear de um grupo é uma interpretação do mesmo em termos de operadores lineares.

Por exemplo, tem-se o grupo  $\mathbb{R}$  com adição como operação. Para cada elemento  $t$  no grupo, é definido  $\rho(t) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto x + t$ . Esta ação é chamada de *ação de translação*.

Fixando um espaço vetorial  $V$  e atribuí-se para cada elemento do grupo uma transformação linear de  $V$  de modo que a multiplicação do grupo corresponda a composição de transformações lineares.

Com isso, define-se como *representação linear* a tripla  $(G, V, \rho)$  onde  $G$  é um grupo,  $V$  é um espaço vetorial e  $\rho : G \rightarrow \mathcal{GL}(V)$  é um homomorfismo de grupo. Chama-se  $\rho$  de representação de  $G$  em  $V$ . Se  $G$  é um grupo de Lie e  $\rho$  é um homomorfismo de grupo de Lie, então  $(G, V, \rho)$  é uma *representação de grupo de Lie*.

Retomando o exemplo anterior, tem-se que  $\rho(t)$  só é uma representação no caso onde  $t = 0$ , a única condição que a transformação é linear. Com isso fica claro que uma representação é um tipo específico de ação.

Mas dada qualquer ação  $(G, S, \sigma)$ , há uma representação  $(G, V, \rho)$  onde  $V$  é definido como o espaço vetorial de funções complexas em  $S$ , onde  $\rho$  é dado por:

$$\begin{aligned} \rho(g) \cdot f : S &\rightarrow V \\ s &\mapsto f(\sigma(g^{-1})s) \end{aligned}$$

$\forall g \in G$  e cada  $f \in V$ . Diz-se que a ação  $(G, S, \sigma)$  é induzida pela representação  $(G, V, \rho)$ . Ou pode-se dizer que  $\rho$  é a representação correspondente a ação  $(G, S, \sigma)$ .

Analogamente aos grupos que podem ser os mesmos intuitivamente, o mesmo pode ocorrer com representações. Assim, supondo  $(G, V, \rho)$  e  $(G, W, \tilde{\rho})$  são representações do mesmo grupo  $G$ . Suponha  $T : V \rightarrow W$  é uma transformação linear. Então  $T$  é um homomorfismo das representações se e só se  $\forall g \in G$  tem-se  $\tilde{\rho}(g) \circ T = T \circ \rho(g)$ . Quando  $T$  é um homomorfismo de representações, diz-se que  $T$  entrelaça as duas representações. Também, tem-se que o conjunto de homomorfismos de representação de  $V$  em  $W$  forma um espaço vetorial.

Também analogamente aos grupos, se  $T$  é injetora e  $T^{-1} : W \rightarrow V$  é um homomorfismo de representações, então  $T$  é um *isomorfismo de representações*. Diz-se que as representações  $(G, V, \rho)$  e  $(G, W, \tilde{\rho})$  são isomórficas. Algumas notações comuns são  $\rho \cong \tilde{\rho}$  ou  $V \cong W$ , sendo a última mais comum pois permite o leitor conhecer o contexto das representações. Tem-se também que, se  $(G, V, \rho)$  e  $(G, W, \tilde{\rho})$  são isomórficas, então  $V$  e  $W$  têm dimensão infinita ou finita com  $\dim V = \dim W$ , elas não podem ser diferentes.

Suponha que  $V$  é um espaço de produto escalar hermitiano. A representação de grupo de Lie  $(G, V, \rho)$  é unitária, se e somente se,  $\forall g \in G$  a transformação linear  $\rho(g)$  é uma transformação unitária, ou seja, se a imagem de  $\rho$  está em  $U(V) \subset \mathcal{GL}(V)$ .

Com isso, isomorfismos de representações unitárias devem preservar a estrutura unitária. Quando o fazem, são chamados de *isomorfismos unitários de representações*. Suponha  $(G, V, \rho)$  e  $(G, W, \tilde{\rho})$ . Suponha  $V, W$  são espaços de produto escalar hermitiano. Suponha  $T : V \rightarrow W$  é isomorfismo de representação. Se  $\forall v, w \in V, \langle v, w \rangle = \langle T_v, T_w \rangle_{\sim}$ , onde  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  é o produto escalar de  $V$  e  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\sim}$  é o de  $W$ , então  $T$  é um homomorfismo unitário. Se  $T$  é um isomorfismo, chamamos de isomorfismo unitário e diz-se que as representações são isomórficas como representações lineares.

Toda representação com dimensão finita tem uma função complexa no grupo correspondente chamada *caráter da representação*. Ou seja, dada uma representação  $(G, V, \rho)$  com  $\dim V$  finita, define-se o caráter  $\chi_\rho : G \rightarrow \mathbb{C}$  da representação por:

$$\chi_\rho(g) := \text{Tr}(\rho(g)),$$

$$\forall g \in G.$$

## 2 Propriedades de Grupos e Representações

### 2.1 $SO(3)$ , $SU(2)$ , $SO(4)$ e suas propriedades

Durante o trabalho, são utilizados três importantes grupos compactos: o grupo de rotações tridimensionais  $SO(3)$  e o grupo de operadores unitários em  $\mathbb{C}^2$   $SU(2)$  que, juntos com o grupo  $\mathbb{T}$ , são necessários para entender a simetria espacial do átomo de hidrogênio. Outro grupo importante que será utilizado é o grupo de rotações no  $\mathbb{R}^4$  que é o  $SO(4)$ .

Além de definir os três grupos, será definido uma forma particular de escrever qualquer elemento de  $SU(2)$  pelo *Teorema Espectral* e depois um homomorfismo dois-para-um de  $SU(2)$  para  $SO(3)$  chamado *Recobrimento Espectral*.

#### 2.1.1 Definições

O grupo  $SO(3)$  (*Special Orthogonal Group*) é o grupo de rotações no  $\mathbb{R}^3$ . Para defini-lo, será utilizada a base canônica do espaço Euclidiano:  $\{(1, 0, 0)^T, (0, 1, 0)^T, (0, 0, 1)^T\}$ . Cada matriz do grupo possui um conjunto de três bases ortogonais que devem obedecer a regra da mão direita. A definição do grupo é:

$$SO(3) := \{M \in \mathcal{GL}(\mathbb{R}^3) : M^T M = I \text{ e } \det M = 1\}$$

O grupo  $SO(4)$  difere por ser o grupo de rotações em  $\mathbb{R}^4$ . Sua definição é semelhante à anterior, sendo:

$$SO(4) := \{M \in \mathcal{GL}(\mathbb{R}^4) : M^T M = I \text{ e } \det M = 1\}$$

Já o grupo  $SU(2)$  (*Special Unitary Group*) é o grupo de operadores lineares de  $\det = 1$  em  $\mathbb{C}^2$  que preservam o produto escalar hermitiano padrão. Ou seja, um operador  $M \in \mathbb{C}^2$  está em  $SU(2)$  se e somente se  $\langle v, w \rangle = \langle Mv, Mw \rangle$ ,  $\forall v, w \in \mathbb{C}^2$  e  $\det M = 1$ . Ele é definido por:

$$SU(2) := \{M \in \mathcal{GL}(\mathbb{C}^2) : M^* M = I \text{ e } \det M = 1\}$$

Escolhendo a base canônica de  $\mathbb{C}^2$ ,  $\{(1, 0)^T, (0, 1)^T\}$ , tem-se que outra maneira de escrever os elementos de  $SU(2)$ :

$$SU(2) := \left\{ M \in \mathcal{GL}(\mathbb{C}^2) : M = \begin{pmatrix} \alpha & -\beta^* \\ \beta & \alpha^* \end{pmatrix}; \alpha, \beta \in \mathbb{C} \text{ e } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \right\}$$

Também há um isomorfismo entre quaternions ( $\mathbb{H}$ ) e  $SU(2)$ , dado por:

$$\psi(u + x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}) := \begin{pmatrix} u + ix & -y + iz \\ y + iz & u - ix \end{pmatrix}$$

com inversa dada por:

$$\begin{pmatrix} \alpha & -\beta^* \\ \beta & \alpha^* \end{pmatrix} = \psi^{-1}(\Re(\alpha)u + \Im(\alpha)\mathbf{i} + \Re(\beta)\mathbf{j} + \Im(\beta)\mathbf{k})$$

### 2.1.2 Ângulos de Euler

Uma vez denotado o grupo  $SO(3)$ , será útil conhecer uma parametrização conhecida como *ângulos de Euler*. Essa parametrização surge para representar qualquer rotação no espaço Euclidiano tridimensional (espaço  $xyz$ ), podendo ser expresso como a rotação do eixo  $z$ , depois do eixo  $x$  e depois do eixo  $z$  novamente.

Deste modo, pode-se definir uma rotação por um ângulo  $\theta$  sobre cada eixo como:

$$\begin{aligned}\mathbf{X}_\theta &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \\ \mathbf{Y}_\theta &= \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & -\sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \\ \mathbf{Z}_\theta &= \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Algumas propriedades são: qualquer elemento de  $SO(3)$  pode ser escrito como  $\mathbf{Z}_\phi \mathbf{X}_\theta \mathbf{Z}_\psi$  para alguns  $\phi, \theta, \psi \in \mathbb{R}$ , e  $\mathbf{Y}_\theta = \mathbf{Z}_{\frac{3\pi}{2}} \mathbf{X}_\theta \mathbf{Z}_{\frac{\pi}{2}}$ .

### 2.1.3 Teorema Espectral e Recobrimento Duplo

O *Teorema Espectral* de  $SU(2)$  diz que, para dado  $U \in SU(2)$ ,  $\exists \lambda \in \mathbb{C}$  onde  $|\lambda| = 1$  (i.e.,  $\lambda \in \mathbb{T}$ ) e  $M \in SU(2)$  tal que

$$M^* U M = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda^* \end{pmatrix}$$

Além disso, escrevendo

$$U = \begin{pmatrix} \alpha & -\beta^* \\ \beta & \alpha^* \end{pmatrix},$$

podemos escolher  $\lambda = \Re(\alpha) + i\sqrt{1 - (\Re(\alpha))^2}$ .

Há um homomorfismo entre  $SU(2)$  e  $SO(3)$ . Ele é definido por:

$$\Phi \begin{pmatrix} \alpha & -\beta^* \\ \beta & \alpha^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 - |\beta|^2 & -2\Re(\alpha\beta) & -2\Im(\alpha\beta) \\ 2\Re(\alpha^*\beta) & \Re(\alpha^2 - \beta^2) & \Im(\alpha^2 - \beta^2) \\ 2\Im(\alpha^*\beta) & -\Im(\alpha^2 + \beta^2) & \Re(\alpha^2 + \beta^2) \end{pmatrix}$$

Há uma maneira geométrica de se construir este homomorfismo. Considerando um conjunto de matrizes

$$S := \left\{ \begin{pmatrix} x & y - iz \\ y + iz & -x \end{pmatrix} : (x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \right\}$$

Note que  $\forall M \in S$ ,  $M^* = M$ . Além disso,  $\text{Tr}(M) = 0$  e  $\det(M) = -x^2 - y^2 - z^2$ .

Pode-se definir a correspondência um-a-um linear e invertível:

Agora, considere qualquer  $g \in SU(2)$ . Podemos definir uma transformação linear

Fazendo cálculos, é possível ver que as matrizes reais  $3 \times 3$  correspondem a  $T_g$  na base padrão é  $\Phi(g)$ .

$$\begin{aligned}
F : \mathbb{R}^3 &\rightarrow \text{Matrizes } 2 \times 2 \text{ hermitianas simétricas} \\
\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} &\mapsto \begin{pmatrix} x & y - iz \\ y + iz & -x \end{pmatrix} \\
T_g : \mathbb{R}^3 &\rightarrow \mathbb{R}^3 \\
v &\mapsto F^{-1}(gF(v)g^{-1})
\end{aligned}$$

Logo, pode-se definir que a função sobrejetora  $\Phi : SU(2) \rightarrow SO(3)$  é um homomorfismo dois-para-um. O kernel do homomorfismo é  $\{I, -I\} \subset SU(2)$ , i.e., se  $\Phi(x) = I \in SO(3)$  então  $x = \pm I \in SU(2)$ .

#### 2.1.4 Representação de $SO(3)$ em $L^2(\mathbb{R}^3)$

Uma representação que é utilizada num estudo inicial do átomo de hidrogênio é a representação natural do grupo  $SO(3)$  em  $L^2(\mathbb{R}^3)$ .

