Sonia Regina Alves Nogueira de Sá

MÉTODOS DE CÁLCULO DA TEORIA DOS GRUPOS PARA A MATÉRIA CONDENSADA

Tese de Doutorado

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Rio de Janeiro - julho de 1990

"a felicidade
humana
é composta
de tantas
partes
que alguma
sempre
está faltando"

(BOSSUET)

Quando todas as partes se juntam
o Grupo de Simetria se revela
A Lei de Combinação, em geral, chama-se Morte
e a Álgebra de Grupo, talvez, Eternidade.

A Susana, Anibal e Tião

RESUMO

Este trabalho consiste no estudo sistemático de grupos usados freqüentemente na Física da Matéria Condensada e na Química Quântica. Desenvolvemos basicamente três métodos de cálculo.

O primeiro permite obter todos os subgrupos de grupos solúveis finitos. Mostramos também que é possível usar o método para calcular todos os subgrupos dos grupos infinitos de Shubnikov definindo cópias finitas deles.

O segundo permite calcular recorrentemente a tabela de traços (e irreps) de um grupo, partindo da tabela de traços (e irreps) do grupo final de sua série derivada. Como todos os grupos solúveis possuem uma série derivada que termina no grupo unidade, este cálculo é aplicável a todos os grupos de Shubnikov, sejam eles finitos ou infinitos.

O terceiro é um método simultâneo de rotulação e cálculo das irreps de um grupo finito com pelo menos uma série canônica. Este mesmo método permite adaptar em simetria espaços vetoriais finitos.

ABSTRACT

The aim of this work is a systematic study of the groups associated to Condensed Matter and Quantum Chemistry. The primary goal has been the development of three methods of calculation.

The first one allows the determination of every subgroup of a finite solvable group. We show that it is possible to extend this method to finite copies of an infinite Shubnikov group.

Secondly we give a recurrent method to calculate the character table and the irreps of a group, from the character table and the irreps of the tail group in its derived series. Since every solvable group has a derived series which ends in the unit group, this method also applies to Shubnikov groups.

Finally, the third method simultaneously labels and calculates the irreps of a finite group with at least a canonical sequence. This method also allows the symmetry adaptation of finite vector spaces.

SUMÁRIO

LISTA DE TABELAS

LISTA DE FIGURAS

INTRODUÇÃO

A importância da teoria dos grupos na Física em geral e particularmente na espectroscopia já é notadamente conhecida e comprovada. O estudo sistemático dos grupos que aparecem em problemas de físico-química tem sido feito em muitos textos e artigos amplamente difundidos. Entretanto, as pesquisas mais comuns no tema estão estreitamente relacionadas com grupos específicos associados repetidamente a uma ou outra espectroscopia e/ou ao estudo de moléculas.

Nosso propósito não é resolver exaustivamente um grupo característico de algum problema particular e sim tentar atingir propriedades e resultados gerais de cálculos os mais abrangentes possíveis. Em conseqüência, o objetivo deste trabalho é fundamentalmente um estudo sistemático das seqüências de grupos finitos solúveis e o cálculo das redes que podem ser construídas a partir delas. Para tanto é necessário o conhecimento de tabelas de traços, representações irreduzíveis (irreps), funções base, coeficientes, enfim, todos aqueles dados que levem à profunda compreensão dos grupos em questão. Quando possível, o estudo foi estendido a alguns grupos infinitos que também aparecem com freqüência nos problemas da Física.

Começamos esta tese, dando no Capítulo 1 as ferramentas básicas inerentes à teoria dos grupos e necessárias ao desenvolvimento do trabalho e, no Capítulo 2, as completamos com os conceitos básicos das álgebras semi-simples que serão indispensáveis ao cálculo de rotuladores e à adaptação em simetria. Para facilitar a leitura, os teoremas que permitem a decomposição das álgebras semi-simples em álgebras simples são dados no Apêndice A.

Da Mecânica Quântica sabemos que dado o Hamiltoniano de um sistema e o conjunto de todos os operadores que comutam com ele, esse operadores formam um grupo, chamado vulgarmente Grupo do Hamiltoniano. Os operadores, em geral lineares e unitários, possuem representações cujas funções base estão associadas numa forma bem determinada às autofunções e aos autovalores do Hamiltoniano.

Um aproveitamento máximo da teoria dos grupos implica no conhecimento da teoria das representações irreduzíveis, coeficientes de acoplamento, iso-escalares, técnicas de cálculo baseadas em tensores irreduzíveis, etc. Portanto, é necessário saber escolher as representações mais convenientes. Desta forma, os primeiros passos consistem em determinar as combinações lineares dos conjuntos degenerados de autofunções do

Hamiltoniano que se transformam como as bases das representações irredutíveis de um grupo, e calcular seus coeficientes de acoplamento. Entretanto, dada uma representação de um grupo, uma transformação de semelhança sobre ela gera outra representação equivalente. Uma vez que as funções base e seus coeficientes de acoplamento não são invariantes sob este tipo de transformações, torna-se imperativo estabelecer o menor número de conjuntos de representações equivalentes que permitam tratar todas as situações possíveis de cálculo.

Uma forma de diminuir a arbitrariedade de uma irrep de um grupo consiste em considerar somente irreps adaptadas em simetria às seqüências de seus subgrupos máximos. Este enfoque do problema obriga a estabelecer métodos que permitam a construção da rede total de subgrupos de um dado grupo e o cálculo das irreps adaptadas em simetria a cada seqüência da rede. Por outro lado, estes métodos facilitam o tratamento de sistemas que envolvem descendência em simetria, seja por quebras espontâneas ou não, perturbações, etc.

Outro problema a ser abordado consiste em estender os cálculos desenvolvidos para grupos finitos a grupos infinitos. Esta extensão é imprescindível para os grupos espaciais cristalográficos e magnéticos, conhecidos na literatura por grupos de Shubnikov.

As contribuições mais relevantes que esta tese traz aos problemas já relacionados podem ser resumidas nos seguintes tópicos.

1) *Séries de composição.*

No Capítulo 3, onde tratamos especificamente de seqüências de subgrupos, mostramos que toda série de composição de um grupo solúvel finito é canônica e veremos que esta propriedade pode ser estendida a todo grupo de Shubnikov G, usando a série de composição do grupo fator G/T , sendo T o grupo das translações da rede de Bravais correspondente.

2) *Apresentações de grupos.*

No capítulo 4, desenvolvemos um método para determinar as apresentações de todos os subgrupos máximos de um grupo finito e solúvel. Também mostramos que este processo pode ser estendido aos grupos infinitos de Shubnikov usando "cópias finitas" deles. O resultado permite achar com simplicidade toda a rede de subgrupos de um grupo solúvel.

3) *Tabelas de traços.*

No Capítulo 5 construímos um método iterativo para a obtenção da tabela de traços de qualquer grupo solúvel finito. Como qualquer subgrupo de um grupo solúvel é também solúvel, o processo pode ser usado para calcular as tabelas de traços dos grupos contidos em qualquer seqüência e com elas determinar se uma dada série é ou não canônica. Tratando-se dos grupos infinitos de Shubnikov, o método é aplicável ao cálculo das irreps que contêm uma outra irrep pertencente ao grupo da rede de Bravais para um vetor arbitrário.

4) *Adaptação em simetria e rotuladores.*

Finalmente, no Capítulo 6, desenvolvemos um método numérico que permite adaptar em simetria a uma seqüência canônica as bases dos espaços vetoriais finitos, usando somente as tabelas de traços dos grupos na seqüência. Mostramos que se escolhermos como base do espaço vetorial os elementos do próprio grupo, o método permite também obter as irreps do grupo maior da seqüência, já adaptadas em simetria à seqüência em questão. Ainda neste capítulo construímos rotuladores para as irreps adaptadas segundo seqüências canônicas.

1

CONCEITOS BÁSICOS DA TEORIA DE GRUPOS

Neste capítulo apresentamos um resumo da teoria básica necessária à compreensão do nosso trabalho, na forma de um conjunto ordenado de definições e teoremas. Existem inúmeros livros de Teoria dos Grupos dentre os quais escolhemos alguns que nos parecem mais convenientes e que enumeramos nas referências [1] a [22]. Os onze primeiros apresentam os grupos através de um tratamento mais matemático enquanto que os onze últimos abordam problemas mais específicos de um ponto de vista físico.

1.1- Grupos

Dado um conjunto G, uma *operação algébrica* entre dois elementos do conjunto (e que em geral escreveremos como um produto) é definida como aquela que tem por resultado um valor único, que também pertence a G e pode ser realizada entre quaisquer elementos de G. Ainda mais, a ordem na qual os elementos são tomados é relevante, isto é, se (g_i, g_j) pertencerem a G, $g_i g_j = g_k$ poderá ser diferente de $g_j g_i = g_l$ mas g_k e g_l devem pertencer ao conjunto G.

Diz-se que um conjunto não vazio $\mathbb{G}$, no qual está definida uma operação algébrica chamada *produto*, é ou forma *grupo* (em relação a essa operação) se as seguintes condições forem satisfeitas:

(1) A operação é associativa,

(2) Existe a operação inversa dentro do conjunto.

Se a operação for comutativa, $\mathbb{G}$ será dito um grupo *abeliano* ou *comutativo*.

Um grupo diz-se *finito* quando tem um número finito de elementos. Esse número de elementos chama-se *ordem* do grupo e escreve-se $|\mathbb{G}|$.

Se g é um elemento de $\mathbb{G}$, da condição (2), existe um elemento e_g, único em $\mathbb{G}$, tal que $ge_g = g$, chamado elemento *unidade* ou *identidade* para o elemento g, *sob multiplicação à direita*. Este elemento terá a mesma propriedade em relação a todos os elementos do grupo: se g_i pertence a $\mathbb{G}$ e g_k for um elemento do grupo tal que $g_k g = g_i$ (de (2) g_k existe sempre) então, multiplicando ambos os lados da equação $ge_g = g$ à esquerda por g_k, teremos que $g_k g e_g = g_k g = g_i$. Mas de (2),

$g_k g e_g = g_i e_g$, e portanto $g_i e_g = g_i$, cqd. Provamos assim, a existência e unicidade em $\mathbb{G}$, de um elemento identidade à direita e', tal que $g_i e' = g_i$ $\forall g_i \in \mathbb{G}$. Da mesma forma, podemos provar a existência e unicidade em $\mathbb{G}$ de um elemento identidade à esquerda e'', tal que $e'' g_i = g_i$ $\forall g_i \in \mathbb{G}$. Os elementos e' e e'' coincidem, já que $e''e' = e'$ e $e''e' = e''$. Portanto, em todo grupo existe um elemento único e, tal que $ge = eg = g$ $\forall g \in \mathbb{G}$. Este elemento chama-se *identidade* do grupo $\mathbb{G}$ e a nossa notação para ele será **1**.

Com um raciocínio análogo, podemos provar a existência e unicidade do elemento g^{-1} tal que $g^{-1}g = gg^{-1} = 1$ para todo $g \in \mathbb{G}$. Este elemento chama-se *inversa* de g.

1.1.1- SUBGRUPOS

Um subconjunto $\mathbb{H}$ de um grupo $\mathbb{G}$ chama-se *subgrupo* de $\mathbb{G}$ se ele forma um grupo com a mesma operação definida em $\mathbb{G}$. Então, para dizer que um subconjunto $\mathbb{H}$ de um grupo $\mathbb{G}$ é um subgrupo, é suficiente que ele satisfaça que:

(1) Se $(h_i, h_j) \in \mathbb{H} \implies h_i h_j \in \mathbb{H}$.

(2) Se $h \in \mathbb{H} \implies h^{-1} \in \mathbb{H}$.

Entre os subgrupos de $\mathbb{G}$ estão o próprio $\mathbb{G}$ e $\{1\}$ que são chamados *subgrupos triviais*. Um subgrupo $\mathbb{H}$ é dito *subgrupo próprio* de $\mathbb{G}$ se $\mathbb{H} \neq \mathbb{G}$ e $\mathbb{H} \neq \{1\}$. Se $\mathbb{M}$ for um subgrupo próprio de $\mathbb{G}$ e se para um subgrupo $\mathbb{H}$ de $\mathbb{G}$, a relação $\mathbb{M} \subset \mathbb{H} \subset \mathbb{G}$ implicar que $\mathbb{G} = \mathbb{H}$ ou $\mathbb{H} = \mathbb{M}$, então $\mathbb{M}$ será dito *subgrupo máximo* de $\mathbb{G}$.

Seja **M** um subconjunto de um grupo $\mathbb{G}$ e $\mathbb{H}$ o conjunto de todos os elementos de $\mathbb{G}$ que podem ser escritos como o produto de um número finito de elementos de **M** ou de seus inversos. Isto é, se $h \in \mathbb{H}$, $h = m_1 m_2 \cdots m_n$, onde m_i ou m_i^{-1} pertencem a M. Se $\mathbb{H}$ for subgrupo de $\mathbb{G}$, os seus elementos deverão satisfazer as condições (1) e (2) acima, mas se $h_k \in \mathbb{H}$, então, pela definição de $\mathbb{H}$, $h_k = m_1 m_2 \cdots m_n$ com m_i ou m_i^{-1} pertencendo a M $\forall$ i. Nesta relação estão implícitas as duas condições necessárias. Então, o subgrupo $\mathbb{H}$ de $\mathbb{G}$ será um subgrupo *gerado* pelo subconjunto M e escreveremos $\mathbb{H} = \langle M \rangle$. O conjunto M chama-se *conjunto gerador* ou *conjunto de geradores* do grupo $\mathbb{H}$.

O subgrupo gerado pelo conjunto dos comutadores $[g_i, g_j] = g_i^{-1} g_j^{-1} g_i g_j$ de todos os pares de elementos (g_i, g_j) de um grupo $\mathbb{G}$ é chamado o *grupo derivado* ou *grupo de comutadores* de $\mathbb{G}$.

Quando um grupo é gerado pelas potências de apenas um elemento, ele é chamado *grupo cíclico*. Em outras palavras, se o subconjunto M tiver apenas um elemento m, o subgrupo $\langle m \rangle = \langle M \rangle$ gerado por ele será chamado cíclico. É claro que todas as potências de m pertencem ao subgrupo $\langle m \rangle$. Então, se a ordem n do elemento m for finita, isto é, se n for o menor número inteiro tal que $m^n = 1$, a ordem do grupo cíclico será finita e igual a n.

1.1.2- GRUPOS DE SHUBNIKOV

Do ponto de vista da Física Matemática uma grande parte dos problemas da Teoria do Estado Sólido resume-se na solução matemática da equação de Schrödinger para muitas partículas, na qual o potencial tem propriedades de simetria de um dos chamados *grupos espaciais cristalográficos*.

Um grupo espacial cristalográfico[23] é um grupo formado por todas as operações de simetria de um cristal infinito, que podem ser operações de translação e operações pontuais (que deixam fixo um ponto do sistema): rotações, reflexões e inversão através de uma origem.

Supondo o cristal composto por uma *cela primitiva*[24] que se repete periodicamente formando a rede cristalina (rede de Bravais[25, 26]), o conjunto de todas as operações pontuais que aparecem é o chamado *grupo pontual cristalográfico*, que, em geral, não é um subgrupo do grupo espacial. Podemos formar 73 grupos espaciais cristalográficos, conhecidos como *grupos espaciais simorfos*, tais que o grupo pontual é subgrupo do grupo espacial.

Quando as translações são acrescentadas às operações pontuais surgem novas operações de simetria chamadas rotações *screw* (combinação de rotações e translações não necessariamente ao longo do eixo de rotação) e reflexões *glide* (combinação de reflexões e translações não necessariamente no plano). Com a inclusão destas operações podemos construir 157 grupos espaciais chamados *não simorfos*.

Os 230 grupos espaciais foram estudados por Fedorov por volta de 1890. Posteriormente (1951) Shubnikov introduziu uma nova operação de simetria, ou anti-simetria, a partir da idéia de uma quarta coordenada $\underline{s}$ que assume apenas dois valores. Esta coordenada pode ser o spin das partículas, ou duas cores (branco e preto), ou +1 e -1, etc. Com esta nova coordenada as redes perderam sua simetria original e foram redefinidas de modo que novos grupos espaciais (grupos espaciais *magnéticos* ou *pretos e brancos*) puderam ser construídos. O conjunto de todos estes grupos passou a ser conhecido na literatura como *grupos de*

Shubnikov[27]. Estes grupos são usados para descrever estruturas magnéticas ordenadas, sendo a operação de anti-simetria aquela que inverte o momento magnético.

Ao todo, existem 58 grupos magnéticos pontuais e 1191 grupos magnéticos espaciais, e, considerando os grupos pontuais e espaciais, são 1773 grupos de Shubnikov.

1.1.3- CLASSES LATERAIS

Seja $\mathbb{H}$ um subgrupo de um grupo $\mathbb{G}$. Se $t \in \mathbb{G}$ e $t \notin \mathbb{H}$ (a menos de $t = 1$), o produto $t\mathbb{H}$ chamar-se-á *Classe lateral* ("coset") *à esquerda de* $\mathbb{H}$ *em* $\mathbb{G}$. Claramente $t \in t\mathbb{H}$ pois $\mathbb{H}$ contém a identidade de $\mathbb{G}$. Duas classes laterais à esquerda de $\mathbb{H}$ em $\mathbb{G}$ ou coincidem totalmente ou são disjuntas: sejam $t_1\mathbb{H}$ e $t_2\mathbb{H}$ duas classes laterais à esquerda de $\mathbb{H}$ em $\mathbb{G}$, com um elemento comum, por exemplo $t_1h_i = t_2h_j$ para $(h_i,h_j) \in \mathbb{H}$. Então, $t_1^{-1}t_2 = h_ih_j^{-1} \in \mathbb{H}$ e $t_1^{-1}t_2\mathbb{H} = h_ih_j^{-1}\mathbb{H} = \mathbb{H}$ a menos de reordenamentos. Multiplicando por t_1 à esquerda, temos $t_1t_1^{-1}t_2\mathbb{H} = t_2\mathbb{H} = t_1\mathbb{H}$. Portanto, ou as classes laterais coincidem totalmente ou não existem os elementos h_i e h_j tal que $t_1h_i = t_2h_j$. Assim, mostramos também que uma classe lateral é determinada por qualquer um dos seus elementos, que chama-se *representativo* da classe lateral.

Chamamos *classe lateral à direita* de $\mathbb{H}$ em $\mathbb{G}$ a cada conjunto $\mathbb{H}t$, com $t \in \mathbb{G}$ e $t \notin \mathbb{H}$. As propriedades mostradas para as classes laterais à esquerda valem para as classes laterais à direita. O número de classes laterais à esquerda e à direita de $\mathbb{H}$ em $\mathbb{G}$ é o mesmo e chama-se *índice de* $\mathbb{H}$ *em* $\mathbb{G}$.

TEOREMA DE LAGRANGE - A ordem e o índice de um subgrupo de um grupo finito são divisores da ordem do grupo.

Demonstração:

Se a ordem de um grupo finito $\mathbb{G}$ for $|\mathbb{G}|$ e se $\mathbb{H}$ for um subgrupo de ordem $|\mathbb{H}|$ e índice j em $\mathbb{G}$, então cada classe lateral à esquerda de $\mathbb{H}$ em $\mathbb{G}$ terá $|\mathbb{H}|$ elementos, e portanto, $|\mathbb{G}| = j|\mathbb{H}|$.

Desde que a ordem de um elemento g é igual à ordem do subgrupo cíclico $\langle g \rangle$ então, do Teorema de Lagrange, a ordem de cada elemento de um grupo finito é um divisor da ordem do grupo e, portanto, cada grupo cuja ordem seja um número primo, é cíclico e só tem subgrupos máximos triviais.

Um subgrupo $\mathbb{H}$ de um grupo $\mathbb{G}$ chama-se *normal* ou *invariante* ou *autoconjugado* se suas classes laterais à esquerda e à direita forem iguais. Se $\mathbb{H}$ for subgrupo normal de $\mathbb{G}$, nossa notação será $\mathbb{G} \triangleright \mathbb{H}$ ou $\mathbb{H} \triangleleft \mathbb{G}$.

Se $\mathbb{H}$ for um subgrupo invariante de um grupo $\mathbb{G}$ e estiver contido num subgrupo $\mathbb{F}$ de $\mathbb{G}$, então $\mathbb{H}$ será invariante de $\mathbb{F}$. Mas, se $\mathbb{H}$ for invariante de $\mathbb{G}$ e $\mathbb{K}$ for invariante de $\mathbb{H}$, apesar de $\mathbb{K}$ ser subgrupo de $\mathbb{G}$, ele não será necessariamente invariante de $\mathbb{G}$, ou seja, a propriedade de ser normal não é transitiva.

Um elemento $g_i \in \mathbb{G}$ diz-se *conjugado* a um elemento $g_j \in \mathbb{G}$ se existir outro elemento g de $\mathbb{G}$ tal que $g_i = gg_jg^{-1}$. Os elementos conjugados entre si de um grupo, formam uma *classe de conjugação*. Cada elemento de um grupo pertence a apenas uma classe. O elemento identidade forma classe por si mesmo.

Se $\mathbb{H}$ for um subgrupo de $\mathbb{G}$ e $g \in \mathbb{G}$, então $\mathbb{H}^g = \langle ghg^{-1} | \forall h \in \mathbb{H} \rangle$ também será obviamente um subgrupo de $\mathbb{G}$. Chama-se *subgrupo conjugado* a $\mathbb{H}$ e tem o mesmo número de elementos que $\mathbb{H}$ (uma definição alternativa de subgrupo invariante $\mathbb{H}$ de $\mathbb{G}$ é que $\mathbb{H}$ seja idêntico a todos seus subgrupos conjugados). É fácil ver que um subgrupo $\mathbb{H}$ é invariante se e somente se ele contém classes de conjugação completas de elementos de $\mathbb{G}$. Segue então que todos os subgrupos de um grupo abeliano são subgrupos invariantes.

1.2- Homomorfismos e Isomorfismos

Sejam G e G' dois conjuntos em cada um dos quais está definida uma operação algébrica ou *multiplicação*. Diz-se que G e G' são *isomorfos* com relação a estas duas operações se existir um *mapeamento* ("mapping") ϕ, um-a-um dos elementos de G nos elementos de G', tal que se (g_i, g_j) pertencentes a G corresponderem respectivamente aos elementos (g'_i, g'_j) pertencentes a G', então a g_k $(= g_i g_j)$ de G corresponderá somente g'_k $(= g'_i g'_j)$ de G', ou seja, $\phi(g_k) = g'_k$. Tal mapeamento chama-se *isomorfismo* entre G e G' e escreve-se $G \sim G'$.

Da definição é óbvio que dois conjuntos finitos isomorfos têm o mesmo número de elementos. Esses dois conjuntos poderão diferir na natureza de seus elementos e/ou na operação, mas eles são indistingüíveis em relação às suas propriedades: dado um conjunto com uma operação, as propriedades que ele possuir em relação à operação valem para todos os conjuntos isomorfos a ele.

Omitindo a correspondência um-a-um e que $\phi(g)$ cobre todo $\mathbb{G}'$, obteremos uma generalização do conceito de mapeamento isomorfo. Sejam G e G' conjuntos com uma operação ou multiplicação. Consideremos um mapeamento ϕ do conjunto G no conjunto G' que associa a cada elemento g de G uma imagem bem definida $g' = \phi(g)$ em G'. Este mapeamento chama-se *homomorfismo* se para todo (g_i, g_j) de G com $\phi(g_i) = g'_i$ e $\phi(g_j) = g'_j$ for satisfeito que $\phi(g_i g_j) = g'_i g'_j$. Quando a correspondência é <u>um-a-um</u> o homomorfismo chama-se *monomorfismo*, e quando é <u>sobre</u> *epimorfismo*. Obviamente se um homomorfismo é simultaneamente um epimorfismo e um monomorfismo, ele é um isomorfismo.

Em particular, se os conjuntos G e G' formarem grupos $\mathbb{G}$ e $\mathbb{G}'$, o anterior também valerá e poderemos dizer que, uma função f definida sobre um grupo $\mathbb{G}$, tal que f mapea $\mathbb{G}$ em $\mathbb{G}'$, é um homomorfismo de $\mathbb{G}$ para $\mathbb{G}'$ se a relação $f(g_i g_j) = f(g_i)f(g_j)$ for satisfeita por todo (g_i, g_j) de $\mathbb{G}$. Se um homomorfismo de $\mathbb{G}$ em $\mathbb{G}'$ induzir uma correspondência um-a-um entre todos os seus elementos, ele será um isomorfismo; diremos que $\mathbb{G}$ e $\mathbb{G}'$ são grupos isomorfos, e escreveremos $\mathbb{G} \sim \mathbb{G}'$.

Se ϕ for um homomorfismo de $\mathbb{G}$ em $\mathbb{G}'$, e $\mathbf{1}'$ for a identidade de $\mathbb{G}'$, o conjunto $\mathbb{K} = \{g \in \mathbb{G} \mid \phi(g) = \mathbf{1}'\}$ chama-se *núcleo* ("kernel") de ϕ e escrevemos Ker ϕ. Obviamente o Ker ϕ é um subgrupo invariante de $\mathbb{G}$, já que se $k \in \mathbb{K}$ e $g \in \mathbb{G}$ teremos então $\phi(g^{-1}kg) = \phi(g)^{-1}\phi(k)\phi(g) = \mathbf{1}'$.

Da mesma forma, se ϕ for um homomorfismo de $\mathbb{G}$ em $\mathbb{G}'$, definimos o conjunto $\mathrm{Im}\ \phi = \{\phi(g) | g \in \mathbb{G}\}$ como a *imagem* de $\mathbb{G}$ por ϕ ou a *imagem do homomorfismo* ϕ. Então se ϕ for um monomorfismo teremos que Ker $\phi = \mathbf{1}$, se for um epimorfismo Im $\phi = \mathbb{G}'$, e ϕ será um isomorfismo se e somente se Ker $\phi = \mathbf{1}$ e Im $\phi = \mathbb{G}'$.

O conjunto de todos os grupos isomorfos a um dado grupo $\mathbb{G}$ chama-se *classe de isomorfismo* de $\mathbb{G}$. Por exemplo, todos os grupos cíclicos de uma dada ordem formam uma classe de isomorfismo, pois podemos fazer um mapeamento isomorfo de cada um deles sobre o grupo das raízes n-ésimas da unidade.

1.2.1- TEOREMAS DO ISOMORFISMO

A seguir enunciaremos os chamados teoremas do isomorfismo. Devido ao seu uso repetido na demostração de outras propriedades dos grupos, é conveniente tratá-los neste capítulo. A demonstração destes teoremas segue uma forma completamente padronizada. Primeiro damos o mapeamento conveniente para demonstrar o teorema e depois mostramos que este mapeamento é um homomorfismo. Em seguida determinamos a imagem e o núcleo do homomorfismo, de modo que a conclusão fica evidente.

Antes de começar com os enunciados dos teoremas faz-se necessário introduzir o conceito de grupo fator. Se $\mathbb{H}$ for um subgrupo invariante de $\mathbb{G}$, o conjunto de classes laterais de $\mathbb{H}$ em $\mathbb{G}$ com a lei de composição $t_i\mathbb{H}\cdot t_j\mathbb{H} = (t_i t_j)\mathbb{H}$ forma o chamado *grupo fator* (ou *quociente*) de $\mathbb{G}$, cujo elemento identidade é $\mathbf{1}\mathbb{H} = \mathbb{H}$. Escreve-se $\mathbb{G}/\mathbb{H}$ e sua ordem é $|\mathbb{G}|/|\mathbb{H}| = j$, o índice de $\mathbb{H}$ em $\mathbb{G}$. A inversa de um elemento genérico $t\mathbb{H}$ é $t^{-1}\mathbb{H}$ e a operação é associativa: $t_i\mathbb{H}\cdot(t_j\mathbb{H}\cdot t_k\mathbb{H}) = (t_i\mathbb{H}\cdot t_j\mathbb{H})\cdot t_k\mathbb{H}$.

1° TEOREMA DO ISOMORFISMO - Seja $\alpha : \mathbb{G} \to \mathbb{H}$ um homomorfismo do grupo $\mathbb{G}$ no grupo $\mathbb{H}$ tal que:

$$\mathbb{K} = \mathrm{Ker}\ \alpha = \{ g \in \mathbb{G} \mid \alpha(g) = \mathbf{1}_{\mathbb{H}} \} \quad \text{e} \quad \mathbb{I} = \mathrm{Im}\ \alpha = \{ \alpha(g) \} .$$

Para tal homomorfismo valem as seguintes proposições:

(i) O mapeamento $\theta: (g\mathbb{K}) \to \alpha(g)$ gera o isomorfismo $\theta: (\mathbb{G}/\mathbb{K}) \to \mathbb{I}$.

(ii) Se $\mathbb{N} \triangleleft \mathbb{G}$, então o mapeamento $\varphi(g) \to g\mathbb{N}$ é um homomorfismo tal que $\varphi : \mathbb{G} \to \mathbb{G}/\mathbb{N}$ onde Ker $\varphi = \mathbb{N}$ e Im $\varphi = \mathbb{G}/\mathbb{N}$. Este homomorfismo é chamado *natural* ou *canônico*.

Demonstração:

(i) Primeiro observemos que ϑ está completamente definido, pois se $k \in \mathbb{K}$, então $\vartheta(g\mathbb{K}) = \alpha(gk) = \alpha(g)$. Da definição de ϑ temos que:

$$\vartheta(g_1\mathbb{K})\vartheta(g_2\mathbb{K}) = \alpha(g_1)\alpha(g_2) = \alpha(g_1g_2) = \vartheta(g_1g_2\mathbb{K})$$

onde $g_i \in \mathbb{G}/\mathbb{K}$. Este resultado mostra que ϑ é um homomorfismo com imagem Im $\alpha = \mathbb{G}/\mathbb{K}$. O núcleo de ϑ pode ser determinado levando em conta que se $g \in \mathbb{K}$, então temos que $\alpha(g) = 1_{\mathbb{H}}$, e portanto, Ker $\vartheta = 1_{\mathbb{G}/\mathbb{K}}$. Isto mostra que $\vartheta : (\mathbb{G}/\mathbb{K}) \to \mathbb{I}$ é um isomorfismo.

(ii) Da definição de φ temos que

$$\varphi(g_1)\varphi(g_2) = g_1\mathbb{N}\ g_2\mathbb{N} = g_1g_2\mathbb{N} = \varphi(g_1g_2)$$

portanto φ é um homomorfismo. Se $g_2 \in \mathbb{N}$, então $\varphi(g_1)\varphi(g_2) = \varphi(g_1)$ o que nos mostra que Ker $\varphi = \mathbb{N}$ e Im $\varphi = \mathbb{G}/\mathbb{N}$.

2° TEOREMA DO ISOMORFISMO - Seja $\mathbb{H}$ um subgrupo de um grupo $\mathbb{G}$ e $\mathbb{N}$ um subgrupo normal de $\mathbb{G}$. Então, $\mathbb{N} \cap \mathbb{H}$ é um subgrupo invariante de $\mathbb{H}$ e o mapeamento $\varphi: (\mathbb{H}/(\mathbb{N}\cap\mathbb{H})) \to \mathbb{N}\mathbb{H}/\mathbb{N}$ é um isomorfismo.

Demonstração:

Suponhamos que m_1 e m_2 pertencem a $\mathbb{N} \cap \mathbb{H}$. Pela clausura de $\mathbb{H}$ e de $\mathbb{N}$ o produto m_1m_2 pertencerá também a $\mathbb{N} \cap \mathbb{H}$. Além disso, se $m \in \mathbb{N} \cap \mathbb{H}$ a sua inversa também pertencerá a $\mathbb{N} \cap \mathbb{H}$, e portanto $\mathbb{N} \cap \mathbb{H}$ é um subgrupo de $\mathbb{H}$. Uma vez que $\mathbb{N}$ é invariante em $\mathbb{G}$, resulta que $\mathbb{N} \cap \mathbb{H}$ é invariante em $\mathbb{H}$. Sejam $h \in \mathbb{H}$ e a função $\alpha(h) = h\mathbb{N}$. Então,

$\alpha(h_1)\alpha(h_2) = h_1h_2\mathbb{N} = \alpha(h_1h_2)$ é um homomorfismo do grupo $\mathbb{H}$ em $\mathbb{HN}/\mathbb{N}$ com imagem $\mathbb{HN}/\mathbb{N}$ e Ker $\alpha = \mathbb{N}\cap\mathbb{H}$. Mas do primeiro teorema, temos que $\mathbb{H}/(\mathbb{N}\cap\mathbb{H})$ é isomorfo à imagem de α, isto é $\mathbb{HN}/\mathbb{N}$.

3^o TEOREMA DO ISOMORFISMO - Sejam $\mathbb{M}$ e $\mathbb{N}$ subgrupos normais do grupo $\mathbb{G}$ e tais que $\mathbb{N} \leq \mathbb{M}$. Então temos que $\mathbb{M}/\mathbb{N}$ é normal em $\mathbb{G}/\mathbb{N}$ e $(\mathbb{G}/\mathbb{N})/(\mathbb{M}/\mathbb{N}) \sim \mathbb{G}/\mathbb{M}$.

Demonstração:

A primeira parte do teorema é evidente e nos permite definir o grupo fator $(\mathbb{G}/\mathbb{N})/(\mathbb{M}/\mathbb{N})$. Para mostrar a segunda parte, definimos o mapeamento $\alpha(g\mathbb{N}) \rightarrow g\mathbb{M}$, que é um homomorfismo de $\mathbb{G}/\mathbb{N}$ em $\mathbb{G}/\mathbb{M}$ com imagem $\mathbb{G}/\mathbb{M}$. Então $g \in \mathbb{G}/\mathbb{N}$, pertencerá também ao núcleo de α se estiver contido em $\mathbb{M}/\mathbb{N}$ e, pelo primeiro teorema, obtemos: $(\mathbb{G}/\mathbb{N})/(\mathbb{M}/\mathbb{N}) \sim \mathbb{G}/\mathbb{M}$.

1.2.2- SUBGRUPOS DA IMAGEM DE UM HOMOMORFISMO

Suponhamos que $\alpha : \mathbb{G} \rightarrow \mathbb{G}'$ é um homomorfismo. Se $\mathbb{H}$ for um subgrupo de $\mathbb{G}$, então $\mathbb{H}' = \alpha(\mathbb{H}) = \{ \alpha(g) \in \mathbb{G} \mid g \in \mathbb{G}'\}$ será um subgrupo de $\mathbb{G}'$. Ainda mais, se $\mathbb{H}$ for invariante em $\mathbb{G}$, vale que $ghg^{-1} \in \mathbb{H}$ e portanto teremos $\alpha(g)\alpha(h)\alpha(g)^{-1} \in \mathbb{H}'$ o que mostra que $\mathbb{H}' \triangleleft \mathbb{G}'$. Inversamente, suponhamos que $\mathbb{H}'$ é um subgrupo de $\mathbb{G}'$, provaremos então que o conjunto $\alpha^{-1}(\mathbb{H}') = \{g \in \mathbb{G} \mid \alpha(g) \in \mathbb{H}'\}$ é um subgrupo de $\mathbb{G}$ que chamaremos $\mathbb{H}$. Sejam h_1 e h_2 dois elementos pertencentes ao conjunto $\alpha^{-1}(\mathbb{H}')$, uma vez que $\alpha(h_1)\alpha(h_2) = \alpha(h_1h_2)$, concluímos que $h_1h_2 \in \alpha^{-1}(\mathbb{H}')$. Além disso, se $h \in \alpha^{-1}(\mathbb{H}')$ como $\alpha(h^{-1}) = \alpha(h)^{-1}$, então $h^{-1} \in \alpha^{-1}(\mathbb{H}')$, e portanto, $\alpha^{-1}(\mathbb{H}')$ é um subgrupo de $\mathbb{G}$.

Corolário: Da definição de $\alpha^{-1}(\mathbb{H}')$, temos que $\alpha(\alpha^{-1}(\mathbb{H}')) = \mathbb{H}'$, portanto podemos escrever $\alpha^{-1}(\mathbb{H}') = \mathbb{H}$ já que $\mathbb{H}' = \alpha(\mathbb{H})$. Novamente, se $\mathbb{H}'$ for invariante em $\mathbb{G}'$, teremos que $\mathbb{H}$ também será invariante em $\mathbb{G}$.

Sejam $\alpha(\mathbb{H}_1)$ e $\alpha(\mathbb{H}_2)$, dois subgrupos do grupo $\alpha(\mathbb{H}) = \mathbb{G}/\mathbb{K}$. Provaremos que as seguintes relações são verdadeiras:

(i) $\alpha(\mathbb{H}_2) \leq \alpha(\mathbb{H}_1) \leq \alpha(\mathbb{G}) \Leftrightarrow \mathbb{K} \leq \mathbb{H}_2 \leq \mathbb{H}_1 \leq \mathbb{G}$, e $|\mathbb{H}_1 : \mathbb{H}_2| = |\alpha(\mathbb{H}_1) : \alpha(\mathbb{H}_2)|$.

(ii) $\alpha(\mathbb{H}_1)$ é conjugado a $\alpha(\mathbb{H}_2)$ se e somente se $\mathbb{H}_1$ é conjugado a $\mathbb{H}_2$.

(iii) $\alpha(\mathbb{H}_2) \triangleleft \alpha(\mathbb{H}_1)$ se e somente se $\mathbb{H}_2 \triangleleft \mathbb{H}_1$.

Demonstração:

(i) Suponhamos que $\mathbb{H}_2 \leq \mathbb{H}_1$. Se $g \in \langle \mathbb{H}_1 - \mathbb{H}_2 \rangle$, então, por definição, $\alpha(g) \in \langle \alpha(\mathbb{H}_1) - \alpha(\mathbb{H}_2) \rangle$ e portanto $\alpha(\mathbb{H}_2) \leq \alpha(\mathbb{H}_1)$. Usando o mesmo raciocínio para $\alpha^{-1}(\mathbb{H}_i)$, concluímos que a primeira parte de (i) vale. Para mostrar a igualdade dos índices tomemos $\mathbb{H}_1 = \langle t_1\mathbb{H}_2, \cdots, t_n\mathbb{H}_2 \rangle$ onde $n = |\mathbb{H}_1 : \mathbb{H}_2|$. Então, $\alpha(\mathbb{H}_1) = \langle \alpha(t_1)\alpha(\mathbb{H}_2), \cdots, \alpha(t_n)\alpha(\mathbb{H}_2) \rangle$ e suponhamos que $\alpha(t_i) = g\,\alpha(t_j)$ para um dado par i,j com $g \in \mathbb{H}_2$. Usando α^{-1} concluímos que $t_i t_j^{-1} \in \mathbb{H}_2$, o que contraria o fato de duas classes laterais serem disjuntas. Logo $|\alpha(\mathbb{H}_1) : \alpha(\mathbb{H}_2)| = n = |\mathbb{H}_1 : \mathbb{H}_2|$.

(ii) Se $\mathbb{H}_1 = g\mathbb{H}_2 g^{-1}$ onde $g \in \mathbb{G}$, usando o homomorfismo α obtemos: $\alpha(\mathbb{H}_1) = \alpha(g)\alpha(\mathbb{H}_2)\alpha(g)^{-1}$.

(iii) De (ii) temos que dois subgrupos conjugados são mapeados tal que suas imagens são subgrupos conjugados; logo se $\mathbb{H}_1$ for invariante, $\alpha(\mathbb{H}_1)$ também o será.

1.2.3- AUTOMORFISMOS

Um mapeamento isomorfo de um grupo sobre si mesmo chama-se *automorfismo* do grupo. Os automorfismos preservam todas as propriedades dos grupos.

Seja $g \in \mathbb{G}$, o mapeamento que leva um elemento $g_i \in \mathbb{G}$ no elemento $g^{-1}g_i g$, isto é, a transformação de todos os elementos do grupo por g, é um automorfismo de $\mathbb{G}$. Este tipo de automorfismo chama-se *conjugação* por g ou *automorfismo interno* de $\mathbb{G}$ (por g). Os demais automorfismos do grupo $\mathbb{G}$ chamam-se *externos*. Sob um automorfismo interno cada classe de elementos conjugados é mapeada em si mesma.