Como  $SO(3)$  é o grupo de rotações formado por três espaços euclidianos, há uma ação natural de  $SO(3)$  em  $\mathbb{R}^3$ . Logo há uma representação natural de  $SO(3)$  no espaço de funções complexas em  $\mathbb{R}^3$ . Portanto há uma representação fiel de  $SO(3)$  no espaço de Hilbert. Define-se a representação  $g \cdot f$ ,  $\forall g \in SO(3)$  e  $\forall f \in L^2(\mathbb{R}^3)$ ,

$$(g \cdot f) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} := f \left( g^{-1} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \right)$$

#### 2.1.5 Representações de $SU(2)$ em Polinômios Homogêneos de Duas Variáveis

Para a análise do átomo de hidrogênio, as representações de  $SU(2)$  no espaço vetorial  $\mathcal{P}^n$  têm grande importância. Elas estão relacionadas ao *spin* de partículas elementares que surgem naturalmente da simetria esférica do espaço, onde  $\mathcal{P}^n$  corresponde a uma partícula de spin- $n/2$ .

É necessário definir  $\mathcal{P}^n$  como o espaço vetorial de polinômios complexos de grau  $n$  em duas variáveis, com base da forma  $\{x^n, x^{n-1}y, x^{n-2}y^2, \dots, xy^{n-1}, y^n\}$ , onde  $\dim \mathcal{P}^n = n + 1$ .

Fixando  $n$  um inteiro não-negativo, o produto escalar hermitiano para  $\mathcal{P}^n$  é definido como:

$$\langle x^{n-j}y^j, x^{n-k}y^k \rangle := \begin{cases} k!(n-k)! & , j = k \\ 0 & , j \neq k \end{cases}$$

A ação de  $SU(2)$  no espaço vetorial  $\mathbb{C}^2$  define a representação  $(SU(2), \mathcal{P}^n, R_n)$ :

$$(R_n(g))p \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} := p \left( g^{-1} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right),$$

$\forall g \in SU(2), \forall (x, y)^T \in \mathbb{C}^2$  e  $\forall p \in \mathcal{P}^n$ .

Tem-se que a representação  $(SU(2), \mathcal{P}^n, R_n)$  respeita o produto escalar hermitiano definido anterior, de modo que ela é classificada como unitária.

As representações  $R_n$ 's podem ser calculadas com seus respectivos caracteres (denotados como  $\chi_n := \chi_{R_n}$ ) fazendo algumas contas. Neste trabalho serão apresentadas para  $n = 0, 1$  e  $2$ :

Para  $n = 0$ , tem-se  $\mathcal{P}^0$  unidimensional com base  $\{1\}$ , então tem-se que a matriz de representação é  $R_0(g) = (1)$  e segue que o caráter é  $\chi_0(g) = 1$ .



Para  $n = 1$ , tem-se  $\mathcal{P}^1$  com base  $\{x, y\}$ , então tem-se:

$$R_1 = \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix}$$

e

$$\chi_1(g) = \text{Tr} \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix} = \alpha^* + \alpha = 2\Re(\alpha)$$

Para  $n = 2$ , tem-se  $\mathcal{P}^2$  com base  $\{x^2, xy, y^2\}$ , então tem-se:

$$R_2 = \begin{pmatrix} (\alpha^*)^2 & 2\alpha^*\beta^* & (\beta^*)^2 \\ -\alpha^*\beta & |\alpha|^2 - |\beta|^2 & \alpha\beta^* \\ \beta^2 & -2\alpha\beta & \alpha^2 \end{pmatrix}$$

e

$$\chi_2(g) = \text{Tr} \begin{pmatrix} (\alpha^*)^2 & 2\alpha^*\beta^* & (\beta^*)^2 \\ -\alpha^*\beta & |\alpha|^2 - |\beta|^2 & \alpha\beta^* \\ \beta^2 & -2\alpha\beta & \alpha^2 \end{pmatrix} = 4\Re(\alpha)^2 - 1$$

Como o cálculo do caráter  $\chi_n$  começa a ficar muito complexo a partir de  $n = 2$ , pode-se simplificar o cálculo utilizando o Teorema Espectral. Ou seja, para cada  $n$  não negativo, existe um polinômio  $q_n$  de grau  $n$  em uma variável tal que para cada elemento de  $SU(2)$  tem-se:

$$\chi_n \left( \begin{pmatrix} \alpha & -\beta^* \\ \beta & \alpha^* \end{pmatrix} \right) = q_n(\Re(\alpha))$$

## 2.2 Representações em Mecânica Quântica

Representações são utilizadas naturalmente em Mecânica Quântica, onde há um homomorfismo do grupo de simetria do espaço físico para o grupo de transformações lineares do espaço de Hilbert de estados do sistema quântico. Este grupo de simetria surge da interpretação de que as leis da física são as mesmas para qualquer observador.

Por exemplo, ao observar um átomo de hidrogênio em um laboratório, é possível perceber que as leis da física não apresentam tendência direcional, i.e., os resultados estatisticamente não variam se girarmos toda a configuração. Temos então que o grupo de simetria do átomo de hidrogênio contém o grupo  $SO(3)$ .

Considerando o átomo de hidrogênio como um núcleo estável com uma partícula se movendo ao redor, tem-se que o espaço de estados do modelo é o  $L^2(\mathbb{R}^3)$ . Em uma análise inicial, fixando uma rotação arbitrária  $g \in SO(3)$ , considere dois observadores  $A$  e  $B$  cujas posições variam por  $g$ . Agora considere um vetor arbitrário  $f \in L^2(\mathbb{R}^3)$  representando o resultado observado por  $A$  e defina  $\rho(g)f \in L^2(\mathbb{R}^3)$  em que o observador  $B$  descreve o mesmo estado. Percebe-se que  $\rho(g)$  não depende dos estados escolhidos inicialmente.

É necessário verificar também que se  $A$  observar uma combinação linear de estados  $c_1f_1 + c_2f_2$ , a combinação linear de estados observados por  $B$  deve ser compatíveis  $c_1\rho(g)f_1 + c_2\rho(g)f_2$ , i.e.,

$$\rho(g)(c_1f_1 + c_2f_2) = c_1\rho(g)f_1 + c_2\rho(g)f_2$$

o que prova que  $\rho(g)$  é uma combinação linear.

É necessário entender também se  $\rho$  é um homomorfismo de grupo. O que é bem simples ao verificar que  $\rho$  respeita a multiplicação de grupo, uma vez que se a rotação  $g_{AB}$  leva  $A$  à posição de  $B$  e  $g_{BC}$  leva a posição de  $B$  à posição de  $C$ , então  $g_{AB}g_{BC}$  leva  $A$  à posição de  $C$  e, conseqüentemente,  $\rho(g_{AB}g_{BC})$  leva o estado observado por  $A$  ao estado observado por  $C$ . O que é equivalente à levar o estado observado por  $A$  ao observado por  $B$  e, em seguida, o de  $B$  ao de  $C$ . Então tem-se que  $\rho(g_{AB}g_{BC}) = \rho(g_{AB})\rho(g_{BC})$ . O que garante que  $\rho$  é um homomorfismo de grupo.

Também tem-se que  $\rho$  é uma representação unitária. Uma vez que os produtos internos de estado resultam em quantidades físicas mensuráveis, o valor do produto interno não pode depender da posição angular do observador. Ou seja, dado o produto interno de dois estados medidos por  $A$ ,  $\langle\phi, \varphi\rangle$ , deve ser igual ao produto interno medido por  $B$ ,  $\langle\rho(g)\phi, \rho(g)\varphi\rangle$ .

Além disso, tem-se que qualquer representação física deve ser um homomorfismo de grupo de Lie, uma vez que os resultados devem ser todos diferenciáveis.

No estudo do átomo de hidrogênio, tem-se um modelo experimental para o espaço de estados particular chamado  $L^2(\mathbb{R}^3)$ . Também é possível fazer previsões físicas estudando a representação do grupo  $SO(3)$  no espaço de estados. Em outras situações, pode-se apenas saber o grupo e não o espaço de estados particular.

Por exemplo, tem-se o *espaço de Minkowski* e seu grupo de simetrias chamado *grupo de Poincaré*, em que se espera que sistemas da mecânica quântica respeitem as regras da relatividade especial. Uma vez que qualquer sistema quântico corresponde a uma representação do grupo de Poincaré, ao encontrar uma forma matemática de classificar as representações deste grupo, então pode-se prever algo sobre os sistemas quânticos no espaço de Minkowski. Com este objetivo, E. Wigner elaborou as classificações e previu que as partículas elementares deveriam ter duas características, *massa* e *spin*.

Pode-se também representar qualquer estrutura algébrica cuja operações sejam limitadas à *comutadores*  $(T_1T_2 - T_2T_1)$  de transformações lineares, uma vez que pode-se adicionar, compor e tomar tais comutadores.

A aplicação da teoria da representação à mecânica quântica depende da natureza linear da mecânica quântica, uma vez que pode-se modelar estados de sistemas quânticos por espaços vetoriais. Porém, há sistemas clássicos que não podem ser modulados com um espaço linear, o que leva a questão se a mecânica quântica é verdadeiramente linear. Há estudo sobre modelos de sistemas mecânicos não lineares mas geralmente os modelos lineares apresentam sucesso.

Em resumo, um conjunto de observadores equivalentes de um sistema quântico pode ser representado pela representação unitária  $(G, V, \rho)$ , onde  $G$  é o grupo de simetrias para observadores equivalentes e  $V$  é o espaço de estados do sistema observado.

## 2.3 Composição de Representações

### 2.3.1 Subrepresentações

Há diversas maneiras de se construir representações a partir de antigas. Uma delas é restringindo ao domínio de transformações lineares, mais especificamente às transformações lineares invariantes. Mas antes é necessário fazer algumas definições.

Um subespaço invariante  $W$  de uma representação  $(G, V, \rho)$  é um subespaço de  $V$  tal que  $\forall g \in G$  e todo vetor  $w \in W$ , o vetor  $g \cdot w$  encontra-se em  $W$ . Supondo que  $T$  é um operador linear em  $V$ , se  $T\rho(g) = \rho(g)T, \forall g \in G$ , então todo autoespaço de  $T$  é um espaço invariante para  $\rho$ .

Pode-se assim restringir a representação, restringindo  $\rho(g)$  ao subespaço  $W$  para todo  $g \in G$  da forma  $\rho(g)|_W : W \rightarrow W$ . Se definirmos a função  $\rho_W : G \rightarrow \mathcal{GL}(W)$  por

$$g \mapsto \rho(g)|_W,$$

então  $(G, W, \rho_W)$  é uma *subrepresentação*. Também pode-se definir que se há uma projeção ortogonal  $\Pi_W : V \rightarrow V$  no subespaço  $W$ , então  $\Pi_W$  é um homomorfismo de representações.

Além disso, se  $V$  tem dimensão finita e é formado por  $V = W + W^\perp$ , então:

$$\chi_V = \chi_W + \chi_{W^\perp}$$

onde  $\chi_V, \chi_W$  e  $\chi_{W^\perp}$  são os caracteres de  $\rho_V, \rho_W$  e  $\rho_{W^\perp}$ .

### 2.3.2 Subrepresentações na Mecânica Quântica

Como visto anteriormente nas dissertações sobre Representações em Mecânica Quântica, as leis da física devem ser a mesma para todos os observadores. Então, se há um estado observado em um subespaço, então todos os observadores devem observá-lo neste subespaço. Ou seja, se um estado  $w \in W$  é observado, e tem-se que para todo elemento  $g \in G$  há um observador que vê o estado físico como o vetor  $\rho(g)w$  e sabendo que  $\rho(g)w \in W \forall g \in G$ , então tem-se que o subespaço  $W$  é invariante.

Uma representação que aparece na análise do átomo de hidrogênio é definida usando o espaço  $\mathcal{Y}^l$  dos harmônicos esféricos de grau  $l$ .

Primeiramente, precisamos definir o espaço vetorial  $\mathbb{H}^l$  dos polinômios harmônicos homogêneos de grau  $l$  em três variáveis, definido por:

$$\mathbb{H}^l := \{p \in \mathcal{P}_3^l : \nabla^2 p = 0\}$$

Restringindo  $\mathbb{H}^l$  para uma esfera, tem-se:

$$\mathcal{Y}^l := \{p|_{S^2} : p \in \mathbb{H}^l\}$$

Considerando uma representação de  $SO(3)$  em  $L^2(S^2)$ , o subespaço  $\mathcal{Y}^l$  de  $L^2(S^2)$  é um subespaço invariante, uma vez que sob uma rotação, o polinômio preserva seu grau e o laplaciano é invariante.