Podemos definir um produto ou multiplicação de automorfismos no sentido deles serem aplicados em sucessão. O produto de dois automorfismos é um automorfismo e a operação é associativa. Definindo o automorfismo identidade como a transformação pelo elemento identidade do grupo e como obviamente existe mapeamento inverso para todo automorfismo, vemos que todos os automorfismos de um grupo $\mathbb{G}$ formam grupo, o *grupo dos automorfismos de* $\mathbb{G}$, Aut$\mathbb{G}$. Por sua vez, os automorfismos internos formam um subgrupo invariante de Aut$\mathbb{G}$, chamado *grupo dos automorfismos internos de* $\mathbb{G}$, Inn$\mathbb{G}$.

Seja $\mathbb{Z}(\mathbb{G})$ o *grupo do centro* de $\mathbb{G}$, isto é, o grupo de todos os elementos de $\mathbb{G}$ que comutam com todos os restantes (obviamente $\mathbb{Z}(\mathbb{G}) \triangleleft \mathbb{G}$). Se associarmos com cada elemento de $\mathbb{G}$ o automorfismo interno induzido por ele mesmo, obteremos um mapeamento homomorfo de $\mathbb{G}$ sobre Inn$\mathbb{G}$, no qual os elementos de $\mathbb{Z}(\mathbb{G})$ serão *mapeados* sobre a identidade de Inn$\mathbb{G}$. Então, pelo primeiro teorema do isomorfismo teremos que Inn$\mathbb{G} \sim \mathbb{G}/\mathbb{Z}(\mathbb{G})$.

1.3- Representações

A teoria dos grupos na física está estreitamente associada com transformações de simetria dos sistemas em estudo. Portanto, queremos centralizar o nosso interesse nas realizações de grupos de transformações lineares nos espaços vetoriais da física. O produto de transformações lineares é associativo (não necessariamente comutativo) e tem inversa. Portanto, ele satisfaz a condição de grupo. Então, um conjunto de transformações lineares, com inversa, fechado em relação à multiplicação dos operadores que o representam, forma um grupo de transformações lineares ou grupo de operadores.

Se existir um homomorfismo entre um grupo $\mathbb{G}$ e um grupo de operadores $\mathcal{O}(\mathbb{G})$ num espaço vetorial linear V, diremos que $\mathcal{O}(\mathbb{G})$ forma ou é uma *representação* do grupo $\mathbb{G}$. A *dimensão* da representação será a dimensão de V. Se o homomorfismo for um isomorfismo, isto é, se o seu núcleo for igual a um, a representação será dita *fiel* ("faithful"). Caso contrário, ela é *degenerada*. Todo grupo possui ao menos uma representação fiel, a representação *regular*, isto é aquela que consiste em tomar os elementos do grupo como a base do espaço vetorial V.

Especificamente, uma representação é um mapeamento ϕ de um elemento $g \in \mathbb{G}$ em $\mathcal{O}(g)$, sendo $\mathcal{O}(g)$ um operador do espaço V tal que $\mathcal{O}(g_1)\cdot\mathcal{O}(g_2) = \mathcal{O}(g_1 g_2)$. Conseqüentemente, os operadores da representação satisfazem as mesmas regras de multiplicação que os elementos do grupo.

Consideremos uma representação de dimensão finita e tomemos um conjunto de vetores base $\{ |e_i\rangle,\ i = 1,2,\cdots,n \}$ em V. Então, os operadores $\mathcal{O}(g)$ terão uma realização matricial $\Gamma(g)$

tal que

$$\mathcal{O}(g)\ |e_i\rangle = \sum_{j=1}^{n} \Gamma(g)_{ji}\ |e_j\rangle\ , \qquad \forall\ g \in \mathbb{G}\ . \tag{1.3.1}$$

Para dois operadores, teremos a lei de composição

$$\mathcal{O}(g_2)\cdot\mathcal{O}(g_1)\ |e_i\rangle = \mathcal{O}(g_2) \sum_{k=1}^{n} (\Gamma(g_1)_{ki}\ |e_k\rangle\ )$$

$$= \sum_{j=1}^{n} (\ \sum_{k=1}^{n} \Gamma(g_2)_{jk}\ \Gamma(g_1)_{ki})\ |e_j\rangle =$$

$$= \sum_{j=1} \Gamma(g_2 g_1)_{ji}\ |e_j\rangle = \mathcal{O}(g_2 g_1)\ |e_i\rangle \tag{1.3.2}$$

Como $\langle\ |e_i\rangle\ \rangle$ é uma base, $\Gamma(g_1)\cdot\Gamma(g_2) = \Gamma(g_1 g_2)$, onde está implícita a multiplicação matricial.

Então, chama-se *representação matricial* de um grupo $\mathbb{G}$ de elementos g_i a um grupo de matrizes $\Gamma(\mathbb{G}) = \langle\ \Gamma(g_i),\ \forall\ g_i \in \mathbb{G}\ \rangle$ homomorfo a $\mathbb{G}$. A lei de combinação é sempre o produto matricial e portanto as matrizes só podem ser quadradas. A dimensão da matriz é a dimensão da representação e como $\Gamma(g)\cdot\Gamma(1) = \Gamma(g1) = \Gamma(g)$, então $\Gamma(1) = \mathbf{1}$ é a matriz unidade. Assim, o elemento identidade do grupo é sempre representado pela matriz unidade em cada representação.

Como o produto de matrizes deve satisfazer apenas a tabela de multiplicação do grupo, existem infinitas representações para um dado grupo.

Existe sempre uma representação unidimensional para todo grupo $\mathbb{G}$, chamada *trivial* ou *identidade* na qual todos os elementos do grupo são mapeados à mesma matriz identidade unidimensional **1** e portanto tem núcleo igual a $\mathbb{G}$.

Se um grupo $\mathbb{G}$ tiver um subgrupo invariante $\mathbb{H}$ não trivial, qualquer representação Γ do grupo fator $\mathbb{G}/\mathbb{H}$ é também uma representação (degenerada) de $\mathbb{G}$. Isto porque o mapeamento que leva $g \in \mathbb{G}$ em $g\mathbb{H} \in \mathbb{G}/\mathbb{H}$ (e $g\mathbb{H}$ em $\mathcal{O}(g\mathbb{H})$) é um homomorfismo de $\mathbb{G}$ no grupo das transformações lineares $\mathcal{O}(\mathbb{G}/\mathbb{H})$. Portanto, Γ é uma representação, mas não é fiel pois esse mapeamento é de vários elementos para um. Reciprocamente, se $\Gamma(\mathbb{G})$ for uma representação degenerada de $\mathbb{G}$, então $\mathbb{G}$ terá no mínimo um subgrupo invariante $\mathbb{H}$ tal que $\Gamma(\mathbb{G})$ define uma representação fiel do grupo fator $\mathbb{G}/\mathbb{H}$. Isto provém do fato de que o núcleo de um homomorfismo de $\mathbb{G}$ em $\mathbb{G}'$, como vimos, é um subgrupo invariante de $\mathbb{G}$ e o grupo fator $\mathbb{G}/\mathbb{H}$ é isomorfo a $\mathbb{G}'$. Então, todas as representações (exceto a trivial) de grupos *simples* (grupos que não têm subgrupos próprios invariantes), são fieis.

Duas representações de um mesmo grupo chamam-se *equivalentes* se elas estiverem relacionadas por uma transformação de semelhança. Evidentemente, elas terão a mesma dimensão.

Definimos como *traço de uma representação* Γ de $\mathbb{G}$, o conjunto de traços $\chi^{\Gamma} = \{\chi^{\Gamma}(g),\ \forall\ g \in \mathbb{G}\}$ das matrizes que representam os elementos de $\mathbb{G}$, ou seja o conjunto de

$$\chi^{\Gamma}(g) = \sum_{i} \Gamma_{ii}(g) \ . \qquad (1.3.3)$$

χ^{Γ} é um conjunto de $|\mathbb{G}|$ traços não necessariamente distintos. Note-se que para qualquer representação, $\chi^{\Gamma}(\mathbf{1}) = |\Gamma|$ (a dimensão da representação) e que as representações unidimensionais coincidem com os próprios traços.

Note-se também que duas representações equivalentes têm o mesmo traço.

1.3.1- REPRESENTAÇÕES IRREDUZIVEIS

Seja $\Gamma(\mathbb{G})$ uma representação de $\mathbb{G}$ num espaço vetorial V e V_1 um subespaço de V. V_1 diz-se *subespaço invariante* de V com relação a $\Gamma(\mathbb{G})$ se $\Gamma(g)|x\rangle$ pertencer a V_1 para todo vetor $|x\rangle$ de V_1, e $g \in \mathbb{G}$. ($|x\rangle$ é um vetor arbitrário em V_1 tal que $|x\rangle = x_i|\hat{e}_i\rangle$).

Uma representação $\Gamma(\mathbb{G})$ em V diz-se *irredutível* se não existir nenhum subespaço invariante em V em relação a $\Gamma(\mathbb{G})$, a menos dos triviais (o próprio V e o vetor nulo). Abreviamos representação irredutível por IRREP.

Se V_1 for um subespaço invariante de dimensão n_1 em relação a $\Gamma(\mathbb{G})$, poderemos sempre escolher um conjunto de vetores base $\{\hat{e}_i, i = 1,2, \cdots ,n\}$ em V tal que os primeiros n_1 vetores estão em V_1. Como

$$\delta(g)\ |e_i\rangle = \sum_{j=1}^{n} \Gamma(g)_{ji}\ |e_j\rangle \ \in\ V_1 \qquad (1.3.1.1)$$

para $i = 1,2, \cdots , n$ e para todo $g \in \mathbb{G}$, concluímos que $\Gamma(g)_{ji} = 0$ para $i = 1, \cdots , n_1$ e para $j = n_1+1, \cdots , n$. Portanto, a representação matricial $\Gamma(g)$ é da forma

$$\begin{bmatrix} \Gamma_1(g) & \Gamma'(g) \\ 0 & \Gamma_2(g) \end{bmatrix} \qquad (1.3.1.2)$$

sendo $\Gamma_1(g)$ e $\Gamma_2(g)$ matrizes quadradas de dimensão n_1 e

$n_2 = n - n_1$ respectivamente e $\Gamma'(g)$ uma matriz retangular $n_1 \times n_2$. Tendo duas matrizes da forma $\Gamma(g)$, o produto $\Gamma(g)\cdot\Gamma(g')$ é outra matriz da mesma forma e mais, $\Gamma_i(g)\cdot\Gamma_i(g') = \Gamma_i(gg')$ para $i = 1,2$. Então, as propriedades essenciais de $\Gamma(\mathbb{G})$ estão contidas nas representações de menor dimensão $\Gamma_1(\mathbb{G})$ e $\Gamma_2(\mathbb{G})$. Por outro lado, os vetores base $\{ \hat{e}_i,\ i = n_1+1, \cdots, n_1+n_2 \}$ dão origem a um subespaço V_2, complementar a V_1. Se V_2 também for invariante em relação a $\Gamma(\mathbb{G})$, o mesmo argumento usado anteriormente levará a que $\Gamma'(g) = 0$, e $\Gamma(g)$ assumirá a forma de blocos diagonais. Vemos que se $\Gamma(\mathbb{G})$ for uma representação de um grupo $\mathbb{G}$ em V e V_s for um subespaço invariante de V em relação a $\mathbb{G}$, então, restringindo a ação de $\Gamma(\mathbb{G})$ a V_s, obteremos a representação de menor dimensão $\Gamma_V(\mathbb{G})$. Se o subespaço V_s não puder ser reduzido novamente, $\Gamma_V(\mathbb{G})$ será uma irrep e V_s será um subespaço invariante irredutível em relação a $\mathbb{G}$.

Se os operadores $\Gamma(g)$ forem unitários para todo $g \in \mathbb{G}$, então a representação dir-se-á *unitária*. É trivial mostrar que qualquer representação $\Gamma(\mathbb{G})$ de um grupo finito $\mathbb{G}$ é equivalente a uma representação unitária[28]. Esta também é uma razão para que $\Gamma'(g) = 0$ na equação (1.3.1.2), já que se uma representação $\Gamma(\mathbb{G})$ for unitária, deve valer

$$\Gamma(g) = \begin{bmatrix} \Gamma_1(g^{-1}) & \Gamma'(g^{-1}) \\ 0 & \Gamma_2(g^{-1}) \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} \Gamma_1(g) & \Gamma'(g) \\ 0 & \Gamma_2(g) \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \Gamma_1(g)^{\dagger} & 0 \\ \Gamma'(g)^{\dagger} & \Gamma_2(g)^{\dagger} \end{bmatrix} \qquad (1.3.1.3)$$

onde $\Gamma^{\dagger}$ é a matriz transposta conjugada de Γ.

Se V_1 e V_2 forem subespaços invariantes de V em relação a $\Gamma(\mathbb{G})$ e $\Gamma_1(\mathbb{G})$ e $\Gamma_2(\mathbb{G})$ forem os operadores que coincidem com $\Gamma(\mathbb{G})$ nesses espaços, então $V = V_1 + V_2$ e $\Gamma(g) = \Gamma_1(g) \oplus \Gamma_2(g)$ para todo $g \in \mathbb{G}$. Neste caso, a representação $\Gamma(\mathbb{G})$ chama-se *soma direta* de Γ_1 e Γ_2.

Se os subespaços invariantes forem redutíveis em relação a Γ, poderão ser feitas reduções tais que a irrep Γ_1 apareça a_1 vezes, a Γ_2, a_2 vezes, etc. Escreve-se então $\Gamma(\mathbb{G}) = a_1\Gamma_1(\mathbb{G}) \oplus a_2\Gamma_2(\mathbb{G})$ e, em geral,

$$\Gamma(g) = \sum_s \oplus\, a_s\, \Gamma_s(g) \ , \qquad (1.3.1.4)$$

onde s numera as irreps não equivalentes. Portanto, a representação matricial $\Gamma(\mathbb{G})$ terá a forma de blocos diagonais $\Gamma_s(\mathbb{G})$.

1.3.2 - REPRESENTAÇÕES INDUZIDAS E SUBDUZIDAS

As relações entre as representações de um grupo finito e as de seus subgrupos têm um papel muito importante na maioria das aplicações da teoria dos grupos à Física. Como veremos nos capítulos seguintes elas serão fundamentais em diversos pontos do nosso trabalho. Aqui limitar-nos-emos às definições. Nas referências [29, 30, 31] podem ser encontrados os desenvolvimentos necessários à teoria.

Seja $\mathbb{H}$ um subgrupo de um grupo finito $\mathbb{G}$ tal que $|\mathbb{G} : \mathbb{H}| = n$. Sejam t_i, $i = 1, \cdots, n$ os representativos da classes laterais à esquerda de $\mathbb{H}$ em $\mathbb{G}$ de modo que podemos escrever $\mathbb{G} = \langle t_i \mathbb{H} \rangle$. Se γ for uma representação qualquer de $\mathbb{H}$, estendemos γ para todo o grupo $\mathbb{G}$ definindo:

$$\gamma\uparrow\mathbb{G}(g)_{ij} = \begin{cases} \gamma(h) \text{ se } t_i^{-1} g t_j = h \in \mathbb{H} \\ 0 \text{ caso contrário} \end{cases} .$$

O conjunto $\gamma\uparrow\mathbb{G}(\mathbb{G}) = \langle \gamma\uparrow\mathbb{G}(g), \forall g \in \mathbb{G} \rangle$ é uma representação de $\mathbb{G}$ de ordem $|\gamma\uparrow\mathbb{G}(\mathbb{G})| = |\gamma|n$, chamada representação de $\mathbb{G}$ *induzida* da representação γ de $\mathbb{H}$, ou simplesmente representação induzida de $\mathbb{G}$.

Analogamente, se $\mathbb{H}$ for um subgrupo qualquer de um grupo finito $\mathbb{G}$, e $\Gamma(\mathbb{G}) = \langle \Gamma(g), \forall g \in \mathbb{G} \rangle$ for uma representação arbitrária de $\mathbb{G}$, o subgrupo de $\Gamma(\mathbb{G})$ formado pelas matrizes $\Gamma_{\mathbb{H}} = \langle \Gamma(h), \forall h \in \mathbb{H} \rangle$, ou seja a restrição de $\Gamma(\mathbb{G})$ ao subgrupo $\mathbb{H}$, é uma representação de $\mathbb{H}$ chamada representação de $\mathbb{H}$ *subduzida* da representação $\Gamma(\mathbb{G})$ de $\mathbb{G}$.

1.3.3- TEOREMAS SOBRE AS IRREPS DE UM GRUPO

A seguir damos alguns teoremas de muita utilidade, cujas demonstrações podem ser encontradas no apêndice A.

- <u>Condição de Ortogonalidade</u> (Vide A.7.1)

$$(|\Gamma_\alpha|/|\mathbb{G}|) \sum_{g\in\mathbb{G}} \Gamma_\alpha(g)^\dagger_{sr} \, \Gamma_\beta(g)_{vt} = \delta_{\alpha\beta} \, \delta_{st} \, \delta_{vr} , \qquad (1.3.3.1)$$

onde $|\Gamma_\alpha|$ é a dimensão da irrep Γ_α, $|\mathbb{G}|$ é a ordem de $\mathbb{G}$ e $\Gamma^\dagger_s(g)_{ki} = (\Gamma_s(g)_{ik})^*$.

- <u>Relação de Completeza</u> (Vide A.8.1)

$$(1/|\mathbb{G}|) \sum_{\alpha,r,s} |\Gamma_\alpha| \; \Gamma_\alpha(g)_{rs} \; \Gamma^{\dagger}_\alpha(g')_{sr} = \delta_{gg'} \qquad (1.3.3.2)$$

- Tomando g = g' = 1 na eq. (1.3.3.2) obtemos:

$$\sum_{\alpha} |\Gamma_\alpha|^2 = |\mathbb{G}| \;, \qquad (1.3.3.3)$$

que é o conhecido teorema de Burnside.

- Seja $S(\mathcal{C}_i)$ a soma de todos os elementos de $\mathbb{G}$ pertencentes à classe $\mathcal{C}_i$, isto é:

$$S(\mathcal{C}_i) = \sum_{g\in\mathcal{C}_i} g \;.$$

Obviamente $S(\mathcal{C}_i)$ comuta com todo elemento $g \in \mathbb{G}$. Então, a matriz

$$A_\alpha(\mathcal{C}_i) = \sum_{g\in\mathcal{C}_i} \Gamma_\alpha(g) \;,$$

de acordo com o lema de Schur (Vide **A.9**), deverá ser diagonal, ou seja $A_\alpha(\mathcal{C}_i) = \lambda_i^\alpha I$, onde I é a matriz identidade. Tomando traços membro a membro, obtemos:

$$\mathrm{Tr}\; A_\alpha(\mathcal{C}_i) = \lambda_i^\alpha \; |\Gamma_\alpha| = \sum_{g\in\mathcal{C}_i} \chi_\alpha(\mathcal{C}_i) = |\mathcal{C}_i| \; \chi_\alpha(\mathcal{C}_i) \;,$$

onde $|\mathcal{C}_i|$ é o número de elementos na classe $\mathcal{C}_i$. Assim,

$$\sum_{g\in\mathcal{C}_i} \Gamma_\alpha(g) = (|\mathcal{C}_i|/|\Gamma_\alpha|) \; \chi_\alpha(\mathcal{C}_i) \; \mathbf{1} \qquad (1.3.3.4)$$

sendo $\mathscr{C}_i$ uma classe de conjugação de $\mathbb{G}$, $\mathbf{1}$ o operador identidade e $\chi_\alpha(\mathscr{C}_i)$ o traço dos elementos da classe $\mathscr{C}_i$ na representação Γ_α. (Como os traços de uma representação são os traços dos operadores, eles independem da escolha de base no espaço das representações. Obviamente, todos os elementos de uma dada classe têm o mesmo traço dentro de uma representação).

- Os traços de irreps não equivalentes de um grupo $\mathbb{G}$, satisfazem as seguintes relações:

<u>Ortogonalidade</u> - De (1.3.3.1):

$$(1/|\mathbb{G}|) \sum_i |\mathscr{C}_i| \ \chi^*_\alpha(\mathscr{C}_i) \ \chi_\beta(\mathscr{C}_i) = \delta_{\alpha\beta} \ , \qquad (1.3.3.5)$$

<u>Completeza</u> - De (1.3.3.2):

$$\sum_\alpha (|\Gamma_\alpha|/|\mathbb{G}|) \ \chi_\alpha(\mathscr{C}_i) \ \chi^*_\alpha(\mathscr{C}_k) = \delta_{ik} \ , \qquad (1.3.3.6)$$

onde i caracteriza a classe de $\mathbb{G}$ e s soma sobre os traços das irreps não equivalentes.

- Quando uma dada representação $\Gamma(\mathbb{G})$ de $\mathbb{G}$ é reduzida a componentes irredutíveis, usando as relações de ortogonalidade dos traços obtemos que o número de vezes que a irrep $\Gamma_\alpha(\mathbb{G})$ aparece em $\Gamma(\mathbb{G})$ é dado por

$$\langle\Gamma|\Gamma_\alpha\rangle = \sum_i (|\mathscr{C}_i|/|\mathbb{G}|) \ \chi^*_\alpha(\mathscr{C}_i) \ \chi(\mathscr{C}_i) \ . \qquad (1.3.3.7)$$

- <u>Condição de Irredutibilidade</u> - De (1.3.3.7) vemos que é condição necessária e suficiente para que a representação $\Gamma(\mathbb{G})$

de traços $\{\chi_i\}$ seja irredutível, que

$$\sum_i |\mathscr{C}_i|\ |\chi(\mathscr{C}_i)|^2 = |\mathbb{G}|\ . \qquad (1.3.3.8)$$

1.4- Apresentação de Grupos

Quando todos os produtos $g_i g_j$ de pares de elementos de um grupo $\mathbb{G}$ são especificados, dizemos que a *estrutura do grupo* $\mathbb{G}$ está univocamente determinada. Para grupos finitos esses produtos são dispostos em uma tabela chamada *tabela de multiplicação*, a qual, portanto, determina a estrutura do grupo.

Apesar da tabela de multiplicação caracterizar univocamente um grupo finito, quando a ordem deste é muito grande, esta maneira de descrever o grupo torna-se pouco útil. Como veremos a seguir, uma forma alternativa, conhecida como *apresentação de grupos*, é muito conveniente para descrever grupos finitos e em particular os pontuais cristalográficos e seus grupos duplos.

1.4.1- GRUPOS LIVRES

Seja X um conjunto e X^{-1} um outro conjunto disjunto de X e que denotaremos por $X^{-1} = \{ x^{-1} |\ x \in X \}$, onde x^{-1} é simplesmente um símbolo. Definimos a *palavra* w como uma seqüência de símbolos do conjunto $X \cup X^{-1}$ na forma: $w = x_1^{\varepsilon_1} \cdots x_r^{\varepsilon_r}$, onde $x_i \in X$, $\varepsilon_i = \mp 1$ e $r \geq 0$. No caso $r = 0$, temos a *palavra vazia* que será representada por 1. Diremos que duas palavras são iguais se e somente se tiverem os mesmos elementos nas mesmas posições relativas.

Definimos o *produto* de duas palavras $w = x_1^{\varepsilon_1} \cdots x_r^{\varepsilon_r}$ e $v = x_1^{\pi_1} \cdots x_s^{\pi_s}$ como a justaposição:

$$wv = x_1^{\varepsilon_1} \cdots x_r^{\varepsilon_r} x_1^{\pi_1} \cdots x_s^{\pi_s} ,$$

com a convenção $w1 = 1w = w$. A inversa de w é a palavra w^{-1}, tem a forma $w^{-1} = x_r^{-\varepsilon_r} \cdots x_1^{-\varepsilon_1}$, e obviamente $1^{-1} = 1$.

Duas palabras são *equivalentes*, se for possível passar de uma para a outra por meio de uma sequência finita de operações do tipo:

a) Inserção de pares de símbolos consecutivos xx^{-1} ou $x^{-1}x$ $(x \in X)$ em qualquer lugar da palavra.

b) Apagamento de pares de símbolos consecutivos xx^{-1} ou $x^{-1}x$ $(x \in X)$ em qualquer lugar da palavra.

No que segue, o símbolo [w], representará o conjunto de palavras w equivalentes entre si. Pela definição teremos:

$$[w][1] = [1][w] = [w]$$

$$[w][w^{-1}] = [w^{-1}][w] = [1].$$

Como a justaposição de palavras é associativa, as classes de equivalência [w] são elementos de um grupo $\mathbb{F}$, que é conhecido como *grupo livre* sobre o conjunto X de geradores.

É possível fazer uma definição geral para os grupos livres. Com este propósito, seja $\mathbb{F}$ o grupo livre de elementos [w] e σ uma função tal que $\sigma : X \to \mathbb{F}$ definida pela relação $\sigma(x_i) = [x_i]$. O par $(\sigma, \mathbb{F})$ sobre o conjunto X, será um grupo livre sobre X, se para cada função $\alpha : X \to \mathbb{G}$, definida pela relação $\alpha(x_i) = g_i$ $(g_i \in \mathbb{G})$, existir um homomorfismo $\beta : \mathbb{F} \to \mathbb{G}$

tal que $\alpha = \beta\sigma$.

Demonstração:

Seja $\overline{\beta}$ uma função tal que $\overline{\beta}(x_1^{\varepsilon_1} \cdots x_r^{\varepsilon_r}) = g_1^{\varepsilon_1} \cdots g_r^{\varepsilon_r}$, onde $g_i = \alpha(x_i)$. Como $g_i g_i^{-1} = g_i^{-1} g_i = 1$ em $\mathbb{G}$, resulta $\overline{\beta}(w) = \overline{\beta}(v)$ se w e v forem equivalentes entre si. Isto nos permite definir uma outra função β tal que $\beta([w]) = \overline{\beta}(w)$, e como $\overline{\beta}(w) \in \mathbb{G}$, deve valer:

$$\beta([w][v]) = \overline{\beta}(wv) = \overline{\beta}(w)\overline{\beta}(v) = \beta([w])\beta([v]) \ ,$$

e portanto, β é um homomorfismo de $\mathbb{F}$ em $\mathbb{G}$, que simbolizamos por $\beta : \mathbb{F} \to \mathbb{G}$. Pela definição da função σ, temos:

$$\beta(\sigma(x_i)) = \beta([x_i]) = \overline{\beta}(x_i) = \alpha(x_i) \ ,$$

isto é, $\beta\sigma = \alpha$. Se $\gamma : \mathbb{F} \to \mathbb{G}$ for outro homomorfismo de $\mathbb{F}$ em $\mathbb{G}$, tal que $\gamma\sigma = \alpha$, teremos $\beta\sigma = \gamma\sigma$, e portanto $\gamma = \beta$, já que $\mathbb{F} = \langle \mathrm{Im}\ \sigma \rangle$. Este resultado pode ser simbolizado pelo diagrama:

$$\begin{tikzcd} & \mathbb{F} \arrow[dr, "\beta"] & \\ \mathbf{X} \arrow[ur, "\sigma"] \arrow[rr, "\alpha=\beta\sigma"'] & & \mathbb{G} \end{tikzcd}$$

1.4.2- APRESENTAÇÕES DE GRUPOS

Seja Y o conjunto gerador de um grupo livre $\mathbb{F}$ e S um subconjunto de $\mathbb{F}$ que gera um subgrupo $\mathbb{K}$ de $\mathbb{F}$. A união $\mathbb{R}$ de todos os grupos conjugados $\mathbb{R} = \cup\ f_i \mathbb{K} f_i^{-1}$ é o mínimo subgrupo invariante de $\mathbb{F}$ que contém S. O homomorfismo canônico $\Pi : \mathbb{F} \to \mathbb{G}$, definido pelas relações $\mathrm{Ker}(\Pi) = \mathbb{R}$ e $\mathrm{Im}(\Pi) = \mathbb{G}$ é uma *apresentação* de $\mathbb{G} = \langle\ Y \mid \mathbb{R}\ \rangle$.

Exemplos simples: $\mathbb{C}_n = \langle\ x \mid x^n = 1\ \rangle$,

$$\mathbb{C}_{\infty} = \langle\, x, x^{-1} \,\rangle,$$
$$\mathbb{D}_{n} = \langle\, x,y \mid x^{2} = y^{2} = (xy)^{n} = 1 \,\rangle,$$
$$\mathbb{D}_{\infty} = \langle\, x,y \mid x^{2} = y^{2} = 1 \,\rangle.$$

1.4.3- APRESENTACÕES FINITAS

Diremos que um grupo é *finitamente apresentado* se tiver uma apresentação finita, isto é, se for gerado por um conjunto finito de geradores e tiver um conjunto finito de relações.

Dois teoremas são de grande importância neste tema, um devido a B.H.Neuman[32] estabelece o seguinte:

I- Se X é um conjunto de geradores de um grupo finitamente apresentado $\mathbb{G}$, o grupo tem uma apresentação finita da forma $\langle X_0 \mid r_1 = \cdots = r_s = 1\rangle$, onde $X_0 \subseteq X$. A demostração deste teorema se baseia em que qualquer outra apresentação pode ser posta em função da primeira e portanto será também finita.

O outro teorema deve-se a P.Hall[33] e pode ser enunciado da seguinte forma:

II- Seja $\mathbb{N} \triangleleft \mathbb{G}$ e suponhamos que $\mathbb{N}$ e $\mathbb{G}/\mathbb{N}$ são finitamente gerados, então $\mathbb{G}$ é também finitamente gerado. A demonstração deste teorema baseia-se em que o grupo $\mathbb{G}$ é a *extensão*(*) de $\mathbb{N}$ por $\mathbb{G}/\mathbb{N}$ e, portanto, seu conjunto de geradores é a união dos conjuntos de geradores de $\mathbb{N}$ e $\mathbb{G}/\mathbb{N}$. As relações entre estes geradores são as de $\mathbb{N}$, as de $\mathbb{G}/\mathbb{N}$, e aquelas que vêm da

(*) Um grupo $\mathbb{G}$ diz-se extensão de um grupo $\mathbb{N}$ por um grupo $\mathbb{K}$, se $\mathbb{G}$ tem um subgrupo normal $\mathbb{N}' \sim \mathbb{N}$, cujo grupo fator é isomorfo a $\mathbb{K}$, isto é $\mathbb{G}/\mathbb{N}' \sim \mathbb{K}$. Note-se que a extensão $\mathbb{G}$ não tem solução única quando somente $\mathbb{N}$ e $\mathbb{K}$ são dados.

conjugação dos geradores de $\mathbb{N}$ pelos de $\mathbb{G}/\mathbb{N}$, já que $\mathbb{N}$ é invariante em $\mathbb{G}$.

Exemplos simples: Grupos cíclicos finitos e infinitos,
grupos livres com conjunto gerador finito,
grupos finitos,
grupos policíclicos(*) (contêm os grupos solúveis).

1.4.4- APRESENTAÇÃO DOS GRUPOS DUPLOS DE GRUPOS PONTUAIS

Sejam $\mathbb{G} \subset SO(3)$ e $\mathbb{G}^* \subset SU(2)$ dois grupos finitos tais que $\mathbb{G}^*/\mathbb{Z}_2 \sim \mathbb{G}$, sendo $\mathbb{Z}_2$ isomorfo ao grupo do centro de SU(2) e dado por $\mathbb{Z}_2 = \langle\, z \,\|\, z^2 = 1 \,\rangle$. Podemos demonstrar[34] que se $\mathbb{G} \subset SO(3)$ for apresentado por

$$\mathbb{G} = \langle\, x_i \mid R_s = 1 \,\rangle \ , \qquad (1.4.4.1)$$

o grupo de ordem $2|\mathbb{G}|$ apresentado por

$$\mathbb{G}^* = \langle\, y_i \mid R_s = z,\ z^2 = \mathbb{1} \,\rangle \ , \qquad (1.4.4.2)$$

com $y_i = (x_i, 1)$, $z = (1,-1)$ e $\mathbb{1} = (1,1)$ será a solução da *extensão central*(**) de $\mathbb{Z}_2$ por $\mathbb{G}$, chamada *grupo duplo de* $\mathbb{G}$.

Seja ϕ^* um homomorfismo de $\mathbb{G}^*$ num grupo $\mathbb{H}$. Chamando $\mathbb{K}^*$

(*) Um grupo é chamado policíclico se possuir uma sequência

$$\mathbb{G}_i < \mathbb{G}_{i+1} < \cdots < \mathbb{G}_n = \mathbb{G}$$

tal que todos os fatores $\mathbb{G}_{k+1}/\mathbb{G}_k$ são grupos cíclicos.

(**) Uma extensão $\mathbb{G}$ de um grupo abeliano $\mathbb{N}$ por um grupo $\mathbb{H}$ diz-se central quando $\mathbb{H} \subset \mathbb{Z}(\mathbb{G})$.

o Ker ϕ^*, pelo terceiro teorema do isomorfismo temos

$$\mathbb{G}^*/\mathbb{K}^* \sim (\mathbb{G}^*/\mathbb{Z}_2)/(\mathbb{K}^*/\mathbb{Z}_2) \sim \mathbb{G}/\mathbb{K} \sim \mathbb{H}. \qquad (1.4.4.3)$$

Esta relação mostra que existe um homomorfismo ϕ^*: $\mathbb{G}^* \longrightarrow \mathbb{H}^*$ para cada ϕ : $\mathbb{G} \longrightarrow \mathbb{H}$. E mais, como $z \in \mathbb{K}^*$, o homomorfismo ϕ^* deve ser tal que $\phi^*(z) = 1$.

Suponhamos que $f(x)$ seja a função associada ao homomorfismo ϕ : $\mathbb{G} \longrightarrow \mathbb{H}$. Então f^* toma a forma $f^*(y) = \phi((x,1))$ já que $R(f^*(y)) = f^*(z)$ se transforma em $R(f(x,1)) = 1$.

Para grupos impróprios, dados na forma $\mathbb{G} = \mathbb{G}_1 \times \mathbb{C}_i$ com $\mathbb{G} \subset SO(3)$ e $\mathbb{C}_i = \langle\, i \mid i^2 = 1 \,\rangle$ teremos

$$(\mathbb{G}_1 \times \mathbb{C}_i)^*/\mathbb{Z}_2 = (\mathbb{G}_1^* \times \mathbb{C}_i)/\mathbb{Z}_2 \sim (\mathbb{G}_1 \times \mathbb{C}_i)\ , \qquad (1.4.4.4)$$

onde $\mathbb{G}_1^*$ será dado por (1.4.4.2) se $\mathbb{G}_1$ for dado por (1.4.4.1).

Quando $\mathbb{G}$ é um grupo impróprio que não contém a inversão explicitamente, ele pode ser escrito como uma expansão em classes laterais: $\mathbb{G} = \mathbb{H} + \imath g\mathbb{H}$, onde $\mathbb{H} \subset SO(3)$ e g ($\not\in \mathbb{H}$) é uma rotação própria de ordem par ($\imath$ é a inversão). Neste caso, sempre existe um grupo $\mathbb{G}' \sim \mathbb{G}$ e $\mathbb{G}' \subset SO(3)$ tal que $\mathbb{G}' = \mathbb{H} + g\mathbb{H}$ que tem a mesma representação dupla (double value) que $\mathbb{G}$ pois, tratando-se de momento angular semi-inteiro, a inversão é sempre representada pela matriz unidade. Então, para calcular $\mathbb{G}^*$ é só levar em conta que $\mathbb{G}^* \sim \mathbb{G}'^*$ e $\mathbb{G}'^*$ é dado novamente pela equação (1.4.4.2).

Do anterior concluímos que dada a apresentação de um grupo pontual cristalográfico, a apresentação de seu grupo duplo pode ser obtida usando a eq. (1.4.4.2).

No capítulo 4 mostraremos como, a partir de uma apresentação do grupo pontual cristalográfico $\mathbb{O}_h$, é possível obter as apresentações de todos seus subgrupos. Em função destas apresentações construiremos todas as seqüências de subgrupos máximos de $\mathbb{O}_h$ e, conseqüêntemente, de seu grupo duplo $\mathbb{O}_h^*$.

2

ÁLGEBRAS SEMI-SIMPLES NA MECÂNICA QUÂNTICA

Na mecânica quântica estamos interessados em estudar sistemas físicos que são representados por operadores Hamiltonianos hermitianos $\hat{H}$. Dado um sistema, as simetrias que porventura ele possua são representadas por operadores lineares que agem sobre as suas autofunções e que são elementos do grupo do Hamiltoniano.

Como o Hamiltoniano é invariante sob as operações de simetria do seu grupo, seus autoestados são também vetores base das representações deste grupo. As funções que são soluções do sistema representado por $\hat{H}$ formam um conjunto completo e ortonormal. E fundamental então analisar as bases dos espaços nos quais as autofunções do sistema físico estão definidas.

2.1- Funções de Onda e Espaços Irredutíveis

A chave da aplicação da teoria do grupos à mecânica quântica está num teorema de Wigner[35] que pode ser enunciado de diversos modos, como por exemplo:

Se um sistema mecânico quântico for descrito pela equação de Schrödinger apropriada, a representação do grupo desta equação, que pertence a um autovalor particular, estará univocamente determinada, a menos de uma transformação de semelhança. Excluindo os casos de degenerescência acidental, esta representação será irredutível.

Daqui segue a importância das irreps pois elas podem ser usadas para rotular, sem ambigüidades, os níveis de energia de um sistema mecânico quântico.

Outra forma de enunciar o teorema e que mostra claramente a importância da teoria dos grupos para a Física e Química Quânticas é:

Se R *for uma operação de simetria do operador Hamiltoniano* $\hat{H}$ *que descreve um sistema mecânico quântico, e se* ψ *for uma autofunção de* $\hat{H}$, *então* $R\psi$ *será também uma autofunção de* $\hat{H}$ *com o mesmo autovalor* E *de energia que* ψ.

Ou ainda, na forma reduzida:

A função de onda ψ *de um sistema deve ser uma das bases das irreps do grupo do Hamiltoniano.*

Apesar da importância óbvia que mostram os diversos enunciados do Teorema de Wigner, devemos salientar que seria um esforço demasiado tentar calcular as irreps dos grupos em questão se elas fossem usadas apenas para rotular os estados de energia. Na realidade, o cálculo das irreps permite determinar os coeficientes de Clebsh-Gordan do grupo, que por sua vez servem ao cálculo dos elementos de matriz de qualquer operador que atua sobre os autoestados do Hamiltoniano.

Exemplos da aplicação da Teoria dos Grupos à Mecânica Quântica podem ser encontrados em qualquer uma das referências [12 a 22, 25, 29, 31], e [35] a [38].

Pelo exposto, nosso interesse estará concentrado nas funções base das irreps do grupo de simetria do Hamiltoniano. Para encontrá-las necessitamos dos operadores de projeção de funções os quais são combinações lineares dos elementos do grupo e, portanto, escapam à estrutura do grupo.

O ideal seria encontrar uma entidade tal que contivesse a estrutura do grupo e desse conta das combinações lineares de seus elementos. Isto é, que fosse fechada sob a lei de combinação do grupo, sob a adição de operadores e sob o produto por escalares. Tal entidade existe e chama-se *álgebra linear associativa sobre um campo de escalares.*

O conjunto dos operadores $\{\hat{O}\}$ que comutam com um hamiltoniano hermitiano formam, então, uma álgebra que se denota $\mathscr{A}$. Uma vez que, $\hat{O}\hat{H} = \hat{H}\hat{O} \longrightarrow (\hat{H}\hat{O})^{\dagger} = \hat{O}^{\dagger}\hat{H} = (\hat{O}\hat{H})^{\dagger} = \hat{H}\hat{O}^{\dagger}$, os operadores adjuntos $\{\hat{O}^{\dagger}\}$ também pertencem a ela. Uma álgebra com esta característica é dita *auto-adjunta.*

No Apêndice A mostramos que toda álgebra auto-adjunta $\mathscr{A}$ é semi-simples, isto é, pode ser reduzida à soma direta de subálgebras "matric" simples $\mathscr{A}^{\alpha}$, ou seja,

$$\mathscr{A} = \sum_{\alpha}\oplus\, \mathscr{A}^{\alpha} \;, \tag{2.1.1}$$

onde as $\mathscr{A}^{\alpha}$ possuem bases "matric" $\{e^{\alpha}_{rs};\ r,s = 1 \ldots |\mathscr{A}^{\alpha}|\}$, e têm dimensão $|\mathscr{A}^{\alpha}|$. Os elementos das bases "matric" satisfazem a lei de composição:

$$e^{\alpha}_{rs}\, e^{\beta}_{tu} = \delta_{\alpha\beta}\, \delta_{st}\, e^{\alpha}_{ru} \; . \qquad (2.1.2)$$

Para cada $\mathscr{A}^{\alpha}$, a soma dos elementos e^{α}_{rr} (chamados de *idempotentes primitivos*) é o elemento identidade, e esses elementos são ortogonais, isto é

$$e^{\alpha} = \sum_{r=1}^{|\mathscr{A}^{\alpha}|} e^{\alpha}_{rr} \qquad \text{e} \qquad e^{\alpha}\, e^{\beta} = \delta_{\alpha\beta}\, e^{\alpha} \; . \qquad (2.1.3)$$

Portanto, a ação de e^{α} é aniquilar todas as subálgebras, exceto $\mathscr{A}^{\alpha}$.