Outro espaço vetorial que também é utilizado é o espaço vetorial das funções de rotação invariante em  $L^2(\mathbb{R}^3)$ , também chamadas de funções de base radial (*radial functions*). Ele é denotado por

$$\mathcal{I} := \{f \in L^2(\mathbb{R}^3) : \forall g \in SO(3), g \cdot f = f\}$$

formando um subespaço vetorial de  $L^2(\mathbb{R}^3)$ . Fisicamente, este subespaço corresponde aos *subnível s* (*s-shells*) do átomo de hidrogênio, pois, dado qualquer função de onda em  $\mathcal{I}$ , o estado correspondente deve ser uma sobreposição de estados s-shells.

Qualquer conjunto de estados físicos e esféricamente simétricos corresponde a um subespaço invariante e a uma subrepresentação. Os vários subníveis (*shells*) do átomo de hidrogênio correspondem as subrepresentações de  $SO(3)$  em  $L^2(\mathbb{R}^3)$ , onde os subespaços  $\mathcal{I}$  e  $\mathcal{Y}^l$  tem grande importância.

### 2.3.3 Soma Direta e Produto Direto

Uma forma de combinar espaços vetoriais é através da *soma direta* (ou produto cartesiano) e do *produto direto* (ou produto tensorial). Assim é possível definir representações destes espaços vetoriais.

Fixando  $n$  natural e  $(G, V_1, \rho_1), \dots, (G, V_n, \rho_n)$  as  $n$  representações do grupo  $G$ , então a soma direta das  $n$  representações é

$$(G, \oplus_{k=1}^n V_k, \oplus_{k=1}^n \rho_k),$$

onde  $\oplus_{k=1}^n \rho_k : G \rightarrow \mathcal{GL}(\oplus_{k=1}^n V_k)$  é definida por:

$$(\oplus_{k=1}^n \rho_k)(g)(v_1, \dots, v_n) := (\rho_1(g)v_1, \dots, \rho_n(g)v_n),$$

$\forall v_1 \in V_1, \dots, v_n \in V_n$  e  $g \in G$ .

Além disso, a projeção  $\Pi_k : V_1 \oplus \dots \oplus V_n \rightarrow V_k$  é um homomorfismo de representações. Tem-se também que se  $\chi$  é o caráter de uma representação finita  $(G, V, \rho)$  e  $\tilde{\chi}$  o de  $(G, \tilde{V}, \tilde{\rho})$ , então  $\chi + \tilde{\chi}$  é o caráter de  $\rho + \tilde{\rho}$ .

Analogamente, a representação do *produto direto*, denotado por  $(G, V \otimes \tilde{V}, \rho \otimes \tilde{\rho})$ , é definido como

$$(\rho \otimes \tilde{\rho})(g) : v \otimes \tilde{v} \mapsto (\rho(g)v) \otimes (\tilde{\rho}(g)\tilde{v})$$

Supondo que  $\rho$  e  $\tilde{\rho}$  têm dimensão finita, então o caráter de  $\rho \otimes \tilde{\rho}$  é a função  $\chi\tilde{\chi} : G \rightarrow \mathbb{C}$ . Além disso, se  $V$  e  $\tilde{V}$  têm produto escalar hermitiano definido, o produto escalar de  $V \otimes \tilde{V}$  é  $\langle v \otimes \tilde{v}, w \otimes \tilde{w} \rangle = \langle v, w \rangle \langle \tilde{v}, \tilde{w} \rangle$ .

Se  $(G, V, \rho)$  e  $(G, \tilde{V}, \tilde{\rho})$  são representações unitárias, então  $(G, V \otimes \tilde{V}, \rho \otimes \tilde{\rho})$  também é unitária.

### 2.3.4 Composições de Estados

Uma das aplicações da soma direta e do produto direto é a composição de estados.

É possível decompor um estado como uma superposição de estados nos espaços vetoriais somados ao expressar um espaço vetorial de funções de onda como uma soma direta. É possível verificar isso com o fato de qualquer *bound state* do átomo de hidrogênio é uma superposição de estados em certos subníveis segue da decomposição de  $L^2(\mathbb{R}^3)$  como uma soma direta das representações correspondentes a diferentes subníveis. Também o espaço de estado de partículas de *spin*-1/2 é uma soma direta dos espaços vetoriais puros de *spin-up* e *spin-down*, ou seja, o estado das partículas de *spin*-1/2 é uma sobreposição de estados de *spin-up* e *spin-down*.

Já para obter o estado de duas partículas, basta estudar o produto direto dos dois espaços de estado, onde o espaço de estado para duas partículas que se movem no espaço  $\mathbb{R}^3$  é o espaço  $L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$ . Ou se o objetivo for estudar duas quantidades de uma partícula, como seu movimento no espaço  $\mathbb{R}^3$  e seu estado de spin de *spin*-1, basta estudar o produto direto  $L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^3$ .

## 2.4 Representações Irredutíveis

Foram apresentadas maneiras de se construir representações a partir de outras já conhecidas, ou seja, vimos que representações podem ser construída por somas de representações. Define-se então que representações são formadas por somas de *representações irredutíveis*. Todas as

representações irredutíveis de grupos compactos (como os que estão sendo apresentados nesse trabalho) tem dimensão finita. Pode-se reduzir uma ideia ou cálculo utilizando as representações irredutíveis, o que na física proporciona estudar entidades físicas fundamentais.

### 2.4.1 Definições e o *Lema de Schur*

Para definir uma representação irredutível, usa-se o conceito de subespaços invariantes. Uma representação  $(G, V, \rho)$  é irredutível se seus únicos subespaços invariantes forem o próprio  $V$  e o subespaço trivial  $0$ , senão é considerado redutível. Então  $V$  é considerado chamado de subespaço irredutível.

O *Lema de Schur* diz que, dado duas representações irredutíveis de um mesmo grupo,  $(G, V_1, \rho_1)$  e  $(G, V_2, \rho_2)$ , e um homomorfismo de representações  $T : V_1 \rightarrow V_2$ , então tem-se que: ou a função  $T$  é a função nula (isto é,  $Tv = 0, \forall v \in V_1$ ) ou as representações são isomórficas e  $T$  é um isomorfismo.

Tem-se também que, para uma representação  $(G, V, \rho)$ , um operador linear  $T : V \rightarrow V$  com  $\rho$  se  $T$  é um homomorfismo de representações, e se a representação for irredutível e de dimensão finita, tem-se que todo  $T$  que comuta com  $\rho$  é um múltiplo escalar da identidade.

Com isso podemos concluir que não há outros homomorfismos entre as representações irredutíveis além do homomorfismo trivial e o identidade. Logo, temos que um espaço vetorial pode ser formado com uma soma direta de espaços invariantes para toda representação de operadores lineares, assim como podem ser formados como uma soma direta de autoespaços de um único operador linear.

### 2.4.2 Integração Invariante

A integração invariante é uma ferramenta importante para estudo de grupos compactos, em especial o  $SU(2)$  que é um dos focos do trabalho. Uma integral invariante sob multiplicação fornece bons resultados quando aplicados a caracteres de representações. Uma integral em um grupo  $G$  nos permite definir um espaço vetorial complexo de funções integráveis neste grupo, representado por  $L^2(G)$ .

Para exemplificar, tome o espaço vetorial de funções integráveis no *circle group* parametrizado como  $\mathbb{T} = \{e^{2\pi it} : t \in [0, 1]\}$  (note que é possível escolher outras parametrizações), ou seja, o espaço  $L^2(\mathbb{T})$ . Podemos integrar as funções sobre o círculo no intervalo  $[0, 1]$ . Pode-se observar que ao rotacionar uma função, sua integral é invariante. Ou seja, dado  $f : \mathbb{T} \rightarrow \mathbb{C}$  e qualquer  $\lambda_0 \in \mathbb{T}$  fixado,

$$\int_0^1 f(\lambda_0^{-1} e^{2\pi i\theta}) d\theta = \int_0^1 f(e^{2\pi i\theta}) d\theta$$

Isto é, há uma ação de  $\mathbb{T}$  em si mesma por multiplicação a esquerda. Essa ação induz uma representação  $\rho$  de  $\mathbb{T}$  em  $L^2(\mathbb{T})$ . Para qualquer  $\lambda_0 \in \mathbb{T}$  e qualquer função integrável  $f : \mathbb{T} \rightarrow \mathbb{C}$  temos  $(\rho(\lambda_0)f)(e^{2\pi i\theta}) = f(\lambda_0^{-1} e^{2\pi i\theta})$ , então:

$$\int_0^1 (\rho(\lambda_0)f)(e^{2\pi i\theta}) d\theta = \int_0^1 f(e^{2\pi i\theta}) d\theta$$

Ou seja, a integral não é alterada pela ação do grupo sobre si mesmo pela multiplicação à esquerda ou à direita, pelo mesmo argumento, ou seja, a invariância a direita segue a invariância a esquerda para todos os grupos compactos. A escolha da parametrização deve assegurar que,

para uma função  $f = 1$ , a integral invariante seja de volume 1. Tem-se então que a integral no grupo definida pela parametrização padrão não varia sob multiplicação, ela é considerada uma *integral invariante*.

Com a parametrização escolhida, é possível definir a integral invariante de uma função  $f$  sob o círculo por:

$$\int_{\mathbb{T}} f \, dg := \int_0^1 f(e^{2\pi i \theta}) \, d\theta$$

Pode-se definir o mesmo para o caso de  $SU(2)$ . Para isso, é necessário utilizar a forma parametrizada em coordenadas esféricas do isomorfismo estudado anteriormente de grupo das unidades quaternárias para o  $SU(2)$ :

$$\begin{pmatrix} \cos \psi + i \sin \psi \sin \theta \cos \phi & -\sin \psi \sin \theta \sin \phi + i \sin \psi \cos \theta \\ \sin \psi \sin \theta \sin \phi + i \sin \psi \cos \theta & \cos \psi + i \sin \psi \sin \theta \cos \phi \end{pmatrix}$$

Puxando a integral natural de uma 3-esfera  $S^3$  em  $\mathbb{R}^4$ , obtêm-se uma integral para  $SU(2)$ , da forma

$$\int_{SU(2)} f \, dg = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\pi f(\phi, \theta, \psi) \sin^2 \psi \sin \theta \, d\psi \, d\theta \, d\phi$$

em que a integral tem volume 1 para  $f = 1$  e ela é invariante sob conjugação complexa. Além disso, ela é invariante por multiplicação a esquerda, provada ao analisar o isomorfismo de  $SU(2)$  com as unidades quaternárias e sabendo que o elemento de volume na 3-esfera não se altera sob rotações, e também por multiplicação a direita, usando a invariância a conjugação e a multiplicação a esquerda.

Uma vez que, pelo Teorema Espectral,

$$f \left( \begin{pmatrix} \alpha & -\beta^* \\ \beta & \alpha^* \end{pmatrix} \right) = f \left( \begin{pmatrix} \cos \psi + i \sin \psi & 0 \\ 0 & \cos \psi - i \sin \psi \end{pmatrix} \right)$$

e usando  $\Re(\alpha) = \cos \psi = x$ , pode-se definir:

$$\tilde{f}(x) := f \left( \begin{pmatrix} \alpha & -\beta^* \\ \beta & \alpha^* \end{pmatrix} \right)$$

de modo com que

$$\int_{SU(2)} f(g) \, dg = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \tilde{f}(x) \sqrt{1-x^2} \, dx$$

Assim, usando a integral invariante em um grupo compacto define-se um produto escalar no espaço vetorial de funções complexas no grupo, da forma:

$$\langle f, \tilde{f} \rangle := \int_G f^*(g) \tilde{f}(g) \, dg$$

Com isso, pode-se saber que para dois espaços vetoriais diferentes com suas respectivas representações irredutíveis e unitárias para o mesmo grupo  $G$ , se  $\langle \chi_1, \chi_2 \rangle = 1$  então  $V_1 \cong V_2$ , se  $\langle \chi_1, \chi_2 \rangle = 0$  tem-se que os espaços não são isomórficos. Com isso, tem-se que os caracteres de representações formam um subconjunto ortonormal Hermitiano do espaço vetorial de funções complexas do grupo.

Pode-se também usar integração invariável para mostrar que toda representação de dimensão finita de um grupo compacto é unitária em algum espaço com produto escalar hermitiano. Além disso, pode-se verificar se todas as representações irredutíveis foram encontradas quando seus caracteres formam o conjunto de funções invariantes sob conjugação.

### 2.4.3 Decomposições Isotípicas

Uma propriedade importante de grupos compactos é que qualquer representação pode ser escrita como uma soma de suas representações irredutíveis. Esta soma é chamada de *decomposição isotípica*.