Finalmente os e^{α} somam a identidade de $\mathscr{A}$:

$$1 = \sum_{\alpha} e^{\alpha} \; . \qquad (2.1.4)$$

Ou seja, a base "matric" decompõe um espaço vetorial $\mathscr{V}$, que é invariante sob a ação dos elementos da álgebra $\mathscr{A}$, na soma direta de subespaços irredutíveis $\mathscr{V}^{\alpha}$, invariantes sob a ação dos elementos das subálgebras $\mathscr{A}^{\alpha}$. Este procedimento é chamado *adaptação em simetria*[39,40]. Além disso, a base "matric" de $\mathscr{A}$ pode ser escolhida de modo que os idempotentes primitivos sejam auto-adjuntos, isto é, $(e^{\alpha}_{rr})^{\dagger} = e^{\alpha}_{rr}$.

Assim, se o Hamiltoniano de um sistema comutar com os elementos de uma álgebra semi-simples $\mathscr{A}$ com uma base "matric" como a descrita acima e $|\alpha r\rangle$ for um vetor do espaço $\mathscr{V}$, ele estará *adaptado em simetria*, com uma simetria αr, se

$$e^{\beta}_{ss}\, |\alpha r\rangle = \delta_{\alpha\beta}\, \delta_{rs}\, |\alpha r\rangle \; , \quad \forall\, \beta, s \; . \qquad (2.1.5)$$

Então, dado um ket $|\alpha r\rangle$, cada um dos kets $e^{\alpha}_{rs}|\alpha r\rangle$, $s = 1 \cdots f^{\alpha}$ (com os elementos da base "matric" sendo auto-adjuntos) é não nulo; e mais: cada ket dá o mesmo valor esperado sobre um operador $\hat{H}$ que comute com os elementos de $\mathscr{A}$, pois:

$$\langle \alpha r |\ e^{\alpha}_{rs}\ \hat{H}\ e^{\alpha}_{sr}\ | \alpha r\rangle = \langle \alpha r |\ \hat{H}\ e^{\alpha}_{rr}\ |\alpha r\rangle$$

$$= \langle \alpha r |\ \hat{H}\ |\alpha r\rangle\ ,\ s = 1, \cdots, |\mathscr{A}^{\alpha}|\ . \qquad (2.1.6)$$

O conjunto de kets $\{e^{\alpha}_{sr}|\alpha r\rangle;\ s = 1, \cdots, |\mathscr{A}^{\alpha}|\}$ forma então um subespaço irredutível de $\mathcal{E}$.

2.2- Álgebras de Grupo

A *álgebra de grupo* $\mathscr{A}(\mathbb{G})$ de um grupo $\mathbb{G}$, é a álgebra que tem como base os elementos do grupo. Então, um elemento arbitrário A de $\mathscr{A}(\mathbb{G})$ é da forma:

$$A = \sum_{g\in\mathbb{G}} c_g(A)\ g\ , \qquad (2.2.1)$$

onde os $c_g(A)$ são números complexos; se $\mathbb{G}$ for um grupo finito, $\mathscr{A}(\mathbb{G})$ será uma álgebra de dimensão finita.

Dado $A \in \mathscr{A}(\mathbb{G})$, definimos:

$$A^{\dagger} \equiv \sum_{g\in\mathbb{G}} c_g(A)^{*}\ g^{-1}\ , \qquad (2.2.2)$$

e diremos que $A \in \mathscr{A}(\mathbb{G})$ é *persistente* se $A = A^{\dagger} \neq 0$.

Um elemento A de uma álgebra $\mathscr{A}$ é nilpotente se para alguma potência finita p, $A^p = 0$.

Lema: Para A_1 e $A_2 \in \mathscr{A}(\mathbb{G})$ arbitrários, vale:

(i) $(A_1A_2)^\dagger = A_2^\dagger A_1^\dagger$

(ii) Se $A \neq 0 \longrightarrow A^\dagger A$ é persistente

(iii) Se A é persistente $\longrightarrow$ A é não nilpotente.

Demonstração:

(i)

$$(A_1A_2)^\dagger = \Big\{ \sum_{\substack{g,g' \\ \in \mathbb{G}}} c_g(A_1)\ c_{g'}(A_2)\ g\ g' \Big\}^\dagger$$

$$= \sum_{\substack{g,g' \\ \in \mathbb{G}}} c_g(A_1)^*\ c_{g'}(A_2)^*\ (g')^{-1}g^{-1} = A_2^\dagger\ A_1^\dagger\ .$$

(ii) Temos: $(A^\dagger A)^\dagger = A^\dagger (A^\dagger)^\dagger = A^\dagger A$, uma vez que $(A^\dagger)^\dagger = A$, e se $A \neq 0$, vemos que o coeficiente da identidade para $A^\dagger A$ é

$$\sum_{g\in\mathbb{G}} c_g(A^\dagger)\ c_{(g^{-1})}(A) = \sum_{g\in\mathbb{G}} c_{(g^{-1})}(A)^*\ c_{(g^{-1})}(A) > 0$$

Então, $A^\dagger A \neq 0$ e $A^\dagger A$ é persistente.

(iii) Se A é persistente $\Longrightarrow A^2 = A^\dagger A$ é persistente e, como o quadrado de um elemento persistente é persistente, A^{2n} tem que ser persistente para todo $n \geq 1$. Portanto, $A^{2n} \neq 0$, $\forall\ n \geq 1$, e assim, A não pode ser nilpotente.

A partir deste lema podemos mostrar que as álgebras de grupo são semi-simples. Vejamos: assumindo que a álgebra de grupo $\mathscr{A}(\mathbb{G})$ tem uma subálgebra invariante $\mathscr{B}^{(*)}$, e tomando $A \in \mathscr{B}$ com $A \neq 0$, do lema anterior $A^{\dagger}A$ tem que ser persistente e, portanto, não nilpotente. Como $\mathscr{B}$ é invariante, $A^{\dagger}A \in \mathscr{B}$, e como $\mathscr{B}$ contém um elemento não nilpotente não pode ser nilpotente. Então, $\mathscr{A}(\mathbb{G})$ não contém subálgebras invariantes nilpotentes e assim $\mathscr{A}(\mathbb{G})$ é semi-simples.

Uma vez que uma álgebra de grupo $\mathscr{A}(\mathbb{G})$ é semi-simples, ela tem a estrutura discutida acima, ou seja, pode ser reduzida à soma direta de subálgebras "matric" simples cujas bases expandem subespaços invariantes. Como neste caso a base do espaço vetorial é o próprio grupo $\mathbb{G}$, cada subálgebra "matric" simples está ligada a um invariante de $\mathbb{G}$.

Na Mecânica Quântica, os elementos do grupo são operadores lineares atuando sobre um espaço vetorial $\mathfrak{X}$ onde está definido um produto interno. Transformando os kets de $\mathfrak{X}$

$$g|\psi\rangle = |g\psi\rangle \quad , \quad |\psi\rangle \in \mathfrak{X} \quad \text{e} \quad g \in \mathbb{G} \; ,$$

encontramos:

$$\langle g\psi|g\psi'\rangle = \langle\psi|\psi'\rangle \quad , \quad |\psi\rangle \quad \text{e} \quad |\psi'\rangle \in \mathfrak{X} \; .$$

Então, o adjunto de um elemento g é $g^{\dagger} = g^{-1}$ e o adjunto de $A \in \mathscr{A}(\mathbb{G})$ é $A^{\dagger}$. Assim, vemos que as álgebras de grupo são casos especiais de álgebras semi-simples.

(*)Veja Apêndice A

2.3- A Representação Regular de um Grupo

Da mesma maneira que trabalhamos com as representações de um grupo $\mathbb{G}$, podemos estudar as representações da álgebra de grupo $\mathscr{A}(\mathbb{G})$ de $\mathbb{G}$. Se

$$A = \sum_{g\in\mathbb{G}} c_g(A)\; g \quad \in \quad \mathscr{A}(\mathbb{G}) \; ,$$

então a representação matricial $\Gamma(A)$ do elemento A da álgebra é dada por

$$\Gamma(A) = \sum_{g\in\mathbb{G}} c_g(A)\; \Gamma(g) = \sum_{g\in\mathbb{G}} \Gamma(g)\; c_g(A) \; . \qquad (2.3.1)$$

Este mapeamento é homomorfo, pois

$$\Gamma(A_1 A_2) = \sum_{\substack{g,\, g' \\ \in\, \mathbb{G}}} c_g(A_1)\; c_{g'}(A_2)\; \Gamma(gg')$$

$$= \sum_{\substack{g,\, g \\ \in\, \mathbb{G}}} c_g(A_1)\; c_{g'}(A_2)\; \Gamma(g)\; \Gamma(g')$$

$$= \sum_{g\in\mathbb{G}} c_g(A_1)\; \Gamma(g) \sum_{g'\in\mathbb{G}} c_{g'}(A_2)\; \Gamma(g') = \Gamma(A_1)\; \Gamma(A_2).$$

Assim, dada uma representação de $\mathbb{G}$, ela tem associada uma representação de $\mathscr{A}(\mathbb{G})$. Inversamente, como os elementos de $\mathbb{G}$ formam a base de $\mathscr{A}(\mathbb{G})$, cada representação de $\mathscr{A}(\mathbb{G})$ contém uma representação de $\mathbb{G}$.

Obviamente, se um subespaço $\mathfrak{X}' \subset \mathfrak{X}$ for invariante sob as operações A, ele também o será sob as operações g, e inversamente, dado um subespaço $\mathcal{V}'$ tal que $g|r\rangle \in \mathcal{V}'$ $\forall$ $g \in \mathbb{G}$ e $|r\rangle \in \mathcal{V}'$, então

$$\sum_{g\in\mathbb{G}} c_g(A)\, g|r\rangle \in \mathcal{V}' ,$$

já que $\mathcal{V}'$ é um subespaço linear de $\mathcal{V}$, ou seja, contém todas as combinações lineares $\alpha|r_1\rangle + \beta|r_2\rangle$, com α e β números complexos arbitrários. Portanto, cada representação redutível ou irredutível da álgebra de grupo $\mathscr{A}(\mathbb{G})$ é também uma representação de $\mathbb{G}$, e vice-versa.

Vimos acima que cada uma das subálgebras "matric" $\mathscr{A}^{\alpha}$ (cuja soma direta nos dá a álgebra de grupo $\mathscr{A}(\mathbb{G})$), forma um subespaço invariante, e portanto, dá origem a uma irrep de $\mathscr{A}(\mathbb{G})$. Cada um dos n elementos e^{α}_{rr} é um invariante da álgebra e também do grupo. Mas os invariantes do grupo são dados pela soma dos elementos de cada uma das classes de conjugação do grupo,

$$S(\mathscr{C}_i) = \sum_{g\in\mathscr{C}_i} g . \qquad (2.3.2)$$

Então, se $n_{\mathscr{C}}$ for o número de classes de conjugação, teremos $n_{\mathscr{C}}$ invariantes. Precisamos saber se eles se relacionam com os e^{α}_{rr}. Uma vez que os elementos do grupo são a base da álgebra, os e^{α}_{rr} podem ser escritos como combinações lineares dos $S(\mathscr{C}_i)$ e vice-versa. Mas os e^{α}_{rr} são ortogonais e os $S(\mathscr{C}_i)$ são linearmente independentes, de modo que $n = n_{\mathscr{C}}$. Concluímos, então, que o número de subálgebras "matric" $\mathscr{A}^{\alpha}$ é igual ao número de irreps e ao número de classes do grupo $\mathbb{G}$.

Como um exemplo importante consideraremos a chamada *representação regular* do grupo $\mathbb{G}$. Para obter a representação regular de $\mathbb{G}$, escolhemos a base da álgebra de grupo $\mathscr{A}(\mathbb{G})$, isto é, os próprios elementos do grupo como base do espaço vetorial e fazemos os elementos de $\mathbb{G}$ operarem sobre ela. A operação de $\mathbb{G}$ sobre $\mathscr{A}(\mathbb{G})$ é escolhida como sendo a própria lei de combinação do grupo. Para determinar as matrizes associadas, denotamos por $\{g_i\}$ o conjunto de vetores base de $\mathscr{A}(\mathbb{G})$, ou seja , o próprio grupo $\mathbb{G}$. Primeiro, escrevemos a ação dos elementos de $\mathbb{G}$ sobre o próprio $\mathbb{G}$ na forma :

$$g\,g_j = \sum_i g_i\,\Gamma^{\mathbf{R}}(g)_{ij}\ , \tag{2.3.3}$$

e, uma vez que o lado esquerdo da eq. (2.3.3) tem um único valor em $\mathbb{G}$, a representação regular à esquerda tem a forma

$$\Gamma^{\mathbf{R}}(g)_{ij} = \delta_{g_i,\,gg_j}\ . \tag{2.3.4}$$

Para verificar que a eq. (2.3.4) é uma representação de $\mathbb{G}$ calculemos

$$\sum_j \Gamma^{\mathbf{R}}(g_1)_{ij}\,\Gamma^{\mathbf{R}}(g_2)_{jk} = \sum_j \delta_{g_i,\,g_1g_j}\,\delta_{g_j,\,g_2g_k}$$

$$= \delta_{g_i,\,g_1g_2g_k} = \Gamma^{\mathbf{R}}(g_1g_2)_{ik}\ .$$

Assim, as matrizes $\Gamma^{\mathbf{R}}(g)$ têm apenas um elemento não nulo e igual a 1 em cada coluna e em cada fila. Além disso, $\Gamma^{\mathbf{R}}(g)$ tem apenas zeros na diagonal para qualquer $g \in \mathbb{G}$, exceto para $g = e$, o elemento unidade de $\mathbb{G}$. De fato, se $g = e$, temos:

$$\Gamma^{\mathbf{R}}_{kj}(e) = \begin{cases} 1 & \text{se } e = g_k g_j^{-1} \text{ ou seja, } k = j \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{2.3.5}$$

Então, todos os elementos da diagonal de $\Gamma^{R}(e)$ são iguais a 1, enquanto os demais são nulos. Este resultado mostra que se definirmos $\chi^{R}(g) = \sum_{i} \Gamma^{R}(g)_{ii}$, então $\chi^{R}(g) = |\mathbb{G}|\ \delta_{g,e}$. Usando a eq. (1.3.3.7) obtemos $\langle\Gamma^{R}|\Gamma_{s}\rangle = \chi_{s}(e)$, isto é, toda irrep Γ_{s} de $\mathbb{G}$, está contida um número de vezes igual a sua dimensão na representação regular de $\mathbb{G}$.

Para as matrizes dos demais elementos de $\mathscr{A}(\mathbb{G})$ temos:

$$A = \sum_{g\in\mathbb{G}} c_{g}(A)\ g \implies \Gamma^{R}(A)_{ij} = \sum_{g\in\mathbb{G}} c_{g}(A)\ \delta_{g_i, gg_j} . \qquad (2.3.6)$$

Assim, determinamos a representação regular de $\mathscr{A}(\mathbb{G})$, a qual contém a representação regular de $\mathbb{G}$, que é o conjunto de matrizes $\{\ \Gamma^{R}(g_i),\ \forall\ g_i \in \mathbb{G}\ \}$.

Devemos notar que a representação regular é fiel, já que $\Gamma^{R}(g_1) = \Gamma^{R}(g_2)$ implica que $\delta_{g_i, g_1 g_j} = \delta_{g_i, g_2 g_j}$ para todo g_i, $g_j \in \mathbb{G}$. Então, isto só é possível se $g_1 = g_2$.

Uma vez que a representação regular de um grupo $\mathbb{G}$ é isomorfa a ele , o seu estudo revela-nos todas as propriedades do próprio $\mathbb{G}$.

A relação (2.3.4) é normalmente chamada de representação regular à *esquerda* de $\mathbb{G}$. É possível definir também uma representação regular à *direita* de $\mathbb{G}$ de acordo com

$$g_j\ g = \sum_{i} g_i\ \Gamma^{R}(g^{-1})_{ij} ,$$

resultando

$$\Gamma^{R}(g)_{ij} = \delta_{g_i, g_j g^{-1}} . \qquad (2.3.7)$$

A expressão dada em (2.3.7) é uma representação de $\mathbb{G}$, pois

$$\sum_j \Gamma^R(g_1)_{ij}\ \Gamma^R(g_2)_{jk} = \sum_j \delta_{g_i,\, g_j g_1^{-1}}\ \delta_{g_j,\, g_k g_2^{-1}}$$

$$= \sum_j \delta_{g_i,\, g_k g_2^{-1} g_1^{-1}} = \sum_j \delta_{g_i,\, g_k (g_1 g_2)^{-1}} .$$

No capítulo 6, mostraremos que as duas representações regulares são essenciais na definição de um operador auto-adjunto que nos permitirá resolver o problema de rotular as irreps adaptadas em simetria a seqüências canônicas de subgrupos.

3

SEQÜÊNCIAS CANÔNICAS

Neste capítulo mostraremos por dois métodos, um de nossa autoria e outro devido a Wigner, que as séries de composição dos grupos finitos solúveis são seqüências canônicas. É para este tipo de seqüências, que no capítulo 6 construiremos um operador auto-adjunto que, além de rotular, permite adaptar em simetria espaços vetoriais finitos e calcular as irreps de um grupo $\mathbb{G}_i$, adaptadas em simetria à seqüência $\mathbb{G}_i \geq \mathbb{G}_{i+1}$.

3.1- Seqüências canônicas de grupos finitos arbitrários

Diz-se que um grupo $\mathbb{G}$ tem uma *série* ou *seqüência* de subgrupos quando é possível escrever o seguinte arranjo de grupos:

$$\mathbb{G} \supset \cdots \supset \mathbb{G}_i \supset \mathbb{G}_{i+1} \supset \mathbb{G}_{i+2} \supset \mathbb{G}_{i+3} \supset \cdots . \qquad (3.1.1)$$

A série é dita *normal* se ela for finita, terminar no subgrupo unidade e cada subgrupo $\mathbb{G}_i$ for subgrupo normal próprio do anterior, isto é

$$\mathbb{G} = \mathbb{G}_0 \triangleright \mathbb{G}_1 \triangleright \mathbb{G}_2 \triangleright \cdots \triangleright \mathbb{G}_k = \langle 1 \rangle . \qquad (3.1.2)$$

Os grupos fatores $\mathbb{G}_i/\mathbb{G}_{i+1}$ são chamados *fatores* da série normal e o número de fatores é o *comprimento* da série. Para a série anterior o comprimento é k.

Uma série normal

$$\mathbb{G} = \mathbb{H}_0 \triangleright \mathbb{H}_1 \triangleright \mathbb{H}_2 \triangleright \cdots \triangleright \mathbb{H}_s = \langle 1 \rangle , \qquad (3.1.3)$$

é um *refinamento* da série normal (3.1.2) se cada subgrupo $\mathbb{G}_i$ que aparecer em (3.1.2) também estiver contido em (3.1.3) e os comprimentos das duas satisfizerem a relação $k \leq s$.

Duas séries de um mesmo grupo dizem-se *isomorfas* se os seus comprimentos forem iguais e seus grupos fatores forem isomorfos.

Uma série normal que não admite refinamentos chama-se *série de composição*. Isto é, dado um grupo $\mathbb{G}$, a seqüência (3.1.2) é uma série de composição, se cada $\mathbb{G}_i$ for um subgrupo normal *máximo* próprio de $\mathbb{G}_{i-1}$. Se um grupo $\mathbb{G}$ tiver duas séries de composição, elas são isomorfas (Teorema de Jordan-Holder[41]).