Para isso, tome uma representação  $(G, V, \rho)$  com dimensão finita com  $G$  compacto. Então, há um número finito de representações irredutíveis não isomórficas  $(G, W_j, \rho_j)$ , de modo que

$$c_j := \text{Hom}_G(W_j, V) \neq 0$$

E  $(G, V, \rho)$  é isomórfica a representação formada pela soma direta chamada *decomposição isotípica de  $V$* , ou seja,

$$V \cong \bigoplus_j W_j^{c_j}.$$

### 2.4.4 Classificação das Representações Irredutíveis de $SU(2)$ e $SO(3)$

Inicialmente iremos classificar as representações irredutíveis de dimensão finita do grupo de Lie  $SU(2)$  e posteriormente do grupo  $SO(3)$ , e encontrar a lista de todas as representações unitárias e irredutíveis de cada grupo sem que elas repitam (esta lista é chamada de *classificações*).

Tem-se que para qualquer  $n$  não negativo, a representação  $(SU(2), \mathcal{P}^n, R_n)$  é irredutível. Além disso, toda representação unitária e irredutível do grupo de Lie  $SU(2)$  é isomórfica a  $(SU(2), \mathcal{P}^n, R_n)$  para algum valor de  $n$ . E  $(SU(2), \mathcal{P}^n, R_n)$  só é isomórfica a  $(SU(2), \mathcal{P}^m, R_m)$  se  $n = m$ . Então, tem-se que todas as representações  $(SU(2), \mathcal{P}^n, R_n)$  para qualquer  $n$  inteiro e não negativo formam as classificações de  $SU(2)$ .

Para definir as classificações de  $SO(3)$ , basta utilizar o homomorfismo  $\Phi : SU(2) \rightarrow SO(3)$  já apresentado em (2.2.4) e aplicar nas classificações de  $SU(2)$ . Porém como o homomorfismo é dois-para-um, não há como definir uma representação para  $SO(3)$  a partir de  $\mathcal{P}^n$  de  $SU(2)$  com  $n$  ímpar.

Tomando  $(SO(3), \mathcal{Q}^n, Q_n)$  como a representação de  $(SU(2), \mathcal{P}^n, R_n)$  sob o homomorfismo  $\Phi$ , com  $n$  inteiro par e não negativo, tem-se que  $Q_n$  é unitária e irredutível. Então toda representação unitária e irredutível de dimensão finita de  $SO(3)$  é isomórfica a  $Q_n$  para algum valor de  $n$ , e  $Q_m \cong Q_n \Leftrightarrow m = n$ .

Usando o subgrupo  $\{\mathbf{X}_\theta : \theta \in \mathbb{R}\}$  dos ângulos de Euler, pode-se definir alguns autovetores chamados *weight vectors* e alguns autovalores chamados *weights*.

Dado a representação  $(SO(3), V, \rho)$ ,  $n$  inteiro e um vetor não nulo  $v \in V$  que satisfaça

$$\rho(\mathbf{X}_\theta)v = e^{in\theta}v$$

$\forall \theta \in \mathbb{R}$ , diz-se que  $n$  é o *weight* da representação  $\rho$  e  $v$  é o *weight vector* (de *weight*  $n$ ) da representação.

Por exemplo, considerando a representação de  $SO(3)$  em  $\mathbb{C}^3$ , para  $n = 0$ , tem-se que  $v = (1, 0, 0)^T$  é o *weight vector* de *weight* 0, pois

$$\rho(\mathbf{X}_\theta) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = e^{i(0)\theta} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Seguindo o exemplo, para *weights* iguais a 1 e  $-1$ , tem-se os *weight vector*  $(0, 1, -i)^T$  e  $(0, 1, i)^T$  associados a eles, respectivamente.

Tendo que,

$$\Phi \begin{pmatrix} e^{i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta/2} \end{pmatrix} = \mathbf{X}_\theta$$

então, dado um  $n$  inteiro par não negativo, para  $k = 0, \dots, n$  tem-se que

$$Q_n(\mathbf{X}_\theta) x^k y^{n-k} = e^{i(\frac{n}{2}-k)\theta} x^k y^{n-k}.$$

Portanto,  $x^k y^{n-k}$  são o *weight vector* de *weight*  $\frac{n}{2} - k$ , que são os únicos *weights* da transformação, uma vez que eles abrangem todo o espaço vetorial  $\mathcal{P}^n$ .



### 3 Estados Elementares de um Sistema Quântico

Neste trabalho foi apresentado uma série de definições que nos permitem caracterizar simetrias de sistemas quânticos a partir de uma representação unitária do grupo de simetrias, podendo agora estudar o significado de subespaços invariantes e representações irredutíveis.

Para estudar um sistema quântico, estabelecendo um espaço vetorial  $V$  que modela os estados desse sistema e, a partir de um grupo de simetria  $G$ , pode-se definir uma representação natural  $(G, V, \rho)$ . É importante lembrar que fisicamente os únicos subespaços naturais que aparecem são subespaços invariantes.

Supondo que há subespaços invariantes  $U_1, U_2, W \in V$  em que se define  $W = U_1 \oplus U_2$ . Se considerarmos um estado do sistema quântico  $w$  tal que  $w \in W$  mas  $w \notin U_1$  e  $w \notin U_2$ , podemos dizer que há elementos não-nulos  $u_1 \in U_1$  e  $u_2 \in U_2$  que definem  $w = u_1 + u_2$ . Ou seja, o estado  $w$  é uma superposição dos estados  $u_1$  e  $u_2$ , de forma que  $w$  não é caracterizado como um estado elementar do sistema, porém podemos entendê-lo a partir dos seus estados elementares  $u_1$  e  $u_2$ .

Todo sistema quântico tem estados elementares e estes devem ser independentes dos observadores, como discutido anteriormente. Ou seja, qualquer observador deve ser capaz (em teoria) de reconhecer um estado experimentalmente e todos os observadores devem concordar. Além disso, um estado elementar deve ser indivisível, não podendo ser uma superposição de outros dois estados. Com isso, se definir um modelo em que todo estado reconhecível corresponde a um subespaço vetorial do espaço de estados do sistema, então pode-se concluir que os estados elementares correspondem a representações irredutíveis. Esta independência da escolha do observador obriga o subespaço ser invariante sobre a representação.

Matematicamente, se um vetor  $w$  representa um sistema elementar, então  $w$  deve pertencer a um subespaço invariante irredutível  $W$ , que é um subespaço cujos os únicos subespaços invariantes é o subespaço nulo e ele mesmo. Deste modo, qualquer outro vetor em  $W$  representa um estado "indistinguível" de  $w$ .

Tudo isso implica que todo estado elementar de um sistema quântico com simetria corresponde a uma representação irredutível do grupo de simetria, ou seja, corresponde a restrição de  $\rho$  ao subespaço invariante irredutível que contém o estado.

Então, para fazer previsões concretas de um sistema quântico, basta classificar suas representações irredutíveis do grupo de simetria.

## 4 Representações e Simetrias do Átomo de Hidrogênio

### 4.1 Representações de $SO(3)$ e Harmônicos Esféricos

Como apresentado, há uma representação natural e irredutível do grupo  $SO(3)$  no subespaço dos polinômios harmônicos de grau  $l$  de três variáveis, denotado por  $\mathbb{H}^l$ .

Para entendê-lo melhor, vale lembrar que ele pertence ao espaço vetorial  $\mathcal{P}_3^l$ . Aplicando a restrição do laplaciano ( $\nabla^2 := \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$ ) ao  $\mathcal{P}_3^l$ , denotada pela transformação linear  $\nabla_l^2 : \mathcal{P}_3^l \rightarrow \mathcal{P}_3^{l-2}$ .

Tem-se que  $\dim \mathcal{P}_3^l = \frac{1}{2}(l+1)(l+2)$ . Além disso, como  $\mathbb{H}^l \subset \mathcal{P}_3^l$  restrito a  $\nabla_l^2$ , tem-se que:

$$\mathbb{H}^l = \ker \nabla_l^2$$

Então, pelas relações descritas acima,

$$\dim \mathbb{H}^l = \dim \mathcal{P}_3^l - \dim \mathcal{P}_3^{l-2} = 2l + 1.$$

A representação natural de  $SO(3)$  no espaço vetorial  $\mathcal{P}_3^l$  é isomórfica a  $\mathbb{H}^l \oplus \mathbb{H}^{l-2} \oplus \dots \oplus \mathbb{H}^\epsilon$ , onde  $\epsilon$  é 0 se  $l$  é par e 1 se  $l$  é ímpar. Ou seja, dado  $r^2 := x^2 + y^2 + z^2$ , há um isomorfismo

$$\begin{aligned} 1 \oplus r^2 \oplus \dots \oplus r^{(l-\epsilon)} : \quad \mathbb{H}^l \oplus \mathbb{H}^{l-2} \oplus \dots \oplus \mathbb{H}^\epsilon &\rightarrow \mathcal{P}_3^l \\ (p_l, \dots, p_\epsilon) &\mapsto p_l + r^2 p_{l-2} + \dots + r^{(l-\epsilon)} p_\epsilon \end{aligned}$$

Isso implica que todo polinômio na 2-esfera  $S^2$  em  $\mathbb{R}^3$  pode ser escrito como uma soma de polinômios harmônicos. Isso é dado porque, sendo  $\mathcal{Y}$  o conjunto das restrições de  $S^2$  aos polinômios harmônicos homogêneos, tem-se que para  $L^2(S^2)$ ,  $\mathcal{Y}^\perp = 0$ . Ou seja, qualquer função de  $L^2(S^2)$  pode ser aproximada por somas finitas de harmônicos esféricos, o que facilita em alguns usos.

Analogamente, temos que qualquer função de  $L^2(\mathbb{R}^3)$  pode ser aproximada como uma soma finita de termos da forma  $f(r)g(\theta, \phi)$ . Isso se dá porque o produto direto do espaço das funções invariantes sob rotação ( $\mathcal{I}$ ) com o espaço  $L^2(S^2)$  expande o espaço  $L^2(\mathbb{R}^3)$ . Ou seja, para  $L^2(\mathbb{R}^3)$ , tem-se que  $(\mathcal{I} \otimes \mathcal{Y})^\perp = 0$ .

$$\begin{aligned} f \otimes g &\mapsto fg \\ (r, \theta, \phi) &\mapsto f(r)g(\theta, \phi) \end{aligned}$$

Temos então que se dado  $V$  um subespaço invariante e irredutível não-trivial da representação natural de  $SO(3)$  em  $L^2(S^2)$ ,  $V \cong \mathcal{Y}^l$  para algum  $l$  inteiro não negativo.

Agora, supondo  $f \in \mathcal{I}$  não nulo e  $F$  um subespaço de  $\mathcal{I}$  de uma dimensão formado por  $f$ , então para um  $l$  inteiro não negativo, todas os subespaços de  $L^2(\mathbb{R}^3)$  que são invariantes, irredutíveis e não triviais tem a forma  $F \otimes \mathcal{Y}^l$ . Isso implica que o movimento do elétron no átomo de hidrogênio tem uma previsão específica, como os subespaços invariantes, irredutíveis e não triviais correspondem aos estados elementares do átomo de hidrogênio, tem-se que todo estado elementar deve ter dimensão ímpar. O modelo físico prediz que as dimensões dos subníveis do elétron atribui-se um fator dois para o spin, ou seja, experimentalmente tem-se que os estados elementares tem dimensão  $2(2l+1)$ .

Temos também que a subrepresentação  $\bigoplus_{l=0}^{\infty}(\mathcal{I} \otimes \mathcal{Y}^l)$  de  $L^2(\mathbb{R}^3)$  compõe  $L^2(\mathbb{R}^3)$ , ou seja,

$$\left(\bigoplus_{l=0}^{\infty}(\mathcal{I} \otimes \mathcal{Y}^l)\right)^{\perp} = 0.$$

Sabendo que  $\mathcal{I}$  consiste na parte radial da função de onda, tem-se que, para  $l = 0$ ,  $\mathcal{I} \otimes \mathcal{Y}^0$  corresponde a todas as combinações de estados *s-shells*, para  $l = 1$ ,  $\mathcal{I} \otimes \mathcal{Y}^1$  corresponde a todas as combinações de estados *p-shells*, e assim por diante.

## 4.2 Álgebra de simetria do átomo de Hidrogênio

Anteriormente foi apresentado as dimensões de vários subníveis dos elétrons, exceto por um fator dois. Isto se dá porque fizemos previsões sobre os níveis de energia do átomo de hidrogênio. Uma vez que a energia é invariante por rotação, todo subnível deve pertencer a um nível de energia.

nível de energia	subnível	dimensão
menor	<i>s</i>	2
2 <sup>o</sup> e 3 <sup>o</sup> menor	<i>s, p</i>	8
4 <sup>o</sup> e 5 <sup>o</sup> menor	<i>s, p, d</i>	18
6 <sup>o</sup> e 7 <sup>o</sup> menor	<i>s, p, d, f</i>	32
⋮	⋮	⋮

Tabela 1: Dimensão dos níveis de energia no átomo de Hidrogênio

A dimensão dos níveis de energia apresentam um padrão, são o dobro de quadrados perfeitos. Isso é consequência do operador de Schrödinger. O potencial Coulombiano permite encontrar uma simetria escondida que não corresponde a simetria espacial. Temos também que o autoespaço de energia do Hamiltoniano do átomo de hidrogênio deve ser uma representação da álgebra de Lie  $so(4)$ .

Com isso, é possível obter uma lista de níveis de energia permitidos e suas representações, sendo que suas dimensões com o fator dois do spin dará o número de elementos de cada linha da tabela periódica.

### 4.2.1 Definições de Álgebras de Lie

Uma *álgebra de Lie* real é um espaço vetorial real  $\mathfrak{g}$  com operação *colchete*  $[\cdot, \cdot] : \mathfrak{g} \times \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}$  que satisfaz ( $\forall A, B, C \in \mathfrak{g}$  e  $r, s \in \mathbb{R}$ ):

1. Assimetria:  $[A, B] = -[B, A]$ ;
2. Linearidade nos dois slots:  $[rA + sB, C] = r[A, C] + s[B, C]$  e  $[A, rB + sC] = r[A, B] + s[A, C]$ ;
3. Identidade de Jacobi:  $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$ ;

$[\cdot, \cdot]$  é chamado de *colchete de Lie*. Quando  $[A, B] = 0$ , diz-se que  $A$  e  $B$  comutam e o operador é chamado de *comutador*.

Define-se *general linear (Lie) algebra over the complex numbers* o  $gl(n, \mathbb{C})$  o conjunto de matrizes complexas  $n \times n$  fechada no *colchete*  $[A, B] := AB - BA$ .

Uma subálgebra de  $gl(2, \mathbb{C})$  é a *special unitary algebra* definida por

$$su(2) := \{A \in gl(2, \mathbb{C}) : A + A^* = 0, \text{Tr } A = 0\}$$

e tem a forma

$$su(2) = \left\{ \begin{pmatrix} iX & Y + iZ \\ -Y + iZ & -iX \end{pmatrix} : X, Y, Z \in \mathbb{R} \right\}.$$

Qualquer transformação linear que satisfaz  $A + A^* = 0$  pode ser chamada de *anti-Hermitiana*.

De acordo com [1], relação de  $SU(2)$  e  $su(2)$  pode ser pensada como a álgebra de Lie  $su(2)$  sendo o espaço vetorial de possíveis velocidades de partículas se movendo em torno da identidade no grupo de Lie  $SU(2)$ . Estas velocidades são chamadas *elementos infinitesimais*.

Há também um Teorema Espectral para  $su(2)$ . Dado  $A \in su(2)$  e  $M \in SU(2)$ , há um  $\lambda$  inteiro não negativo tal que

$$M^* A M = \begin{pmatrix} i\lambda & 0 \\ 0 & -i\lambda \end{pmatrix},$$

o que leva a

$$A = M \begin{pmatrix} i\lambda & 0 \\ 0 & -i\lambda \end{pmatrix} M^{-1}.$$

A partir do Teorema Espectral para  $su(2)$ , para qualquer  $t \in \mathbb{R}$ , tem-se  $\exp(tA) \in SU(2)$ . Além disso, a derivada da função  $\exp(tA)$  em relação a  $t$  em  $t = 0$  é  $A$ . Ou seja,  $su(2)$  é o conjunto das derivadas na identidade das curvas diferenciáveis em  $SU(2)$ , em outras palavras,  $su(2)$  é a álgebra de Lie de  $SU(2)$ .

Da mesma forma, pode-se definir a álgebra de Lie

$$so(n) := \{A \in gl(n, \mathbb{C}) : A + A^T = 0 \text{ e todos elementos de } A \text{ são reais}\},$$

para todo  $n$ . Para  $n = 3$ ,

$$so(3) = \left\{ \begin{pmatrix} 0 & -Z & Y \\ Z & 0 & -X \\ Y & -X & 0 \end{pmatrix} : X, Y, Z \in \mathbb{R} \right\}.$$

Outra álgebra de Lie é a *álgebra de Heisenberg* formada pelo conjunto

$$\mathcal{H} = \left\{ \begin{pmatrix} 0 & p & r \\ 0 & 0 & q \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} : p, q, r \in \mathbb{R} \right\}.$$

com o colchete usual de matrizes.

E também pode-se definir a álgebra dos quaternions por

$$\mathfrak{g}_{\mathbf{Q}} = \{x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k} : x, y, z \in \mathbb{R}\}.$$

Agora, suponha  $\mathfrak{g}_1$  e  $\mathfrak{g}_2$  com seus respectivos  $[\cdot, \cdot]_1$  e  $[\cdot, \cdot]_2$  e  $T : \mathfrak{g}_1 \rightarrow \mathfrak{g}_2$  uma transformação linear. Então  $T$  é um homomorfismo de álgebra de Lie se respeitar o *colchete*, i.e.,

$$[TA, TB]_2 = T([A, B]_1)$$

$\forall A, B \in \mathfrak{g}_1$ . Se  $T$  for injetora, então é um isomorfismo e tem-se que  $\mathfrak{g}_1 \cong \mathfrak{g}_2$ .

Por exemplo,  $\mathfrak{g}_{\mathbf{Q}}$  é isomórfica a  $su(2)$  e ambas são isomórficas a  $so(3)$ .

O isomorfismo  $T_1 : \mathfrak{g}_{\mathbf{Q}} \rightarrow su(2)$  é dado por

$$T_1(\mathbf{i}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix},$$

$$T_1(\mathbf{j}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$T_1(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Note que as matrizes formam uma base de  $su(2)$ .

Da mesma forma, o isomorfismo  $T_2 : \mathfrak{g}_{\mathbf{Q}} \rightarrow so(3)$  é dado por

$$T_2(\mathbf{i}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$T_2(\mathbf{j}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$T_2(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Como  $T_2 \circ T_1^{-1}$  é injetora e respeita os *colchetes*, tem-se que  $su(2)$  também é isomórfica a  $so(3)$ .

Quando duas ou mais álgebras são isomórficas, pode-se chamá-las de "iguais". Então é usado a abreviação  $\mathbf{i}$  para  $T_1(\mathbf{i})$  ou  $T_2(\mathbf{i})$ , e assim por diante. Esta álgebra é usada em casos onde se encontram triplas de operadores  $\hat{\mathbf{J}}_x, \hat{\mathbf{J}}_y, \hat{\mathbf{J}}_z$ , que satisfazem as relações de comutação

$$[\hat{\mathbf{J}}_x, \hat{\mathbf{J}}_y] = i\hbar\hat{\mathbf{J}}_z, \quad [\hat{\mathbf{J}}_y, \hat{\mathbf{J}}_z] = i\hbar\hat{\mathbf{J}}_x, \quad [\hat{\mathbf{J}}_z, \hat{\mathbf{J}}_x] = i\hbar\hat{\mathbf{J}}_y.$$

Geralmente, em aplicações físicas estes operadores são Hermitianos. A partir deles, pode-se definir o isomorfismo

$$T_3(\mathbf{i}) = \frac{1}{i\hbar}\hat{\mathbf{J}}_x, \quad T_3(\mathbf{j}) = \frac{1}{i\hbar}\hat{\mathbf{J}}_y, \quad T_3(\mathbf{k}) = \frac{1}{i\hbar}\hat{\mathbf{J}}_z.$$

Essas triplas são muitas vezes denotadas como "operadores de momentum angular" e algumas vezes são relacionadas ao momentum angular atual.

Suponha  $\mathfrak{g}_1$  e  $\mathfrak{g}_2$  com seus respectivos  $[\cdot, \cdot]_1$  e  $[\cdot, \cdot]_2$ , tem-se que a soma direta  $\mathfrak{g}_1 \oplus \mathfrak{g}_2$  é uma álgebra de Lie com operação definida por

$$[(A_1, A_2), (B_1, B_2)] := ([A_1, B_1]_1, [A_2, B_2]_2).$$

$$\begin{aligned} S : (T_1 \oplus T_1)^{-1} : \quad su(2) \oplus su(2) &\rightarrow so(4) \\ (x, y) &\mapsto S(T^{-1}x, T^{-1}y) \end{aligned}$$

Dado esta preposição, tem-se que há um isomorfismo  $S : \mathfrak{g}_{\mathbf{Q}} \oplus \mathbf{Q} \rightarrow so(4)$  e, com isso, há um isomorfismo  $su(2) \oplus su(2)$  para  $so(4)$ :

Como simetrias de sistemas físicos dão origem a álgebras de Lie, elas podem ser pensadas como simetrias infinitesimais.

#### 4.2.2 Representações de Álgebras de Lie

Supondo  $V$  é espaço vetorial complexo e  $gl(V)$  é o espaço vetorial de todas as transformações lineares de  $V$  em  $V$  com operador  $[A, B] := AB - BA$ . Então um homomorfismo  $\rho$  da álgebra de Lie  $\mathfrak{g}$  em  $gl(V)$  é chamado de representação de  $\mathfrak{g}$  em  $V$ , também denotado por  $(\mathfrak{g}, V, \rho)$ .

Há uma representação natural de  $so(3)$  em  $L^2(\mathbb{R}^3)$  usando operadores diferenciais, onde se define os três operadores de momento angular em  $L^2(\mathbb{R}^3)$  como

$$\mathbf{L}_i := z\partial_y + y\partial_z, \quad \mathbf{L}_j := x\partial_z + z\partial_x, \quad \mathbf{L}_k := y\partial_x + x\partial_y.$$

Para ser mais preciso, tomando  $W^\infty(\mathbb{R}^3)$  como o subespaço das funções infinitamente diferenciáveis em  $L^2(\mathbb{R}^3)$  com suas respectivas derivadas também em  $L^2(\mathbb{R}^3)$ , define-se o *momentum angular total* como  $\mathbf{L} : su(2) \rightarrow gl(W^\infty(\mathbb{R}^3))$  por

$$\mathbf{L}(c_i \mathbf{i} + c_j \mathbf{j} + c_k \mathbf{k}) := c_i \mathbf{L}_i + c_j \mathbf{L}_j + c_k \mathbf{L}_k$$

Agora, supondo  $(\mathfrak{g}, V, \rho)$ , um subespaço  $W$  de  $V$  é um subespaço invariante para  $\rho$  se  $\rho(A)w \in W \forall A \in \mathfrak{g}$  e  $w \in W$ . Se  $W$  é invariante para  $\rho$ , então a representação  $\rho_W : \mathfrak{g} \rightarrow gl(W)$  é definida por

$$\rho_W(A) := \rho(A)|_W$$

é chamada de subrepresentação de  $\rho$ . Se  $V$  e  $0$  são os únicos subespaços invariantes de  $V$ , então  $(\mathfrak{g}, V, \rho)$  é uma representação irredutível.

O *Lema de Schur* é dado por: dado  $(\mathfrak{g}, V_1, \rho_1)$  e  $(\mathfrak{g}, V_2, \rho_2)$  representações irredutíveis de  $\mathfrak{g}$ , suponha  $T : V_1 \rightarrow V_2$  é um homomorfismo de representações. Ou  $T$  é uma função nula ou  $T$  é um isomorfismo e  $(\mathfrak{g}, V_1, \rho_1)$  e  $(\mathfrak{g}, V_2, \rho_2)$  são isomórficas.

Como consequência, para as representações anteriores, se  $T : V_1 \rightarrow V_2$  é um homomorfismo de representações, então a imagem de  $V_1$  sobre  $T$  é uma subrepresentação de  $V_2$ .

Outra consequência, suponha que para  $(\mathfrak{g}, V, \rho)$  tenha uma transformação  $T : V \rightarrow V$  que comute com  $\rho$ . Então cada autoespaço de  $T$  é um espaço invariante de  $\rho$ .

Há uma correspondência de todo grupo de Lie à uma álgebra de Lie, mas o contrário não é verdade. Uma das manifestações dessa assimetria, é que há representações irredutíveis de dimensões infinitas da álgebra de Lie  $so(3)$  em espaços de produto escalar hermitiano, enquanto para o grupo de Lie  $SO(3)$  não há. Em outras palavras, Lie grupos são objetos globais e Lie álgebras são objetos locais.