Seja $\mathbb{H}$ um subgrupo de um grupo $\mathbb{G}$, e $\Gamma(\mathbb{G}) = \langle\Gamma(g),\ g \in \mathbb{G}\rangle$ uma representação de $\mathbb{G}$. O subconjunto de $\Gamma(\mathbb{G})$ formado pelas matrizes $\Gamma(h)$, $h \in \mathbb{H}$, é uma representação de $\mathbb{H}$ chamada restrição de $\Gamma(\mathbb{G})$ em $\mathbb{H}$. Diz-se que um grupo tem uma *seqüência canônica* quando o número de vezes que as irreps de cada subgrupo na seqüência aparecem na restrição das representações do subgrupo precedente é um ou zero.

Estamos interessados em determinar as condições para que uma seqüência de subgrupos seja canônica; vamos mostrar[42] que $\mathbb{G} \supset \mathbb{H}$ (onde $\mathbb{H}$ não é necessariamente normal em $\mathbb{G}$) é uma seqüência canônica se o índice de $\mathbb{H}$ em $\mathbb{G}$, $|\mathbb{G} : \mathbb{H}|$, for tal que $|\mathbb{G} : \mathbb{H}| \leq 3$ ou $|\mathbb{G} : \mathbb{H}| = 4$ quando o grupo

$$\mathbb{H}_{\mathbb{G}}^{core} = \bigcap_{g\in\mathbb{G}} g\ \mathbb{H}\ g^{-1} \quad \subseteq \quad \mathbb{Z}(\mathbb{G})\ , \qquad (3.1.4)$$

onde $\mathbb{Z}(\mathbb{G})$ é o grupo do centro de $\mathbb{G}$, e $\mathbb{G}$ é um grupo pontual cristalográfico ou seu grupo duplo correspondente.

Seja γ uma irrep de $\mathbb{H}$, Γ uma irrep de $\mathbb{G}$ e $\langle\Gamma|\gamma\rangle$ a frequência de γ em Γ, ou seja, o número de vezes que a representação γ ocorre na restrição $\Gamma_{\mathbb{H}}$ da irrep Γ. Então,

$$\langle\Gamma|\gamma\rangle = (1/|\mathbb{H}|) \sum_{h\in\mathbb{H}} \chi^{\Gamma}(h)\ \chi^{\gamma}(h)^{*}\ , \qquad (3.1.5)$$

e

$$\sum_{\gamma} \langle\Gamma|\gamma\rangle^{2} = \sum_{\gamma} (1/|\mathbb{H}|^{2}) \sum_{\substack{h_i, h_j \\ \in \mathbb{H}}} \chi^{\Gamma}(h_i)\ \chi^{\Gamma}(h_j)^{*}\ \chi^{\gamma}(h_j)^{*}\ \chi^{\gamma}(h_i)\ .$$

Usando a completeza dos traços das representações, obtemos

$$\sum_{\gamma} \langle\Gamma|\gamma\rangle^2 = (1/|\mathbb{H}|) \sum_{h\in\mathbb{H}} |\chi^{\Gamma}(h)|^2$$

e estendendo o somatório do lado direito a todos os elementos de $\mathbb{G}$:

$$\sum_{\gamma} \langle\Gamma|\gamma\rangle^2 \leq (1/|\mathbb{H}|) \sum_{g\in\mathbb{G}} |\chi^{\Gamma}(g)|^2 = |\mathbb{G}|/|\mathbb{H}| \ , \qquad (3.1.6)$$

de modo que $\langle\Gamma|\gamma\rangle \leq 1 \quad \forall \quad |\mathbb{G} : \mathbb{H}| \leq 3$.

Se o grupo $\mathbb{G}$ for abeliano, todas as suas irreps são unidimensionais e a seqüência $\mathbb{G} \supset \mathbb{H}$ é sempre canônica. Suponhamos então que $\mathbb{G}$ é não abeliano e que $\mathbb{H}$ e $\mathbb{G}$ são tais que a eq. (3.1.4) vale, ou seja, o "core" de $\mathbb{H}$ em $\mathbb{G}$ está contido no centro de $\mathbb{G}$. Sob esta hipótese, mostraremos que

$$\sum_{h\in\mathbb{H}} |\chi^{\Gamma}(h)|^2 < |\mathbb{G}| \ .$$

Supondo que na eq. (3.1.6) a igualdade vale, como $\mathbb{H}$ não é necessariamente um subgrupo normal de $\mathbb{G}$, e o $\mathbb{H}_{\mathbb{G}}^{core}$ é o máximo subgrupo invariante de $\mathbb{G}$ contido em $\mathbb{H}$, deveríamos ter que

$$\chi^{\Gamma}(g) = 0 \quad \forall \ g \in (\mathbb{G} - \mathbb{H}_{\mathbb{G}}^{core}) \ .$$

De modo que a eq. (3.1.6) torna-se :

$$\sum_{g\in\mathbb{G}} |\chi^{\Gamma}(g)|^2 = \sum_{g\in\mathbb{H}_{\mathbb{G}}^{core}} |\chi^{\Gamma}(g)|^2 \ .$$

Mas $\mathbb{H}_{\mathbb{G}}^{core} \subset \mathbb{Z}(\mathbb{G})$, e para $g \in \mathbb{Z}(\mathbb{G})$ teremos $\Gamma(g) = I\ e^{i\phi}$, onde I é a matriz unidade. Portanto, $\chi^{\Gamma}(g) = e^{i\phi}\chi^{\Gamma}(1)$ e assim, $|\chi^{\Gamma}(g)|^2 = |\chi^{\Gamma}(1)|^2 \ \forall \ g \in \mathbb{G}$. Então,

$$\sum_{g\in\mathbb{G}} |\chi^{\Gamma}(g)|^2 = \sum_{g\in\mathbb{H}_{\mathbb{G}}^{core}} |\chi^{\Gamma}(1)|^2 = |\mathbb{H}_{\mathbb{G}}^{core}|\ (\chi^{\Gamma}(1))^2 = |\mathbb{G}|\ . \quad (3.1.7)$$

Quando $\mathbb{G}$ é um grupo pontual cristalográfico, temos que $|\mathbb{G}_i : \mathbb{G}_{i+1}| = 2,3$ ou 4 para as seqüências de subgrupos máximos. O índice é 4 para as seqüências $\mathbb{O}_h^* \supset \mathbb{D}_{3h}^*$, $\mathbb{O}^* \supset \mathbb{D}_3^*$, $\mathbb{T}_d^* \supset \mathbb{C}_{3v}^*$ e $\mathbb{T}_h^* \supset \mathbb{C}_{3h}^*$, e para as mesmas seqüências formadas com os grupos não dobrados. Pela nossa análise do final do cap 1, e pelos conhecidos isomorfismos $\mathbb{O} \sim \mathbb{T}_d$ e $\mathbb{C}_{3v} \sim \mathbb{D}_3$, só é necessário mostrar que as seqüências $\mathbb{O} \supset \mathbb{D}_3$ e $\mathbb{T} \supset \mathbb{C}_3$ e as dos grupos duplos correspondentes são canônicas.

No caso dos grupos não duplos temos que $(\mathbb{D}_3)_{\mathbb{O}}^{core} = (\mathbb{C}_3)_{\mathbb{T}}^{core} = \{1\}$, que substituído na eq (3.1.7) daria $\chi^{\Gamma}(1)^2 = |\mathbb{G}|$, que é absurdo. Já no caso dos grupos duplos o núcleo em $\mathbb{O}^*$ é igual a $\mathbb{Z}_2$ resultando $\chi^{\Gamma'}(1)^2 = |\mathbb{O}^*|/|\mathbb{Z}_2| = |\mathbb{O}| = 2^3 \times 3$, onde $\Gamma' \in$ irrep $\mathbb{O}^*$. Novamente a eq (3.1.7) resultaria em absurdo, de modo que podemos concluir que todas as seqüências dos grupos pontuais cristalográficos são canônicas.

3.2- Seqüências Canônicas de Grupos Solúveis

Uma classe especial de subgrupos são os *grupos finitos solúveis*, caracterizados por terem uma série de composição tal que todos os fatores são grupos cíclicos de ordem prima. Uma vez que a maioria dos grupos ligados à Física do Estado Sólido e problemas de Química Quântica são solúveis, é altamente desejável saber sob que condições as seqüências de subgrupos de grupos solúveis são canônicas.

TEOREMA - Toda série de composição de um grupo solúvel é uma seqüência canônica.

Demonstração:

Sejam $\gamma \in$ Irrep $\mathbb{H}$ e $\Gamma \in$ Irrep $\mathbb{G}$. O estabilizador de γ em $\mathbb{G}$ está definido por

$$\mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma) = \{g \in \mathbb{G} \mid \gamma^{g}(h) = \gamma(ghg^{-1}) \sim \gamma(h)\} \quad \forall\ h \in \mathbb{H}$$

sendo $\mathbb{H}$ subgrupo normal de $\mathbb{G}$. Então,

$$\mathbb{H} \subseteq \mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma) \subseteq \mathbb{G} , \qquad (3.2.1)$$

de modo que podemos decompor $\mathbb{G}$ em classes laterais de $\mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma)$.

Sejam t_1, t_2, $\cdots$, t_ι os representativos das classes laterais de $\mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma)$ em $\mathbb{G}$, com $t_1 = 1$ e $\iota = |\mathbb{G}|/|\mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma)|$. Então $\mathbb{H}$ tem ι *diferentes* irreps dadas por:

$$\gamma_k(h) = \gamma(t_k h t_k^{-1}) \quad , \ k = 1, \cdots , \iota .$$

Como

$$\langle\Gamma|\gamma\rangle = (1/|\mathbb{H}|) \sum_{h\in\mathbb{H}} \chi^{\Gamma}(h)\ \chi^{\gamma}(h)^{*} ,$$

e $\chi^{\Gamma}(ghg^{-1}) = \chi^{\Gamma}(h)$, temos que $\langle\Gamma|\gamma_k\rangle = \langle\Gamma|\gamma\rangle$ para $k = 1, \cdots , \iota$.

Para mostrar que a restrição $\Gamma_{\mathbb{H}}$ contém apenas as irreps γ_k , induzimos a representação $\gamma\uparrow\mathbb{G}$ a partir de $\gamma \in$ Irrep $(\mathbb{H})$.

Do teorema da reciprocidade de Frobenius[43] sabemos que o número de vezes que a representação $\gamma\uparrow\mathbb{G}$, induzida da irrep γ de $\mathbb{H}$, contém a irrep Γ de $\mathbb{G}$ é exatamente igual ao número de vezes que a representação $\Gamma_{\mathbb{H}}$ de $\mathbb{H}$, subduzida de Γ, contém a irrep γ. Como $\langle\Gamma|\gamma\rangle \neq 0$, é claro que $\Gamma \in$ irrep$(\mathbb{G})$ aparece na representação induzida $\gamma\uparrow\mathbb{G}$, e desde que o traço de $\gamma\uparrow\mathbb{G}$ pode ser dado por

$$\chi^{\gamma\uparrow\mathbb{G}}(h) = \sum_{j=1}^{s} \chi^{\gamma}(t_j h t_j^{-1}) = \sum_{j=1}^{s} \chi^{\gamma_j}(h) ,$$

onde s é o índice de $\mathbb{H}$ em $\mathbb{G}$, concluímos que as γ_j são as únicas irreps contidas em $\Gamma_{\mathbb{H}}$. Podemos escrever então que

$$\chi^{\Gamma}(h) = \langle\Gamma|\gamma\rangle \sum_{i=1}^{l} \chi^{\gamma_i}(h) ,$$

e da ortogonalidade dos traços temos:

$$\sum_{\gamma} \langle\Gamma|\gamma\rangle^2 = \sum_{i=1}^{l} \langle\Gamma|\gamma_i\rangle^2 = \sum_{i=1}^{l} \langle\Gamma|\gamma\rangle^2 = \langle\Gamma|\gamma\rangle^2 |\mathbb{G}|/|\mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma)| = \tag{3.2.2}$$

$$= 1/|\mathbb{H}| \sum_{h\in\mathbb{H}} |\chi^{\Gamma}(h)|^2 \leq |\mathbb{G}|/|\mathbb{H}| . \tag{3.2.3}$$

Então, das eqs. (3.2.2) e (3.2.3) segue que:

$$\langle\Gamma|\gamma\rangle^2 \leq |\mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma)|/|\mathbb{H}| . \tag{3.2.4}$$

Se o subgrupo invariante $\mathbb{H}$ de $\mathbb{G}$ é tal que $|\mathbb{G}/\mathbb{H}| = p$ (um número primo), então $\mathbb{H}$ é máximo e, da eq. (3.2.1), temos que ou $\mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma) = \mathbb{H}$ ou $\mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma) = \mathbb{G}$.

No primeiro caso a eq. (3.2.4) dá $\langle\Gamma|\gamma\rangle = 1$ e portanto:

$$\Gamma(h) = \sum_{i=1}^{p} \gamma_i(h) ,$$

de modo que a condição necessária para que $\mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma) = \mathbb{H}$ é que

$\chi^{\Gamma}(g) = 0 \quad \forall\, g \in (\mathbb{G} - \mathbb{H})$. Esta condição é também suficiente pois se $\mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma) = \mathbb{G}$, teria que haver ao menos uma classe de conjugação $\mathscr{C}$ de $\mathbb{G}$ contida em $(\mathbb{G} - \mathbb{H})$ tal que $\chi^{\gamma}(\mathscr{C}) \neq 0$. Por absurdo suponhamos que: $\chi^{\Gamma}(g) = 0 \quad \forall\, g \in (\mathbb{G} - \mathbb{H})$. Com este resultado valeria a igualdade na eq. (3.2.4) e,portanto, $\langle\Gamma|\gamma\rangle^2 = p$, o que não é possível pois contradiz a hipótese de que p é um número primo.

Como por hipótese $\mathbb{G}/\mathbb{H} \sim \mathbb{C}_p$, $\mathbb{G}$ tem, no mínimo, p irreps unidimensionais λ_n da forma

$$\lambda_n(t^k h) = \lambda_n(t^k \mathbb{H}) = \omega^{nk} \qquad \text{com } \omega^p = 1 \ ,$$

onde t é o representativo da classe lateral de $\mathbb{H}$ em $\mathbb{G}$. Uma vez que os traços da irrep Γ de $\mathbb{G}$ (quando $\mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma) = \mathbb{G}$) são diferentes de zero para pelo menos uma classe $\mathscr{C} \subset (\mathbb{G} - \mathbb{H})$, existem em $\mathbb{G}$ no mínimo p irreps não equivalentes Γ_n, relacionadas por:

$$\Gamma_n(t^k\, h) = \lambda_n(t^k\, h)\; \Gamma_p(t^k\, h)$$

$$= \omega^{nk}\; \Gamma_p(t^k\, h) \qquad \forall\, h \in \mathbb{H},\ 0<n<p \text{ e } \Gamma_p \equiv \Gamma \ .$$

Então, as relações de ortogonalidade para os traços das irreps Γ_n de $\mathbb{G}$ para uma Γ fixa podem ser escritas como

$$\sum_{h\in\mathbb{H}} |\chi^{\Gamma}(h)|^2 + \cdots + \sum_{h\in\mathbb{H}} \omega^{nk} |\chi^{\Gamma}(t^k h)|^2 + \ldots = \delta_{np} |\mathbb{G}| \ .$$

$$\sum_{k=1}^{p} \sum_{h\in\mathbb{H}} \omega^{nk} |\chi^{\Gamma}(t^k h)|^2 = \delta_{np} |\mathbb{G}|$$

Somando as p relações,

$$\sum_{n=1}^{p} \sum_{k=1}^{p} \sum_{h\in\mathbb{H}} \omega^{nk} |\chi^{\Gamma}(t^k h)|^2 = \sum_{n=1}^{p} \delta_{np} |\mathbb{G}| ,$$

e notando que

$$\sum_{n=1}^{p} \omega^{kn} = \delta_{kp}\ p ,$$

obtemos:

$$p \sum_{h\in\mathbb{H}} |\chi^{\Gamma}(h)|^2 = |\mathbb{G}| = p|\mathbb{H}| ,$$

que mostra que $\Gamma_{\mathbb{H}}$ é uma irrep de $\mathbb{H}$ e portanto $\langle\Gamma|\gamma\rangle = 1$.

Resumindo: Uma vez que por definição um grupo solúvel tem uma série de composição tal que os grupos fatores são subgrupos cíclicos de ordem prima, e como mostramos que se isto acontecer, as condições de canonicidade das seqüências são satisfeitas, concluímos que toda série de composição de um grupo solúvel é canônica.

3.3- O Teorema de Wigner sobre as Seqüências Canônicas.

De acordo com Wigner[44], a condição necessária e suficiente para que uma irrep de um grupo $\mathbb{G}$, considerada como representação de um subgrupo $\mathbb{H}$ de $\mathbb{G}$, não contenha qualquer representação do subgrupo mais que uma vez é que as subclasses de $\mathbb{G}$, ou seja, os conjuntos $\{hgh^{-1} \mid h \in \mathbb{H}\}$, comutem.

Nesta seção mostraremos que no caso das seqüências canônicas $\mathbb{G} \triangleright \mathbb{H}$ com $\mathbb{G}/\mathbb{H} \sim \mathbb{C}_p$ e p um número primo, o teorema de Wigner vale, isto é, todas as subclasses comutam entre si.

Se chamamos t ao representativo da classe lateral $t\mathbb{H}$ tal que $\mathbb{C}_p \sim \langle t\mathbb{H} | (t\mathbb{H})^p = \mathbb{H} \rangle$, então as classes de conjugação de $\mathbb{G}$ contidas no complemento de $\mathbb{H}$ em $\mathbb{G}$, têm elementos:

$$((t^l h_i)^k h)^{-1}(t^l h_i)(t^l h_i)^k h = h'^{-1}(t^l h_i)h' \in \mathscr{C}(t^l h_i) \qquad (3.3.1)$$

onde $0<l<p$, $0\leq k<p$, e $(t^l h_i)^k = t^{[lk]}h_i'$, com $[kl] = kl \bmod p$. Uma vez que $[kl]$ toma todos os valores entre 1 e p para l fixo e k variando entre 0 e p-1, a eq. (3.3.1) permite calcular todas as classes de conjugação do grupo $\mathbb{G}$ contidas no complemento de $\mathbb{H}$ em $\mathbb{G}$. O segundo membro da mencionada equação, mostra que as classes de $\mathbb{G}$ contidas em $\langle \mathbb{G}-\mathbb{H} \rangle$ coincidem com as subclasses de $\mathbb{G}$ em relação ao grupo $\mathbb{H}$ e por serem classes de $\mathbb{G}$ comutam entre si. Como as subclasses contidas na classe lateral $\mathbb{H}$, por definição coincidem com as classes conjugação de $\mathbb{H}$, elas também comutarão entre si. Portanto, a única possibilidade em nosso caso de não comutação, de pelo menos um par de subclasses de $\mathbb{G}$, é uma subclasse contida em $\mathbb{H}$ e a outra em $\langle \mathbb{G}-\mathbb{H} \rangle$.

Por hipótese o grupo $\mathbb{G}$ é tal que $\mathbb{G}/\mathbb{H} \sim \mathbb{C}_p$ e pela teoria das extensões[45] a sua estrutura depende do automorfismo $\phi(\mathbb{H}) = t^{-1}\mathbb{H}\, t$ tal que $\phi \in \mathrm{Aut}\mathbb{H}/\mathrm{Inn}\mathbb{H}$. Seja $\mathscr{S}[g_k]$ a soma dos elementos da subclasse de $\mathbb{G}$ gerada por $\mathbb{H}$ a partir de um elemento g_k. Suponhamos que o automorfismo ϕ de $\mathbb{H}$ é tal que $\phi(\mathscr{S}[h_i]) = \mathscr{S}[\phi(h_i)] = \mathscr{S}[h_j]$, onde $\mathscr{S}[h_i] \cap \mathscr{S}[h_j] = 0$. Sendo $\mathscr{S}[t]$ a soma dos elementos da subclasse de $\mathbb{G}$ que contém o representativo da classe lateral $t\mathbb{H}$, concluímos que deve valer:

$$\mathscr{S}[h_i]\mathscr{S}[t] = \mathscr{S}[t]\mathscr{S}[h_j] \; . \qquad (3.3.2)$$

A questão é: a eq. (3.3.2) é ou não compatível com a comutação das subclasses $\mathscr{S}[h_i]$ e $\mathscr{S}[t]$? Mostraremos que a resposta é sim.