Exemplificando, as representações de  $SO(3)$  em  $L^2(\mathbb{R}^3)$  atua rotacionando funções, enquanto  $so(3)$  atua por operadores diferenciais em funções, chamados "geradores de rotações infinitesimais". Um operador diferencial  $A$  é local pois pode calcular  $(Af)(x_0, y_0, z_0)$  a partir dos valores de  $f$  perto do ponto  $(x_0, y_0, z_0)$ , enquanto para  $B$ , um operador rotacional, o cálculo de  $(Bf)(x_0, y_0, z_0)$  requer somente os valores de  $f$  em  $(x_0, y_0, z_0)$ . Objetos locais não podem ser expandidos a globais sempre.

### 4.2.3 Representações Irredutíveis de $su(2)$ e $so(4)$

Inicialmente iremos usar representações a partir da ação de álgebras de Lie  $su(2)$  em polinômios de duas variáveis. Tomando  $su(2)$  como o espaço vetorial expandido por  $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$  em que pode-se definir uma função  $\mathbf{U} : su(2) \rightarrow gl(\mathcal{P})$  com  $c_{\mathbf{i}}, c_{\mathbf{j}}, c_{\mathbf{k}} \in \mathbb{R}$  por

$$\mathbf{U}(c_{\mathbf{i}}\mathbf{i} + c_{\mathbf{j}}\mathbf{j} + c_{\mathbf{k}}\mathbf{k}) := c_{\mathbf{i}}\mathbf{U}_{\mathbf{i}} + c_{\mathbf{j}}\mathbf{U}_{\mathbf{j}} + c_{\mathbf{k}}\mathbf{U}_{\mathbf{k}}$$

com

$$\mathbf{U}_{\mathbf{i}} := \frac{i}{2}(x\partial_x - y\partial_y),$$

$$\mathbf{U}_{\mathbf{j}} := \frac{1}{2}(x\partial_y - y\partial_x),$$

$$\mathbf{U}_{\mathbf{k}} := \frac{i}{2}(x\partial_y + y\partial_x),$$

temos que para qualquer  $n$  inteiro e não negativo, os operadores  $\mathbf{U}_{\mathbf{i}}, \mathbf{U}_{\mathbf{j}}$  e  $\mathbf{U}_{\mathbf{k}}$  formam uma representação irredutível de  $su(2)$  em  $\mathcal{P}^n$ .

É definido também o *raising operator* ( $\mathbf{X}$ ) e o *lowering operator* ( $\mathbf{Y}$ ) da representação  $\mathbf{U}$  como:

$$\mathbf{X} := \mathbf{U}_{\mathbf{j}} - i\mathbf{U}_{\mathbf{k}} = x\partial_y$$

e

$$\mathbf{Y} := \mathbf{U}_{\mathbf{j}} + i\mathbf{U}_{\mathbf{k}} = -y\partial_x$$

O operador  $\mathbf{X}$  aumenta o expoente de  $x$  em cada termo e o autovalor de  $\mathbf{U}_{\mathbf{i}}$  enquanto o operador  $\mathbf{Y}$  diminui o expoente de  $x$  em cada termo e o autovalor de  $\mathbf{U}_{\mathbf{i}}$ . Para a representação  $(su(2), V, \rho)$ , define-se o *raising operator* de  $\rho$  como

$$\mathbf{X}_{\rho} := \rho(\mathbf{j}) - i\rho(\mathbf{k})$$

e o *lowering operator* de  $\rho$  como

$$\mathbf{Y}_{\rho} := \rho(\mathbf{j}) + i\rho(\mathbf{k}).$$

E temos que  $[\mathbf{X}_{\rho}, \mathbf{Y}_{\rho}] = 2i\rho(\mathbf{i})$ . Além disso, se  $v \in V$  é um autovetor de  $\rho(\mathbf{i})$  com autovalor  $\lambda$ , então

$$\rho(\mathbf{i})(\mathbf{X}_{\rho}v) = (\lambda + i)\mathbf{X}_{\rho}v$$

$$\rho(\mathbf{i})(\mathbf{Y}_{\rho}v) = (\lambda - i)\mathbf{Y}_{\rho}v$$

Se  $(su(2), V, \rho)$  é uma representação de dimensão finita de álgebra de Lie, e  $v_0$  é um autovetor de  $\rho(\mathbf{i})$ , então  $v_0$  é o maior vetor de peso da representação  $\rho$ . Se  $(su(2), V, \rho)$  for uma representação de dimensão finita, então há no mínimo um vetor de peso maior de  $\rho$  em  $V$ . Supondo que seja  $v_0$ , então há um único inteiro não negativo  $n$  tal que  $\mathbf{Y}_{\rho}^n v_0 \neq 0$  e  $\mathbf{Y}_{\rho}^{n+1} v_0 = 0$ . Para todo  $k = 0, \dots, n$  tem-se

$$\rho(\mathbf{i})\mathbf{Y}_{\rho}^n v_0 = \frac{i}{2}(n - 2k)\mathbf{Y}_{\rho}^n v_0.$$

Além disso,  $\mathbf{Y}_{\rho}^n v_0 : k = 0, \dots, n$  é uma base de uma subrepresentação irredutível  $W$  de  $V$ .

Com isso temos que se  $(su(2), V, \rho)$  é uma representação irredutível de dimensão finita de uma álgebra de Lie, então ela é isomórfica a representação  $(su(2), \mathcal{P}^n, \mathbf{U})$  com  $n := \dim V - 1$ .

Uma das aplicações importantes para as representações irredutíveis de  $su(2)$  é o estudo do *spin*.

Para a identificação de uma representação de uma álgebra há um objeto chamado *operador de Casimir* que é definido por uma transformação linear que comuta com qualquer operador na imagem da representação. Para o caso de  $(su(2), V, \rho)$ , toma-se o operador de Casimir para  $\rho$  como a transformação linear  $\mathbf{C} : V \rightarrow V$  definido por

$$\mathbf{C} := \rho(\mathbf{i})^2 + \rho(\mathbf{j})^2 + \rho(\mathbf{k})^2.$$

Pode-se dizer que  $\mathbf{C}$  comuta com  $\rho$ .

Assim como o raising e o lowering operators, o operador de Casimir não corresponde a nenhum elemento de  $su(2)$ , mas ele está definido na álgebra  $gl(V)$  para qualquer espaço vetorial  $V$ .

Se  $(su(2), V, \rho)$  é uma representação irredutível, então o operador de Casimir é um múltiplo escalar da identidade de  $V$ . Isso se dá pelo Lema de Schur definido anteriormente.

Para a representação de  $su(2)$  nos polinômios de duas variáveis, o operador de Casimir é

$$\mathbf{C} = \mathbf{U}_i^2 + \mathbf{U}_j^2 + \mathbf{U}_k^2.$$

A restrição de  $\mathbf{C}$  no espaço  $\mathcal{P}^0$  de polinômios constantes é o operador zero, no espaço  $\mathcal{P}^1$  de polinômios lineares é equivalente a uma operação por  $-3/4$ , no espaço  $\mathcal{P}^2$  é a constante com valor  $-2$  e assim por diante... Então, para  $\mathcal{P}^n$ , tem-se

$$\mathbf{C} = -\frac{1}{4}(n^2 - 2n)I = -l(l+1)I$$

Na física, essa sequência de números é definida por  $-l(l+1)$ , onde  $l$  é definido como  $l := n/2$  e é um número quântico.

Para  $(su(2), V, \rho)$ , representação irredutível, e  $\mathbf{C} = -l(l+1)I$  em  $V$ , para  $l = n/2$  e  $n$  inteiro não negativo, então os autovalores de  $\rho(\mathbf{i}) : V \rightarrow V$  são  $-il, -il + i, \dots, il - i, il$ .

Agora, para definirmos uma representação de  $so(4)$ , suponha que  $(su(2) \oplus su(2), V, \rho)$  é uma representação irredutível, então há representações irredutíveis  $(su(2), W_1, \rho_1)$  e  $(su(2), W_2, \rho_2)$  tal que a representação  $(su(2) \oplus su(2), V, \rho)$  é isomórfica a representação de álgebra de Lie

$$(su(2) \oplus su(2), W_1 \otimes W_2, \rho_1 \otimes I + I \otimes \rho_2).$$

## 4.3 O Átomo de Hidrogênio

### 4.3.1 Alguns Conceitos Básicos de Mecânica Quântica

Para estudar a função de onda de um sistema quântico, define-se o operador de Schrödinger como:

$$\mathbf{H} := -\frac{\hbar^2}{2\mathbf{m}}(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2) - \frac{\mathbf{e}^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

onde  $\mathbf{e}$  é a carga do elétron.

Na mecânica quântica, o estado fundamental do átomo de hidrogênio é dado pela equação de Schrödinger para o movimento relativo associada a um estado de energia mínimo  $E$ :



$$\mathbf{H}\psi := -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(r)\psi = E\psi \quad (1)$$

onde  $V(r)$  é o potencial Coulombiano:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

O operador de Schrödinger pode ser usado para determinar o comportamento espacial de um elétron em um átomo de hidrogênio em várias situações não relativísticas, podendo fazer previsões em vários experimentos.

Fazendo uma análise para o estado fundamental do átomo, tem-se que a energia mínima (obtida por Bohr) é dada por:

$$|E| = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}$$

e define-se  $a_0$  como o *raio de Bohr* por

$$a_0 := \frac{h^2\epsilon_0}{\pi me^2}.$$

Os valores de cada constante fundamental são dados por

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}; \quad \epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ F/m}; \quad m = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}; \quad e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}.$$

Assim, o raio de Bohr pode ser obtido como

$$a_0 \approx 5,292 \cdot 10^{-11} \text{ m} \approx 0,5292 \text{ Å}.$$

Para resolver a Equação de Schrödinger (1), é usado o método de separação de variáveis, assumindo que o raio não dependa de  $\theta$  e  $\phi$ , e vice-versa. Como apresentado matematicamente em (4.1), a equação pode ser escrita como:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

A resolução mostrará que as soluções são dependentes de três números quânticos. A solução para  $Y(\theta, \phi)$  é dependente de  $m_l$  e  $l$ , enquanto a solução de  $R(r)$  é dependente de  $n$  e  $l$ . A constante  $n$  é chamada de *número quântico principal* (principal quantum number) e toma qualquer valor inteiro não negativo, correspondendo ao nível de energia do átomo de hidrogênio. Já a constante  $l$  é chamada de *número quântico de momento angular* ou *número quântico azimutal* (magnetic quantum number) e ela define o momentum angular do elétron, podendo assumir valor inteiro dado por  $0 \leq l \leq (n-1)$ . Por fim, a constante  $m_l$  é chamada de *número quântico magnético* (magnetic quantum number) e é um número inteiro dado por  $-l \leq m_l \leq l$ . Há também o *número quântico de spin* simbolizado por  $m_s$  que pode receber valor  $m_s = \pm \frac{1}{2}$ , mas ele não aparece na solução.

Para verificar a relação do número quântico azimutal, com a solução de  $R(r)$ , pode-se chegar a expressão

$$KE = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

e o momentum angular de uma partícula é dado por

$$L = mvr$$

Sabendo que,

$$KE = \frac{1}{2}mv^2,$$

pode juntar as equações e definir o momentum angular do elétron como:

$$L := \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

Como cada valor de  $n$  representa uma camada, cada valor do momentum angular  $l$  é representa um subnível do orbital.

$$\begin{array}{cccccccc} l = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & \dots \\ & s & p & d & f & g & h & \dots \end{array}$$

Então a estrutura atômica tem os estados eletrônicos da seguinte forma:

$\begin{array}{c} \text{n} \\ \backslash \\ \text{l} \end{array}$	0	1	2	3	4
1	1s				
2	2s	2p			
3	3s	3p	3d		
4	4s	4p	4d	4f	
5	5s	5p	5d	5f	5g

Tabela 2: Distribuição Atômica

Se o campo magnético é paralelo ao eixo  $z$ , então pode-se dizer o momento angular nesta direção tem valor dependente do número atômico  $m$ , ou seja,

$$L_z = m_l \hbar$$

Em Mecânica Quântica, os orbitais não representam a posição do elétron, ou seja, não há valores  $r$ ,  $\theta$  ou  $\phi$  para a posição do elétron e sim probabilidades de encontrá-lo em vários locais. Sequer pode pensar que o elétron se move pelos orbitais, uma vez que a Equação de Schrödinger é independente do tempo.

A análise dos orbitais é feita através da densidade de probabilidade correspondente a função de onda do elétron:

$$|\psi|^2 := |R|^2|Y|^2 \quad (2)$$

#### 4.3.2 Estados Confinados do Átomo de Hidrogênio

O operador de Schrödinger pode ser usado para fazer medições da energia de um elétron no átomo de hidrogênio. Suponha que  $\phi \in L^2(\mathbb{R}^2)$  satisfaça a equação de autovalores de Schrödinger

$$\mathbf{H}\psi = E\psi \quad (3)$$

para algum valor de energia real, de forma com que seja equivalente a (1). Ao medir o estado  $\phi$ , obtém-se o energia do elétron. Os autovalores do operador de Schrödinger são conhecidos como níveis de energia e suas autofunções correspondentes são chamadas de autoestados de energia. Considere um elétron em um estado formado pela superposição de autoestados de energia  $\phi = \sum_E c_E \phi_E$  onde  $\sum |c_E|^2 = 1$  e para cada  $E$  a função  $\phi_E$  é uma autofunção correspondente ao autovalor  $E$  e  $c_E$  é um número complexo, então a probabilidade que a energia medida seja  $E$  é o número  $|c_E|^2 \in [0, 1]$ . O elétron fica confinado porque não tem energia para escapar e os estados confinados formam um subespaço de  $L^2(\mathbb{R}^3)$ .

Cada autovalor negativo  $E$  do operador de Schrödinger tem um número finito de autofunções linearmente independentes. Isto é, se  $l \geq 1$  e  $l > \sqrt{\mathbf{m}e^2/\hbar\sqrt{-2E}}$ , não é uma autofunção em  $L^2(\mathbb{R}^3)$  do operador de Schrödinger com autovalor  $E$ .

Pela simetria esférica do espaço físico, o operador de Schrödinger deve comutar com os operadores de momentum angular, ou seja,  $\forall g \in SO(3)$  e  $\forall \psi \in \text{dom}(\mathbf{H})$  deve ter  $\mathbf{H} \circ \rho(g) = \rho(g) \circ \mathbf{H}$ , em que  $\rho$  é a representação natural de  $SO(3)$  em  $L^2(\mathbb{R}^3)$ . A comutação de  $\mathbf{H}$  e os operadores de momentum angular são versões infinitesimais da comutação com rotação. Temos então que pela linearidade do homomorfismo de álgebra de Lie  $\mathbf{L}$ , segue que para cada  $\mathbf{q} \in su(2)$ . Ou seja, os operadores de momentum angular restritos a um autoespaço de  $\mathbf{H}$  formam uma representação de  $su(2)$ .

### 4.3.3 Representação de $so(4)$ do Hidrogênio

Os operadores de Runge-Lenz comutam com  $\mathbf{H}$  e são definidos somente nos estados confinados do operador de Schrödinger e dependem da forma do potencial de Coulomb. Pode-se então formar uma combinação dos operadores de Runge-Lenz com os operadores de momentum angulares para formar uma representação de  $so(4)$ . Para  $E < 0$  fixado e  $V_E$  denotando o auto espaço correspondente a  $E$ , define-se os operadores de Runge-Lenz como:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_i &:= \frac{i\hbar}{\sqrt{-8\mathbf{m}E}} \left( \mathbf{L}_k \partial_y + \partial_y \mathbf{L}_k - \mathbf{L}_j \partial_z - \partial_z \mathbf{L}_j + \frac{2\mathbf{m}e^2 x}{\hbar \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right), \\ \mathbf{R}_j &:= \frac{i\hbar}{\sqrt{-8\mathbf{m}E}} \left( \mathbf{L}_i \partial_z + \partial_z \mathbf{L}_i - \mathbf{L}_k \partial_x - \partial_x \mathbf{L}_k + \frac{2\mathbf{m}e^2 y}{\hbar \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right), \\ \mathbf{R}_k &:= \frac{i\hbar}{\sqrt{-8\mathbf{m}E}} \left( \mathbf{L}_j \partial_x + \partial_x \mathbf{L}_j - \mathbf{L}_i \partial_y - \partial_y \mathbf{L}_i + \frac{2\mathbf{m}e^2 z}{\hbar \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right). \end{aligned}$$

Temos também que

$$\mathbf{L}^2 + \mathbf{R}^2 := \mathbf{L} \cdot \mathbf{L} + \mathbf{R} \cdot \mathbf{R} = 1 + \frac{\mathbf{m}e^4}{3E\hbar^2}$$

Com isso, é possível introduzir a representação de  $so(4)$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_i &:= (\mathbf{L}_i + \mathbf{R}_i)/2 & \mathbf{B}_i &:= (\mathbf{L}_i - \mathbf{R}_i)/2 \\ \mathbf{A}_j &:= (\mathbf{L}_j + \mathbf{R}_j)/2 & \mathbf{B}_j &:= (\mathbf{L}_j - \mathbf{R}_j)/2 \\ \mathbf{A}_k &:= (\mathbf{L}_k + \mathbf{R}_k)/2 & \mathbf{B}_k &:= (\mathbf{L}_k - \mathbf{R}_k)/2 \end{aligned}$$

O operador de Casimir dessa representação é dado por

$$\mathbf{A}^2 = \mathbf{B}^2 = \frac{1}{4}(\mathbf{L}^2 + \mathbf{R}^2) = \frac{1}{4} \left( 1 + \frac{\mathbf{m}e^4}{2E\hbar^2} \right)$$

Como foi calculado anteriormente que o operador de Casimir deve ser da forma  $-\frac{1}{4}(n^2 + 2n)$  com  $n$  inteiro não negativo, então tem-se que cada autovalor  $E$  do operador de Schrödinger deve ser da forma

$$E = \frac{-\mathbf{me}^4\hbar^{-2}}{2(n+1)^2}. \quad (4)$$

Dessa forma, temos

n	nível de energia*	dimensão de $\mathcal{P}^n$	dimensão do nível eletrônico**
0	$-\mathbf{me}^4\hbar^{-2}/2$	1	2
1	$-\mathbf{me}^4\hbar^{-2}/8$	4	8
2	$-\mathbf{me}^4\hbar^{-2}/18$	9	18
3	$-\mathbf{me}^4\hbar^{-2}/32$	16	32
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Tabela 3: (\*autovalor \*\*dimensão do autoespaço)

Estas dimensões de níveis eletrônicos (2, 8, 18, 32...) que determinam o tamanho de cada linha da tabela periódica.

## 5 Visualização dos Orbitais Atômicos

O modelo matemático estudado até agora para densidades de probabilidade de vários orbitais de elétrons permite o desenvolvimento de ferramentas para visualização.

### 5.1 Harmônicos Esféricos do Átomo de Hidrogênio

Inicialmente, é necessário definir uma função de Legendre.

**Definição 5.1.** Seja  $l$  um inteiro não negativo que satisfaça  $-l \leq m \leq l$ , a *função de Legendre*  $l, m$  é definida por

$$\mathbf{P}_{l,m}(f) := \frac{(-1)^{|m|}}{2^l l!} (1 - f^2)^{|m|/2} \frac{d^{l+|m|}}{d f^{l+|m|}} (f^2 - 1)^l$$

Agora, pode-se definir uma função harmônica esférica.

**Definição 5.2.** Seja  $l$  um inteiro não negativo que satisfaça  $-l \leq m \leq l$ , a *função harmônica esférica*  $l, m$  ( $Y_{l,m} : [0, \pi] \oplus (-\pi, \pi] \rightarrow \mathbb{C}$ ) é dada por

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) := \sqrt{\frac{(l-m)!(2l+1)}{(l+m)!4\pi}} \mathbf{P}_{l,|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}$$

. Para cada  $l$ , a combinação linear dos vetores  $\{Y_{l,m} : m = -l, \dots, l\}$  são harmônicos esféricos de grau  $l$  e formam  $\mathcal{Y}^l$ .

Dado o espaço vetorial das funções contínuas cuja as primeiras e segundas derivadas parciais também são contínuas,  $C_2 \subset L^2(\mathbb{R}^3)$ , e dado um operador diferencial da forma  $D = \nabla^2 + u(r)$ , com  $u(r)$  função real, então o espaço vetorial

$$K := \{f \in L^2(\mathbb{R}^3) : f \in C_2 \text{ e } Df = 0\}$$

das soluções  $Df = 0$  é formado pelas soluções da forma  $\alpha \otimes Y_{l,m}$ , em que  $\alpha \in \mathcal{I}$ .

### 5.2 Funções de Onda do Elétron

Com isso, podemos definir a função de onda do elétron correspondente a cada número quântico, exceto pelo spin.

**Definição 5.3.** Seja  $n, l$  e  $m$  inteiros não negativos que satisfaçam  $0 \leq l < n$  e  $-l \leq m \leq l$ , a *função de onda do elétron*  $n, l, m$  é dada por

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) := R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

. Em que  $R_{n,l}$  é dado por

$$R_{nl}(r) = -\sqrt{\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[n+l]!^3}} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

com

$$\rho(r) := \frac{2Zr}{na_0}$$

e

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \sum_{k=0}^{n-l-1} (-1)^{k+1} \frac{[(n+l)!]^2}{(n-l-k-1)!(2l+k+1)!k!} \rho^k$$

Para finalizar,

**Definição 5.4.** Seja  $n$ ,  $l$  e  $m$  inteiros não negativos que satisfaçam  $0 \leq l < n$  e  $-l \leq m \leq l$ , a densidade de probabilidade da função de onda do elétron  $n, l, m$  é dada por

$$|\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)|^2 := |R_{n,l}(r)|^2 |Y_{l,m}(\theta, \phi)|^2$$

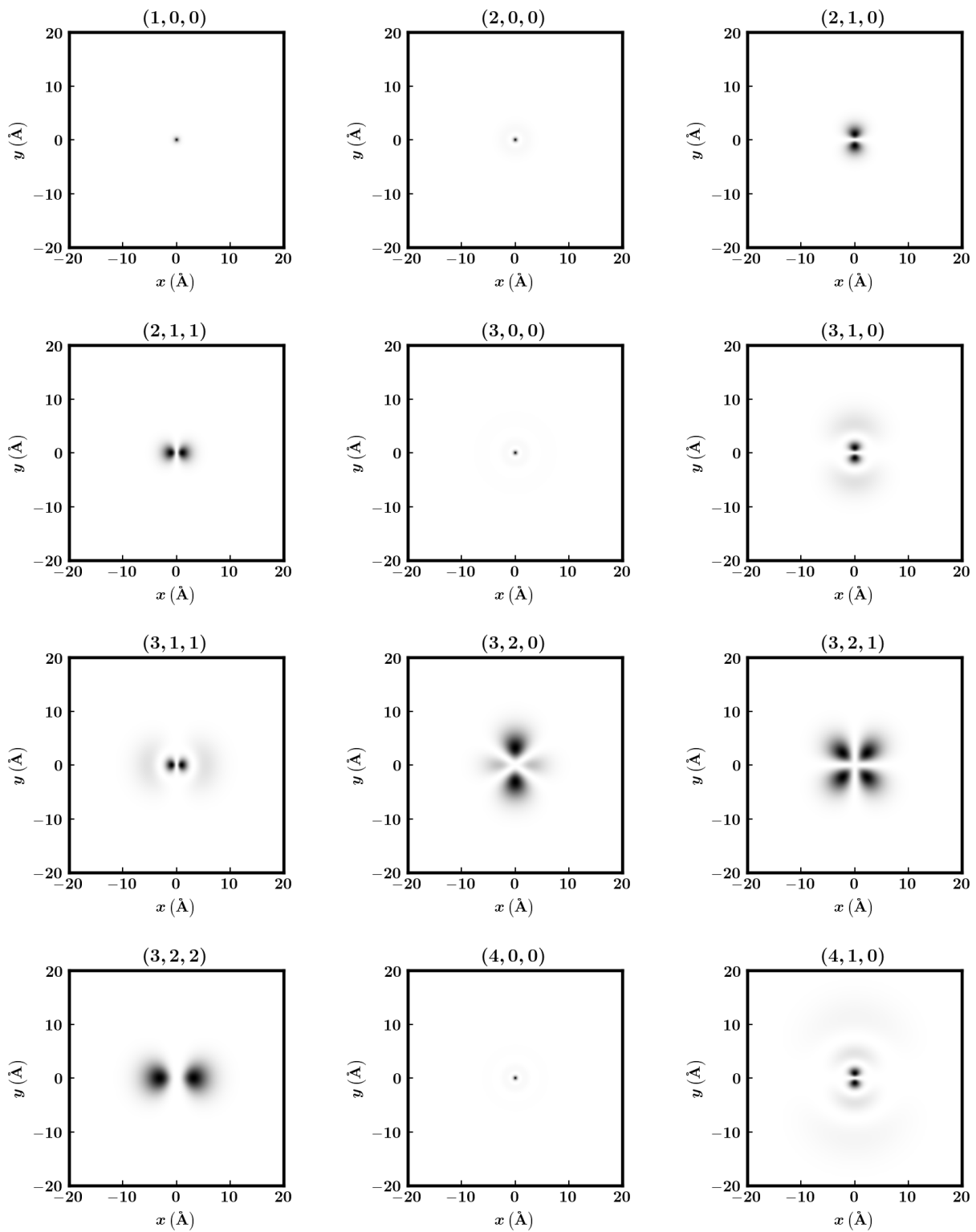
### 5.3 Visualização das Soluções Calculadas em Python