Com este propósito observemos que o produto $\mathscr{S}[t]\mathscr{S}[h_i]$ tem todos seus componentes da forma th ($h \in \mathbb{H}$), o que mostra que todos eles são elementos da classe lateral $t\mathbb{H}$. Como o produto de subclasses pode ser decomposto em subclasses completas, e como na classe lateral $t\mathbb{H}$ as subclasses coincidem com as classes de $\mathbb{G}$, o produto $\mathscr{S}[t]\mathscr{S}[h_i]$ é portanto um invariante de $\mathbb{G}$. Assim, com a ajuda da eq. (3.3.2), obtemos que

$$\mathscr{S}[h_i]\mathscr{S}[t] = t^{-1}(\mathscr{S}[h_i]\mathscr{S}[t])t = \mathscr{S}[h_j]\mathscr{S}[t] = \mathscr{S}[t]\mathscr{S}[h_j] \quad . \quad (3.3.3)$$

Uma vez que o mapeamento $t \to t^k h$ gera um automorfismo do grupo $\mathbb{G}$, a relação (3.3.3), vale para qualquer elemento do complemento de $\mathbb{H}$ em $\mathbb{G}$, o que permite concluir que todas as subclasses de $\mathbb{G}$ por $\mathbb{H}$ comutam entre si quando $\mathbb{G}/\mathbb{H} \sim \mathbb{C}_p$.

4

SUBGRUPOS MÁXIMOS DE GRUPOS FINITOS SOLÚVEIS

Neste capítulo desenvolveremos dois métodos para a obtenção de subgrupos: um que permite determinar todos os subgrupos normais de um grupo finito, e outro, específico para os grupos finitos solúveis, que permite obter todos os seus subgrupos. Na última parte do capítulo mostraremos como é possível usar ambos os métodos para determinar os correspondentes subgrupos dos grupos infinitos de Shubnikov.

4.1 - Subgrupos Normais de um Grupo Finito.

Se Γ for uma representação, não necessariamente irredutível, de um grupo $\mathbb{G}$, ela será um homomorfismo de $\mathbb{G}$ em um grupo de matrizes e, portanto, terá um núcleo definido por $\mathrm{Ker}\ \Gamma = \{ g \in \mathbb{G} \mid \Gamma(g) = \Gamma(1) \}$. Então, se Γ for redutível, ela poderá ser escrita como a soma direta de irreps Γ_α de $\mathbb{G}$: $\Gamma = \oplus \Gamma_\alpha$ cujo núcleo será: $\mathrm{Ker}\ \Gamma = \bigcap \mathrm{Ker}\ \Gamma_\alpha$, $\forall\ \Gamma_\alpha \subset \Gamma$. Como a representação regular $\Gamma^{\mathbf{R}}$ de $\mathbb{G}$ contém todas as irreps de $\mathbb{G}$, e como $\mathrm{Ker}\ \Gamma^{\mathbf{R}} = 1$, temos que a interseção dos núcleos de todas as irreps Γ_α de $\mathbb{G}$ é igual ao subgrupo unidade, isto é $\bigcap \mathrm{Ker}\ \Gamma_\alpha = 1$ $\forall\ \Gamma_\alpha \in \mathrm{Irrep}(\mathbb{G})$.

Seja $\mathbb{N}$ um subgrupo normal qualquer de $\mathbb{G}$ e $\gamma^{\mathbf{R}}$ a representação regular do grupo fator $\mathbb{G}/\mathbb{N}$. A representação Γ de $\mathbb{G}$ dada por $\Gamma(g) = \gamma^{\mathbf{R}}(g\mathbb{N})$, será, em geral, redutível em $\mathbb{G}$ e terá $\mathrm{Ker}\ \Gamma = \mathbb{N} = \bigcap \mathrm{Ker}\ \Gamma_i$, onde Γ_i são algumas das irreps Γ_α de $\mathbb{G}$, contidas em Γ. Isto mostra que todo subgrupo normal de $\mathbb{G}$, é a interseção dos núcleos de algumas das irreps de $\mathbb{G}$.

Observe-se que se $g \in \mathrm{Ker}\ \Gamma$, então $\chi^{\Gamma}(g) = \chi^{\Gamma}(1)$ e, inversamente, se $\chi^{\Gamma}(g) = \chi^{\Gamma}(1)$, por ser Γ unitária $\Gamma(g) = I$, de modo que $g \in \mathrm{Ker}\ \Gamma$. Assim, concluímos que a determinação dos núcleos das irreps de $\mathbb{G}$ pode ser feita por inspeção da tabela de traços de $\mathbb{G}$. Em particular, o grupo derivado $\mathbb{G}'$ de $\mathbb{G}$ é $\mathbb{G}' = \bigcap \{ \mathrm{Ker}\ \Gamma_\alpha \mid \chi^{\Gamma_\alpha}(1) = 1 \}$ e o grupo do centro $\mathbb{Z}(\mathbb{G})$ de $\mathbb{G}$, é constituído por todas as classes de conjugação que contêm apenas um elemento.

Exemplo: Os subgrupos normais de $\mathbb{O}_h$.

Na tabela 4.1 estão dados os traços do grupo $\mathbb{O}_h$, enquanto os núcleos das correspondentes irreps são dados na tabela 4.2 com as classes correspondentes e a denominação de acordo com a nomenclatura de Schönfield[46].

$\mathbb{O}_h$	E	$3C_2$	$8C_3$	$6C'_2$	$6C_4$	i	$3\sigma_h$	$8S_6$	$6\sigma_d$	$6S_4$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1
E_g	2	2	-1	0	0	2	2	-1	0	0
T_{1g}	3	-1	0	-1	1	3	-1	0	-1	1
T_{2g}	3	-1	0	1	-1	3	-1	0	1	-1
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
A_{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
E_u	2	2	-1	0	0	-2	-2	1	0	0
T_{1u}	3	-1	0	-1	1	-3	1	0	1	-1
T_{2u}	3	-1	0	1	-1	-3	1	0	-1	1

TABELA 4.1 - Traços das Irreps de $\mathbb{O}_h$

Ker Γ	Grupo	E	$3C_2$	$8C_3$	$6C'_2$	$6C_4$	i	$3\sigma_h$	$8S_6$	$6\sigma_d$	$6S_4$
A_{1g}	$\mathbb{O}_h$	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×
A_{2g}	$\mathbb{T}_h$	×	×	×			×	×	×		
E_g	$\mathbb{D}_{2h}$	×	×				×	×			
T_{1g}	$\mathbb{C}_i$	×					×				
T_{2g}	$\mathbb{C}_i$	×					×				
A_{1u}	$\mathbb{O}$	×	×	×	×	×					
A_{2u}	$\mathbb{T}_d$	×	×	×						×	×
E_u	$\mathbb{D}_2$	×	×								
T_{1u}	{1}	×									
T_{2u}	{1}	×									

TABELA 4.2 - Núcleos das irreps de $\mathbb{O}_h$

De todas as interseções possíveis, o único subgrupo invariante novo de $\mathbb{O}_h$ é $\mathbb{T} = \mathbb{T}_h \cap \mathbb{O} = \mathbb{T}_h \cap \mathbb{T}_d = \mathbb{O} \cap \mathbb{T}_d$, que completa a tabela de subgrupos normais de $\mathbb{O}_h$.

A partir dos subgrupos normais de $\mathbb{O}_h$ é possivel construir séries de $\mathbb{O}_h$ conhecidas como séries chefe ou principais e que são mostradas na figura 4.1.

$$\begin{tikzcd}
 & \mathbb{O} \arrow[dr] & & & \\
\mathbb{O}_h \arrow[ur] \arrow[r] \arrow[dr] & \mathbb{T}_d \arrow[r] & \mathbb{T} \arrow[r] & \mathbb{D}_2 \arrow[r] & \{1\} \\
 & \mathbb{T}_h \arrow[ur] \arrow[r] & \mathbb{D}_{2h} \arrow[ur] \arrow[r] & \mathbb{C}_i \arrow[ur] &
\end{tikzcd}$$

FIGURA 4.1 - Séries chefe de $\mathbb{O}_h$

A série $\mathbb{G} = \mathbb{G}_0 \triangleright \cdots \triangleright \mathbb{G}_{i-1} \triangleright \mathbb{G}_i \triangleright \cdots \triangleright \mathbb{G}_n$ é uma *série chefe* de $\mathbb{G}$, se $\mathbb{G}_i$ for o máximo subgrupo invariante de $\mathbb{G}$ contido em $\mathbb{G}_{i-1}$. Obviamente $\mathbb{G}_1$ é um subgrupo invariante máximo de $\mathbb{G}$, mas isto não é válido para qualquer outro subgrupo $\mathbb{G}_i$ com respeito a $\mathbb{G}_{i-1}$.

Da definição de série chefe, vemos que $\mathbb{G}_{i-1}/\mathbb{G}_i$ deve ser um subgrupo invariante mínimo em $\mathbb{G}/\mathbb{G}_i$: suponhamos, por absurdo, que existe um subgrupo invariante $\mathbb{L}$ de $\mathbb{G}$, tal que $1 \leq \mathbb{L}/\mathbb{G}_i \leq \mathbb{G}_{i-1}/\mathbb{G}_i$. Então, pelo primeiro teorema do isomorfismo, temos $\mathbb{G}_i \leq \mathbb{L} \leq \mathbb{G}_{i-1}$ e, por hipótese, ou $\mathbb{L} = \mathbb{G}_i$ ou $\mathbb{L} = \mathbb{G}_{i-1}$.

Podemos definir grupos solúveis finitos dizendo que os fatores de suas séries chefe são isomorfos a grupos abelianos elementares, pois refinando tais séries obtemos séries de composição com grupos fatores isomorfos a grupos cíclicos de ordem prima.

No caso de grupos solúveis infinitos, geralmente eles não têm séries chefe na série de composição. Começaremos estudando a possibilidade da existência de séries chefe, lembrando que os fatores de uma série chefe têm que ser grupos mínimos e, como o grupo é solúvel, estes fatores são também solúveis.

Seja $\mathbb{H}$ um subgrupo invariante mínimo de um grupo solúvel $\mathbb{G}$. O grupo derivado $\mathbb{H}'$ de $\mathbb{H}$ é um subgrupo de $\mathbb{H}$ menor que $\mathbb{H}$, pois $\mathbb{H}$ é solúvel. Mas, da hipótese de que $\mathbb{H}$ é mínimo, deve valer que $\mathbb{H}' = \{1\}$ e, portanto, $\mathbb{H}$ é um grupo abeliano. Definimos agora o grupo $\mathbb{H}[p] = \{h \in \mathbb{H} \mid h^p = 1\}$, onde p é um número primo. Se $h \in \mathbb{H}[p]$ então $(ghg^{-1})^p = 1$, portanto $ghg^{-1} \in \mathbb{H}[p]$, e assim, $\mathbb{H}[p]$ é normal em $\mathbb{G}$. Disto, e de nossa hipótese de que $\mathbb{H}$ é mínimo em $\mathbb{G}$, deve valer que ou $\mathbb{H}[p] = \mathbb{H}$ ou $\mathbb{H}[p] = \{1\}$. Se $\mathbb{H}[p] = \mathbb{H}$, concluímos que $\mathbb{H}$ é um grupo abeliano elementar (isto vale se $\mathbb{H}$ for finito). Se $\mathbb{H}[p] = \{1\}$, concluímos que $\mathbb{H}$ não contém elementos de ordem finita (neste caso $\mathbb{H}$ é dito um grupo *livre de torção*).

Se $\mathbb{H}$ for um grupo livre de torção, definimos $\mathbb{H}^p$ como o grupo gerado pela potência p de todos os geradores de $\mathbb{H}$. Obviamente $\mathbb{H}^p$ é um subgrupo menor que $\mathbb{H}$. Sejam $h_1, \cdots, h_r$ os geradores de $\mathbb{H}$. Como $\mathbb{H}$ é invariante, vale que

$$g(h_1^{k_1} \cdots h_r^{k_r})g^{-1} = (gh_1g^{-1})^{k_1} \cdots (gh_rg^{-1})^{k_r} = h_1^{k'_1} \cdots h_r^{k'_r} \,. \quad (4.1.1)$$

Então $\mathbb{H}^p = \langle h_1^p, \cdots, h_r^p \rangle$ é invariante em $\mathbb{G}$ pois elevando à p o primeiro e o terceiro membros da eq. (4.1.1) obtemos:

$$g(h_1^p)^{k_1} \cdots (h_r^p)^{k_r} g^{-1} = (h_1^p)^{k'_1} \cdots (h_r^p)^{k'_r} \,.$$

Como $\mathbb{H}^p$ é maior que $\{1\}$ concluímos que para $\mathbb{H}$ infinito deve valer que $\mathbb{H}^p = \mathbb{H}\ \forall\ p$. Esta relação só é válida se $\mathbb{H}$ for o produto direto de n cópias de $\mathbb{Q}$, o grupo aditivo dos números racionais, pois para este grupo, dado um elemento h, existe sempre um elemento h_1 tal que $h = ph_1$, e portanto $\mathbb{H}^p = \mathbb{H}$.

O resultado acima nos mostra que grupos espaciais cristalográficos não têm séries chefe. Isto fica claro quando tomamos um grupo espacial cristalográfico $\mathbb{G}$ e seu grupo fator $\mathbb{G}/T \sim \mathbb{P}$, onde $\mathbb{P}$ é um grupo pontual cristalográfico no espaço de n dimensões e $T \sim \mathbb{Z}^n$, com $\mathbb{Z}$ sendo o grupo aditivo dos números inteiros. Então, uma série de grupos máximos invariantes de $\mathbb{G}$ teria a forma:

$$\mathbb{G} \triangleright \cdots \triangleright \mathbb{G}_i \triangleright \cdots \triangleright T \triangleright \ldots \triangleright T_i \triangleright \cdots \triangleright \{1\} .$$

Mas esta série tem infinitos termos pois existem infinitos subgrupos máximos T_i de T. Este resultado segue do fato de que $T/T_i \sim$ **A** (abeliano elementar finito) e, portanto, **A** tem que ser isomorfo a $\mathbb{Z}_p^n$; mas então $T_i \sim (p\mathbb{Z})^n$ que não é abeliano elementar.

Na seção 4.3 mostraremos que ainda assim é possível estabelecer uma correspondência íntima entre grupos cristalográficos com redes de Bravais finitas e infinitas, de modo a podermos estender todos os resultados obtidos em redes finitas aos grupos com redes infinitas.

4.2- Seqüências de Subgrupos Máximos de Grupos Finitos Solúveis.

Nesta seção desenvolveremos um método que permite essencialmente determinar os subgrupos máximos de qualquer grupo finito solúvel. Aplicando o método iterativamente é possível construir a rede de subgrupos máximos de um grupo finito solúvel $\mathbb{G}$. Como todo subgrupo de um grupo $\mathbb{G}$ ou é máximo ou é subgrupo de um grupo máximo, nesta rede estarão contidos todos os subgrupos de $\mathbb{G}$.

Inicialmente calcularemos os subgrupos máximos dos grupos finitos solúveis de ordem p^n com p um número primo, ou seja, dos chamados *p-grupos*[47] e em seguida resolveremos o problema para grupos finitos solúveis.

Seja $\mathbb{G}$ um p-grupo e $\mathbb{F}$ o seu *subgrupo de Frattini*, isto é, a intersecção de todos os subgrupos máximos $\mathbb{M}_i$ de $\mathbb{G}$, e que satisfaz o teorema base de Burnside[48]

$$\mathbb{F} = \bigcap_i \mathbb{M}_i = \mathbb{G}' \; \mathbb{G}^p \; , \qquad (4.2.1)$$

onde $\mathbb{G}'$ é o grupo derivado de $\mathbb{G}$ e $\mathbb{G}^p$ é o subgrupo de $\mathbb{G}$ gerado por todas as potências g^p dos elementos g de $\mathbb{G}$. Então, da relação (4.2.1) imediatamente obtém-se que $\mathbb{G}/\mathbb{F}$ é um grupo abeliano elementar, o que equivale a dizer que se

$$\mathbb{G}/\mathbb{F} = \langle t_1\mathbb{F}, \cdots, t_r\mathbb{F}\rangle \; ,$$

teremos:

$$t_i\mathbb{F}\; t_j\mathbb{F} = t_j\mathbb{F}\; t_i\mathbb{F} \quad \text{e} \quad (t_i\mathbb{F})^p = \mathbb{F} \; . \qquad (4.2.2)$$

Mostraremos que um p-grupo $\mathbb{G}$ é gerado pelos elementos $t_1, \cdots, t_r$ contidos no transversal T. Suponhamos, por absurdo, que o grupo $\mathbb{G} = \langle f, T \rangle$, onde $f \in \mathbb{F}$ mas não pertence a T. Da definição do subgrupo de Frattini, o subgrupo $\langle T\rangle$ de $\mathbb{G}$ não pode ser máximo em $\mathbb{G}$, uma vez que neste caso f estaria contido em $\langle T\rangle$. Portanto, existe um subgrupo $\mathbb{M}$ próprio e máximo em $\mathbb{G}$ tal que $\langle T\rangle < \mathbb{M} < \mathbb{G}$, mas como $\mathbb{M}$ contém $\langle T\rangle$ não pode conter f e, portanto, este resultado só é válido se $\langle T\rangle = \mathbb{G}$. Do anterior concluimos que os elementos de $\mathbb{F}$ são redundantes na geração de $\mathbb{G}$, isto é, se o grupo fator $\mathbb{G}/\mathbb{F}$ é dado pela eq. (4.2.2), temos que $\mathbb{G} = \langle t_1, \cdots, t_r \rangle$.

Se $r = 1$, $\mathbb{F}$ é máximo em $\mathbb{G}$ pois a ordem de $\mathbb{G}/\mathbb{F}$ é p. Se $r > 1$, para determinar os subgrupos máximos de $\mathbb{G}$ precisamos lembrar as seguintes propriedades dos p-grupos:

Se $\mathbb{G}$ é um p-grupo,

a) Qualquer subgrupo de $\mathbb{G}$ é também um p-grupo[49];

b) O normalizador de um subgrupo próprio $\mathbb{H}$ de $\mathbb{G}$ é estritamente maior que $\mathbb{H}$. Então, se $\mathbb{H}$ for máximo em $\mathbb{G}$, $\mathbb{H}$ será também normal em $\mathbb{G}$[50];

c) Se $\mathbb{M}$ for um subgrupo qualquer máximo de $\mathbb{G}$, o grupo fator $\mathbb{G}/\mathbb{M}$ será um grupo cíclico de ordem p e, em particular, o índice de $\mathbb{M}$ em $\mathbb{G}$, $|\mathbb{G}:\mathbb{M}|$, será p[51].

Burnside[52] mostrou que um grupo abeliano elementar de ordem p^r possui $(p^r - 1)/(p - 1)$ subgrupos máximos $\mathbb{M}_i$ distintos entre si. Utilizando a eq. (4.2.2), é fácil estabelecer os geradores destes grupos.

Temos p^{r-1} grupos gerados por:

$$\langle (t_1^{\alpha_2})t_2\mathbb{F},\ (t_1^{\alpha_3})t_3\mathbb{F},\ (t_1^{\alpha_4})t_4\mathbb{F}, \ldots, (t_1^{\alpha_r})t_r\mathbb{F} \rangle .$$

Temos p^{r-2} grupos gerados por:

$$\langle t_1\mathbb{F},\ (t_2^{\alpha_3})t_3\mathbb{F},\ (t_2^{\alpha_4})t_4\mathbb{F}, \ldots, (t_2^{\alpha_r})t_r\mathbb{F} \rangle .$$

Temos p^{r-3} grupos gerados por:

$$\langle t_1\mathbb{F},\ t_2\mathbb{F},\ (t_3^{\alpha_4})t_4\mathbb{F}, \ldots, (t_3^{\alpha_r})t_r\mathbb{F} \rangle ,$$

etc..