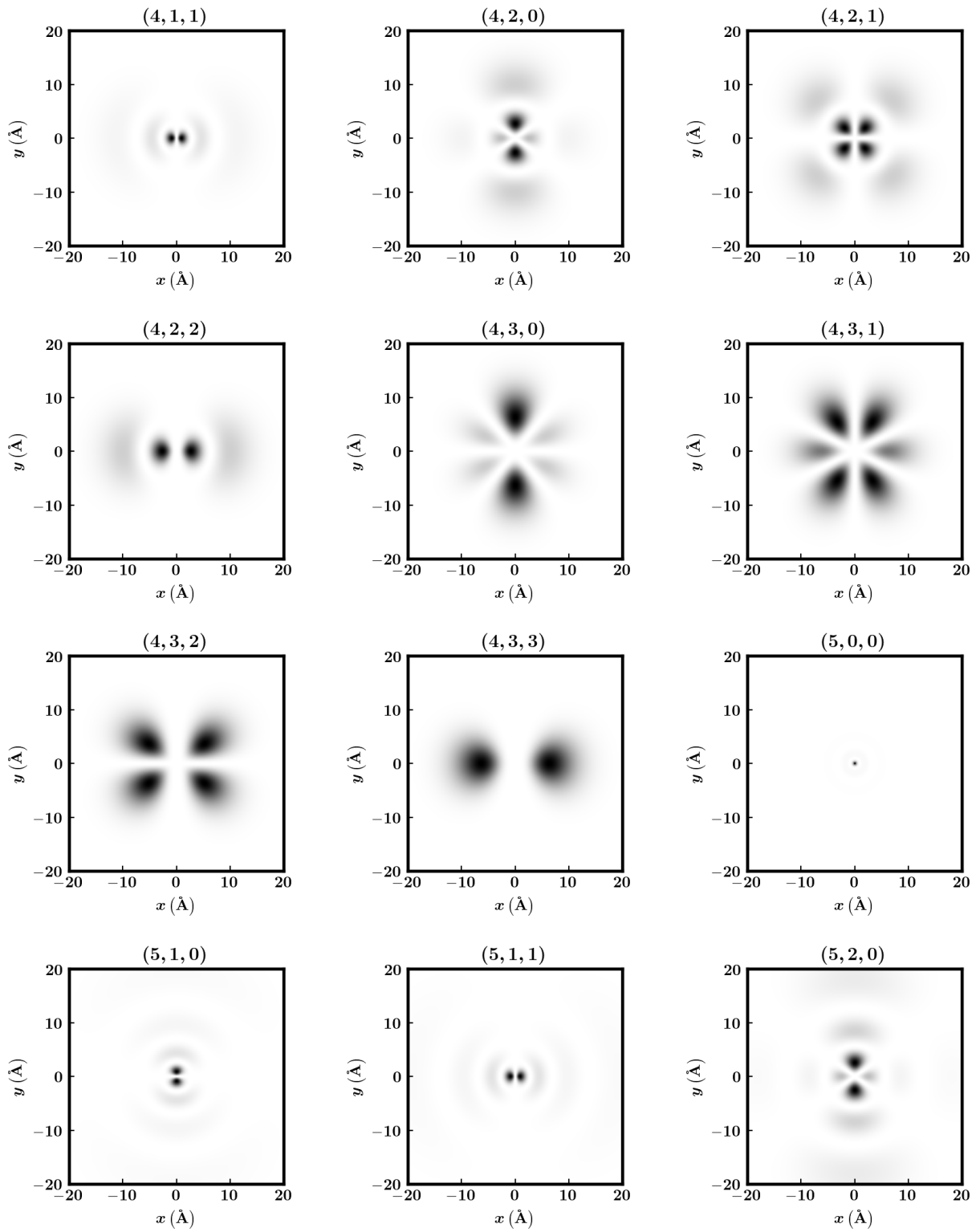
A seguir, seguem as visualizações das formas reais dos harmônicos esféricos em três dimensões, geradas em Python usando a rotina `scipy.special`. Algumas soluções são apresentadas no Apêndice A.

l \ m		-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4
s	0									
p	1									
d	2									
f	3									
g	4									

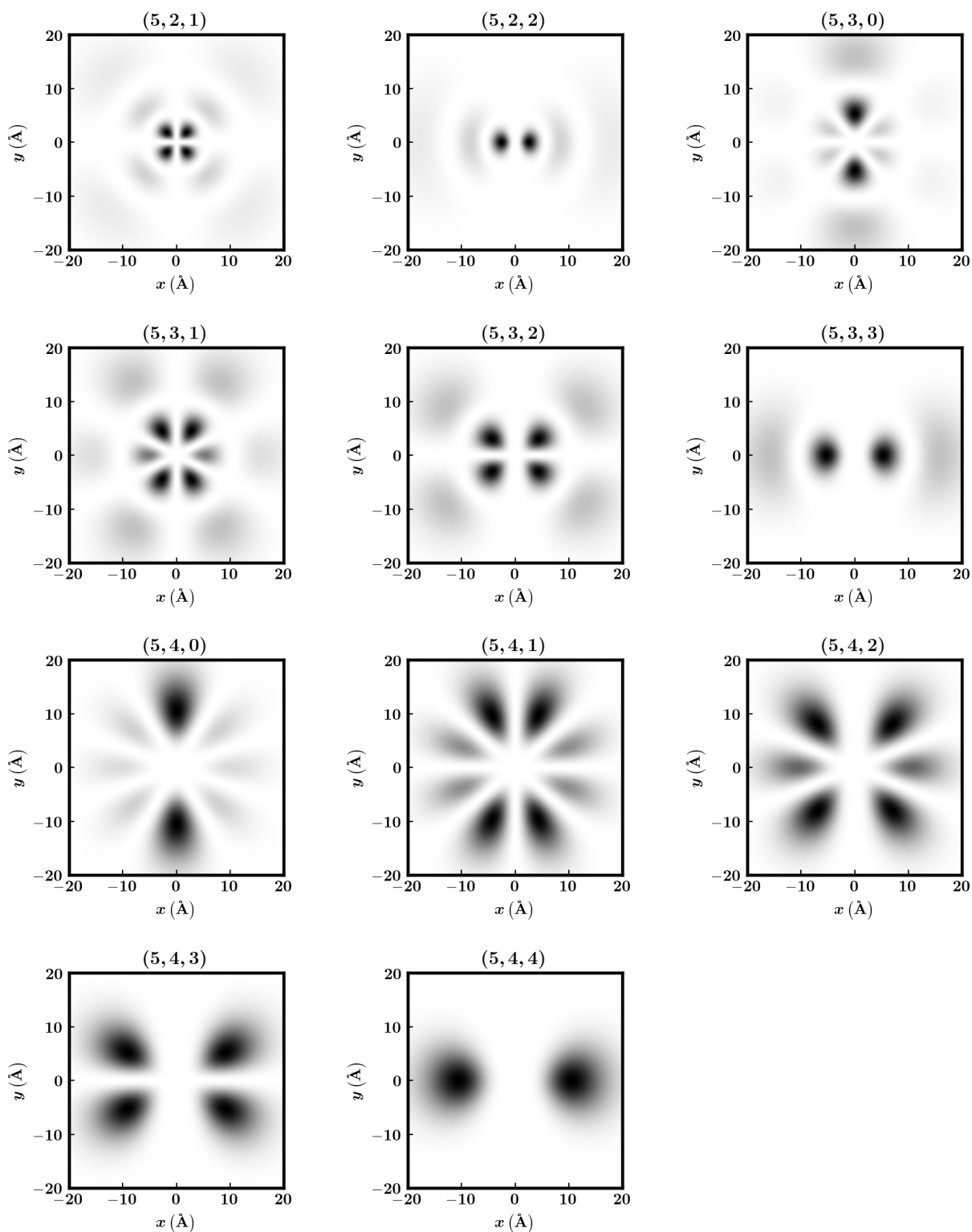
Tabela 4: Visualização de Harmônicos Esféricos em três dimensões

Para finalizar o estudo, seguem algumas visualizações em duas dimensões dos orbitais atômicos do átomo de hidrogênio através do cálculo da densidade de probabilidade da função de onda do elétron para cada número quântico em Python usando a rotina `scipy.special`. Algumas soluções para as funções de onda são apresentadas no Apêndice B. Cada orbital é representado por seus respectivos números quânticos  $(n, l, m)$ , definidos anteriormente, e foram calculados na região  $(x, y) \in [-20 \text{ Å}, 20 \text{ Å}]$ . Os códigos estão referenciados [6] e disponíveis para qualquer uso sob licença do MIT na plataforma GitHub.







Tabela 5: Visualização dos orbitais  $(n, l, m)$  de um elétron em um átomo de hidrogênio

## A Tabela dos Harmônicos Esféricos

l	m	$Y_{l,m}(\theta, \phi)$
0	0	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{\pi}}$
1	-1	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} e^{-i\phi} \sin \theta$
1	0	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$
1	1	$-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} e^{i\phi} \sin \theta$
2	-2	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} e^{-2i\phi} \sin^2 \theta$
2	-1	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} e^{-i\phi} \sin \theta \cos \theta$
2	0	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$
2	1	$-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} e^{i\phi} \sin \theta \cos \theta$
2	2	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} e^{2i\phi} \sin^2 \theta$
3	-3	$\frac{1}{8}\sqrt{\frac{35}{\pi}} e^{-3i\phi} \sin^3 \theta$
3	-2	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{2\pi}} e^{-2i\phi} \sin^2 \theta \cos \theta$
3	-1	$\frac{1}{8}\sqrt{\frac{21}{\pi}} e^{-i\phi} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1)$
3	0	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$
3	1	$-\frac{1}{8}\sqrt{\frac{21}{\pi}} e^{i\phi} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1)$
3	2	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{2\pi}} e^{2i\phi} \sin^2 \theta \cos \theta$
3	3	$-\frac{1}{8}\sqrt{\frac{35}{\pi}} e^{3i\phi} \sin^3 \theta$

Tabela 6: Harmônicos Esféricos para cada número quântico  $l$  e  $m$

## B Tabela das Funções de Onda

<b>n</b>	<b>l</b>	<b>m</b>	$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}a_0^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/a_0}$
2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/a_0} \cos \theta$
2	1	$\pm 1$	$\frac{1}{8\sqrt{2\pi}a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/a_0} \sin \theta e^{\pm i\theta}$
3	0	0	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}a_0^{3/2}} \left(27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$
3	1	0	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}a_0^{3/2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-r/3a_0} \cos \theta$
3	1	$\pm 1$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}a_0^{3/2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-r/3a_0} \sin \theta e^{\pm i\theta}$
3	2	0	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}a_0^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0} (3 \cos^2 \theta - 1)$
3	2	$\pm 1$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}a_0^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\theta}$
3	2	$\pm 2$	$\frac{1}{162\sqrt{\pi}a_0^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\theta}$

Tabela 7: Módulo das Funções de Onda para cada número quântico  $n$ ,  $l$  e  $m$

## Referências

- [1] SINGER, Stephany Frank; **Linearity, Symmetry, and Prediction in the Hydrogen Atom**. Undergraduate Texts in Mathematics: Springer, 2005.
- [2] STERNBERG, Shlomo; **Group Theory and Physics**. Undergraduate Texts in Cambridge: Cambridge University Press, 1994.
- [3] FAZZIO, Adalberto; WATARI, Kazunori. **Introdução à Teoria de Grupos: com aplicações em moléculas e sólidos**. Santa Matia: Ed. UFSM, 1998.
- [4] BEISER, Arthur. **Concepts of Modern Physics**. 6a ed. New York: McGraw-Hill, 2003.
- [5] LOBO, Pedro Henrique Fernandes *et al.* **A smooth path to plot hydrogen atom via Monte Carlo method**. Revista Brasileira de Ensino de Física [online]. 2019, v.41, n.4 [Accessed 12 June 2021] , e20190073. Epub 22 July 2019. ISSN 1806-9126. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2019-0073>.
- [6] GIROTO, Vinicius Henrique Pereira; PINTO, Vinícius Pereira; 2021. Disponível em: [https://github.com/ViniciusGiroto/hydrogen\\_orbitals](https://github.com/ViniciusGiroto/hydrogen_orbitals).

São Carlos, 01 de Julho de 2021