Seguindo esta descrição teremos:

$$\sum_{k=0}^{r-1} p^k = \frac{p^r - 1}{p - 1} ,$$

que justamente é o resultado já mencionado.

Considerando o mapeamento canônico $\varphi : \mathbb{G} \to \bar{\mathbb{G}}$, do primeiro teorema do isomorfismo segue que $\mathbb{M}_i = \varphi^{-1}(\bar{\mathbb{M}}_i)$ é um subgrupo de $\mathbb{G}$. Suponhamos que exista um subgrupo $\mathbb{H}$ de $\mathbb{G}$ tal que $\mathbb{M}_i \leq \mathbb{H} \leq \mathbb{G}$. Então, desde que $\mathbb{F}$ é *característico*(*) em $\mathbb{G}$ (por definição), ele tem que ser invariante de $\mathbb{H}$, de modo que o grupo fator $\mathbb{H}/\mathbb{F}$ existe. Uma vez que $\mathbb{M}_i/\mathbb{F}$ é um subgrupo máximo de $\mathbb{G}/\mathbb{F}$, $\mathbb{H}$ é igual a $\mathbb{G}$ ou a $\mathbb{M}_i$ e, portanto, $\mathbb{M}_i$ é um subgrupo máximo de $\mathbb{G}$.

Uma questão interessante consiste em determinar o número de geradores dos subgrupos máximos $\mathbb{M}_i$ de um p-grupo $\mathbb{G}$ com r geradores. Para resolver tal questão usaremos os seguintes resultados[53]:

a) Se $\mathbb{K} \triangleleft \mathbb{G}$, então $\mathbb{F}(\mathbb{K}) \triangleleft \mathbb{F}(\mathbb{G})$.

b) Se $\mathbb{N} \triangleleft \mathbb{F}(\mathbb{G})$, então $\mathbb{F}(\mathbb{G}/\mathbb{N}) = \mathbb{F}(\mathbb{G})/\mathbb{N}$.

Uma vez que $\mathbb{F}(\mathbb{K})$ é característico em $\mathbb{K}$, e que $\mathbb{M}$ é um subgrupo máximo de um p-grupo $\mathbb{G}$, segue que: $\mathbb{F}(\mathbb{M}) \leq \mathbb{F}(\mathbb{G}) \leq \mathbb{M} \triangleleft \mathbb{G}$. Usando o primeiro teorema do isomorfismo etabelecemos que

$$(\mathbb{M}_i/\mathbb{F}(\mathbb{M}_i))/(\mathbb{F}(\mathbb{G})/\mathbb{F}(\mathbb{M}_i)) \sim \mathbb{M}_i/\mathbb{F}(\mathbb{G}) .$$

Conforme mostramos acima $\mathbb{M}_i/\mathbb{F}(\mathbb{G})$ tem r-1 geradores, de modo que $\mathbb{M}_i$ terá r+s-1 geradores, onde $p^s = |\mathbb{F}(\mathbb{G})/\mathbb{F}(\mathbb{M}_i)|$, e,

(*) Um subgrupo $\mathbb{H}$ de um grupo $\mathbb{G}$ é dito característico em $\mathbb{G}$ se $\mathbb{H}^\alpha \leq \mathbb{H}$ $\forall\ \alpha \in \mathrm{Aut}\ \mathbb{G}$.

obviamente, $r \leq s+1 \leq m$, onde $|\mathbb{G}| = p^m$.

Tomemos como exemplo o grupo pontual cristalográfico $\mathbb{D}_{4h}$ que é um p-grupo de ordem 2^4 dado por:

$$\mathbb{D}_{4h} = \mathbb{D}_4 \otimes \langle i | i^2 = 1 \rangle \ ,$$

$$\mathbb{D}_4 = \langle \alpha, \gamma, \delta | \alpha^2 = \gamma^2 = \delta^2 = (\alpha\gamma)^4 = (\alpha\delta)^2 = (\gamma\delta)^2 = 1 \rangle \ ,$$

e calculemos seus subgrupos máximos. Da eq (4.2.1) segue que:

$$\mathbb{F}(\mathbb{D}_{4h}) = \mathbb{F} - \langle \delta \rangle \ .$$

Então,

$$\bar{\mathbb{D}}_{4h} = \mathbb{D}_{4h}/\mathbb{F} = \langle i\mathbb{F}, \alpha\mathbb{F}, \gamma\mathbb{F} \rangle = \langle \bar{i}, \bar{\alpha}, \bar{\gamma} \rangle \sim (\mathbb{Z}_2)^3 \ , \qquad (4.2.3)$$

onde $\mathbb{Z}_p$ é o p-grupo cíclico aditivo.

Daqui obtemos sete diferentes expressões para o grupo $\bar{\mathbb{G}}$ em termos dos seus subgrupos as quais determinam os sete subgrupos máximos $\bar{\mathbb{M}}_i$ de $\bar{\mathbb{G}}$.

Escrevendo os elementos de $\mathbb{F}(\mathbb{D}_{4h})$ explicitamente em $\bar{\mathbb{M}}_i$, obtemos os sete subgrupos máximos de $\mathbb{D}_{4h}$ dados na tabela 4.3

$\langle \alpha\mathbb{F}, \gamma\mathbb{F} \rangle$	$\Rightarrow \mathbb{M}_1 =$	$\mathbb{D}_4$	$= \langle \alpha, \gamma, \delta \rangle$
$\langle i\mathbb{F}, \alpha\mathbb{F} \rangle$	$\Rightarrow \mathbb{M}_2 =$	$\mathbb{D}_{2h}$	$= \langle i, \alpha, \delta \rangle$
$\langle i\mathbb{F}, \gamma\mathbb{F} \rangle$	$\Rightarrow \mathbb{M}_3 =$	$\mathbb{D}_{2h}$	$= \langle i, \gamma, \delta \rangle$
$\langle i\alpha\mathbb{F}, \gamma\mathbb{F} \rangle$	$\Rightarrow \mathbb{M}_4 =$	$\mathbb{D}_{2d}$	$= \langle i\alpha, \gamma, \delta \rangle$
$\langle \alpha\mathbb{F}, i\gamma\mathbb{F} \rangle$	$\Rightarrow \mathbb{M}_5 =$	$\mathbb{D}_{2d}$	$= \langle \alpha, i\gamma, \delta \rangle$
$\langle i\mathbb{F}, \alpha\gamma\mathbb{F} \rangle$	$\Rightarrow \mathbb{M}_6 =$	$\mathbb{C}_{4h}$	$= \langle i, \alpha\gamma \rangle$
$\langle i\alpha\mathbb{F}, i\gamma\mathbb{F} \rangle$	$\Rightarrow \mathbb{M}_7 =$	$\mathbb{C}_{4v}$	$= \langle i\alpha, i\gamma, \delta \rangle$

TABELA 4.3 - Subgrupos Máximos de $\mathbb{D}_{4h}$

Para tratar o caso geral, chamemos $\mathbb{N}_i$ os subgrupos máximos de um grupo solúvel finito $\mathbb{G}$ e $\mathbb{M}_i$ os subgrupos máximos de um p-grupo $\mathbb{S}_p$. Como $\mathbb{G}$ é um grupo finito, sua ordem pode ser escrita

$$|\mathbb{G}| = p^n K \quad , \quad (p,K) = 1 \ . \tag{4.2.4}$$

Então, $\mathbb{G}$ pode ser decomposto no produto de dois subgrupos[54]

$$\mathbb{G} = \mathbb{S}_p \mathbb{K} = \mathbb{K} \mathbb{S}_p \ , \tag{4.2.5}$$

onde $|\mathbb{S}_p| = p^n$, $|\mathbb{K}| = K$. Um elemento do produto $\mathbb{S}_p\mathbb{K}$ é definido por sk, com $s \in \mathbb{S}_p$ e $k \in \mathbb{K}$.

Uma vez que cada subgrupo de um grupo solúvel é, por sua vez, solúvel, e sabendo que o índice de qualquer subgrupo máximo $\mathbb{N}_i$ em $\mathbb{G}$ é uma potência m (< n) de algum número primo p, temos que:

$$\mathbb{N}_i = \mathbb{H}_i \mathbb{K} = \mathbb{K} \mathbb{H}_i \ , \tag{4.2.6}$$

onde $\mathbb{H}_i$ é um subgrupo de $\mathbb{S}_p$. Para determinar os subgrupos $\mathbb{H}_i$, toma-se um dos $\mathbb{M}_i$ e forma-se o conjunto $\mathbb{M}_i \mathbb{K}$ que só será subgrupo máximo de $\mathbb{G}$ se satisfizer a relação de comutação $\mathbb{M}_i \mathbb{K} = \mathbb{K} \mathbb{M}_i$. Se a relação de comutação não for satisfeita, o conjunto $\mathbb{M}_i\mathbb{K}$ gera $\mathbb{G}$ e é necessário estudar o subconjunto $\mathbb{M}_{i,j}\mathbb{K}$, onde $\mathbb{M}_{i,j}$ é um subgrupo máximo de $\mathbb{M}_i$. O subconjunto $\mathbb{M}_{i,j}\mathbb{K}$ ou é um subgrupo próprio de $\mathbb{G}$ ou então ele gera $\mathbb{G}$ novamente.

É importante frisar que como $\mathbb{M}_{i,j}$ pode ser um subgrupo do grupo precedente $\mathbb{M}_k$ (com $\mathbb{M}_k \mathbb{K}$ sendo máximo em $\mathbb{G}$) nem todo conjunto satisfazendo a relação $\mathbb{M}_{i,j}\mathbb{K} = \mathbb{K}\, \mathbb{M}_{i,j}$ é um subgrupo máximo de $\mathbb{G}$.

Depois de excluir aqueles conjuntos por inspeção e separar os outros que não satisfazem a relação de comutação, tomamos o conjunto $\mathbb{M}_{i,j,k}\mathbb{K}$, onde novamente $\mathbb{M}_{i,j,k}$ é um subgrupo máximo do subgrupo precedente $\mathbb{M}_{i,j}$, e repetimos o processo de identificação. O procedimento deve ser repetido até esgotar os subgrupos $\mathbb{M}_{i,j,k,\cdots}$. Uma vez que $\mathbb{G}$ é um grupo finito, obviamente o número de passos também o é.

Para exemplificar o método completo, obteremos agora os subgrupos máximos do grupo pontual cristalográfico $\mathbb{O}_h = \mathbb{O} \otimes \langle i \,|\, i^2 = 1 \rangle$. O grupo Octaédrico é apresentado por[55]

$$\mathbb{O} = \langle \alpha, \beta, \gamma, \delta \,|\, \alpha^2=\beta^3=\gamma^2=\delta^2=(\alpha\beta)^2=(\alpha\gamma)^4=(\alpha\delta)^2=(\beta\gamma)^3=(\beta\delta)^3=(\gamma\delta)^2=1 \rangle .$$

Para obter os subgrupos máximos de $\mathbb{O}_h$ tais que $|\mathbb{O}_h : \mathbb{N}_i| = 2^n$, $n < 4$, escolhemos

$$\mathbb{K} = \mathbb{C}_3 = \langle \beta \,|\, \beta^3 = 1 \rangle .$$

Deste modo $\mathbb{S}_p = \mathbb{D}_{4h}$ e todos os subgrupos máximos correspondentes são os dados na tab. 4.3. Formando os produtos $\mathbb{M}_i\mathbb{K}$, $\mathbb{M}_{i,j}\mathbb{K}$, $\cdots$ etc, construímos uma tabela e dela selecionamos os subgrupos desejados sem repetições. Este processo está mostrado na tabela 4.4 com os subgrupos formados pelos produtos, incluindo aqueles que geram $\mathbb{O}_h$, as repetições e os subgrupos máximos de $\mathbb{O}_h$.

Repetindo o procedimento para cada um dos subgrupos máximos de $\mathbb{O}_h$, determinaremos a rede de subgrupos máximos de $\mathbb{O}_h$, a qual é dada a seguir, separada em cinco cadeias menores a fim de facilitar a visualização, nas figuras 4.2 a 4.6.

$$\mathbb{M}_i \qquad\qquad \mathbb{M}_{i,j} \qquad\qquad \mathbb{M}_{i,j,k}$$

$$\mathbb{M}_1\mathbb{C}_3 = \langle\alpha,\gamma,\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}$$

$$\mathbb{M}_2\mathbb{C}_3 = \langle i,\alpha,\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}_h\left\{\begin{array}{l}
\langle i,\alpha\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{D}_{3d}\\
\langle i,\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_h\\
\langle \alpha,\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}\\
\langle i\alpha,\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_d\\
\langle \alpha,i\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}_h\left\{\begin{array}{l}\langle\alpha\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{D}_3 \subseteq \mathbb{D}_{3d}\\ \langle i\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_h\\ \langle i\alpha\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_d\end{array}\right.\\
\langle i,\alpha\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}_h\left\{\begin{array}{l}\langle i\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{C}_{3h} \subseteq \mathbb{D}_{3d}\\ \langle \alpha\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}\end{array}\right.\\
\langle i\alpha,i\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}_h\left\{\begin{array}{l}\langle i\alpha\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{C}_{3v} \subseteq \mathbb{D}_{3d}\\ \langle i\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_h\end{array}\right.
\end{array}\right.$$

$$\mathbb{M}_3\mathbb{C}_3 = \langle i,\gamma,\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_h$$

$$\mathbb{M}_4\mathbb{C}_3 = \langle i\alpha,\gamma,\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_d$$

$$\mathbb{M}_5\mathbb{C}_3 = \langle \alpha,i\gamma,\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}_h\left\{\begin{array}{l}
\langle \alpha,i\gamma\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}_h\left\{\begin{array}{l}\langle\alpha\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{D}_3 \subseteq \mathbb{D}_{3d}\\ \langle i\gamma\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_h\\ \langle i\alpha\gamma\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_d\end{array}\right.\\
\langle \alpha,\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}\\
\langle i\gamma,\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_h\\
\langle i\alpha\gamma,\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_d\\
\langle \alpha\gamma,i\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}_h\left\{\begin{array}{l}\langle\alpha\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{D}_3 \subseteq \mathbb{D}_{3d}\\ \langle i\gamma\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_h\end{array}\right.\\
\langle \alpha,i\gamma\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}_h\left\{\begin{array}{l}\langle\alpha\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{D}_3 \subseteq \mathbb{D}_{3d}\\ \langle i\gamma\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_h\end{array}\right.\\
\langle i\alpha\gamma,\alpha\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}_h\left\{\begin{array}{l}\langle i\alpha\gamma\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_d\\ \langle \alpha\gamma\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}\end{array}\right.
\end{array}\right.$$

$$\mathbb{M}_6\mathbb{C}_3 = \langle i,\alpha\gamma\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}_h\left\{\begin{array}{l}
\langle i\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{C}_{3h} \subseteq \mathbb{D}_{3d}\\
\langle \alpha\gamma\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}\\
\langle i\alpha\gamma\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_d
\end{array}\right.$$

$$\mathbb{M}_7\mathbb{C}_3 = \langle i\alpha,i\gamma,\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}_h\left\{\begin{array}{l}
\langle i\alpha,i\gamma\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}_h\left\{\begin{array}{l}\langle i\alpha\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{C}_{3v} \subseteq \mathbb{D}_{3d}\\ \langle i\gamma\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_h\end{array}\right.\\
\langle i\alpha,\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_d\\
\langle i\gamma,\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_h\\
\langle \alpha\gamma,\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}\\
\langle i\alpha\delta,i\gamma\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}_h\left\{\begin{array}{l}\langle i\alpha\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_d\\ \langle i\gamma\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_h\end{array}\right.\\
\langle i\alpha,i\gamma\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}_h\left\{\begin{array}{l}\langle i\alpha\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{C}_{3v} \subseteq \mathbb{D}_{3d}\\ \langle i\gamma\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_h\end{array}\right.\\
\langle \alpha\gamma,i\alpha\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}_h\left\{\begin{array}{l}\langle \alpha\gamma\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{O}\\ \langle i\alpha\delta\rangle\langle\beta\rangle = \mathbb{T}_d\end{array}\right.
\end{array}\right.$$

TABELA 4.4 - Construção dos subgrupos máximos de $\mathbb{O}_h$.

$$
\begin{tikzcd}
 & & & \mathbb{C}_3\langle\beta\rangle & \\
 & & \mathbb{T}\langle\beta,\gamma,\delta\rangle \arrow[ur] \arrow[ddr] & & \\
 & & & & \mathbb{C}_2\langle\gamma\rangle \\
 & & & \mathbb{D}_2\langle\gamma,\delta\rangle \arrow[ur] \arrow[dr] & \\
\mathbb{O}_h\langle i,\alpha,\beta,\gamma,\delta\rangle \arrow[r] & \mathbb{O}\langle\alpha,\beta,\gamma,\delta\rangle \arrow[uuur] \arrow[r] \arrow[ddddr] & \mathbb{D}_4\langle\alpha,\gamma,\delta\rangle \arrow[ur] \arrow[r] \arrow[dr] & \mathbb{C}_4\langle\alpha\gamma\rangle & \mathbb{C}_2\langle\delta\rangle \\
 & & & \mathbb{D}_2\langle\alpha,\delta\rangle \arrow[ur] \arrow[dr] & \\
 & & & & \mathbb{C}_2\langle\alpha\rangle \\
 & & & \mathbb{C}_2\langle\alpha\rangle & \\
 & & \mathbb{D}_3\langle\alpha,\beta\rangle \arrow[ur] \arrow[dr] & & \\
 & & & \mathbb{C}_3\langle\beta\rangle &
\end{tikzcd}
$$

FIGURA 4.2 - Sequências de subgrupos máximos de $\mathbb{O}_h$

$$
\begin{tikzcd}
 & & & \mathbb{C}_3\langle\beta\rangle & \\
 & & \mathbb{T}\langle\beta,\gamma,\delta\rangle \arrow[ur] \arrow[ddr] & & \\
 & & & & \mathbb{C}_2\langle\gamma\rangle \\
 & & & \mathbb{D}_2\langle\gamma,\delta\rangle \arrow[ur] \arrow[dr] & \\
\mathbb{O}_h\langle i,\alpha,\beta,\gamma,\delta\rangle \arrow[r] & \mathbb{T}_d\langle i\alpha,\beta,\gamma,\delta\rangle \arrow[uuur] \arrow[r] \arrow[ddddr] & \mathbb{D}_{2d}\langle i\alpha,\gamma,\delta\rangle \arrow[ur] \arrow[r] \arrow[dr] & \mathbb{S}_4\langle i\alpha,\delta\rangle & \mathbb{C}_2\langle\delta\rangle \\
 & & & \mathbb{C}_{2v}\langle i\alpha,\delta\rangle \arrow[ur] \arrow[dr] & \\
 & & & & \mathbb{S}_2\langle i\alpha\rangle \\
 & & & \mathbb{S}_2\langle i\alpha\rangle & \\
 & & \mathbb{C}_{3v}\langle i\alpha,\beta\rangle \arrow[ur] \arrow[r] \arrow[dr] & \mathbb{S}_2\langle i\alpha\beta\rangle & \\
 & & & \mathbb{C}_3\langle\beta\rangle &
\end{tikzcd}
$$

FIGURA 4.3 - Sequências de subgrupos máximos de $\mathbb{O}_h$

$$
\begin{tikzcd}
 & & & \mathbb{C}_2\langle\alpha\rangle \\
 & & \mathbb{D}_3\langle\alpha,\beta\rangle \arrow[ur] \arrow[dr] & \\
 & & & \mathbb{C}_3\langle\beta\rangle \\
\mathbb{O}_h\langle i,\alpha,\beta,\gamma,\delta\rangle \arrow[r] & \mathbb{D}_{3d}\langle i,\alpha,\beta\rangle \arrow[uur] \arrow[r] \arrow[ddr] & \mathbb{C}_{3v}\langle i\alpha,\beta\rangle \arrow[ur] \arrow[r] \arrow[dr] & \mathbb{S}_2\langle i\alpha\beta\rangle \\
 & & & \mathbb{S}_2\langle i\alpha\rangle \\
 & & \mathbb{S}_6\langle i,\beta\rangle &
\end{tikzcd}
$$

FIGURA 4.4 - Sequências de subgrupos máximos de $\mathbb{O}_h$

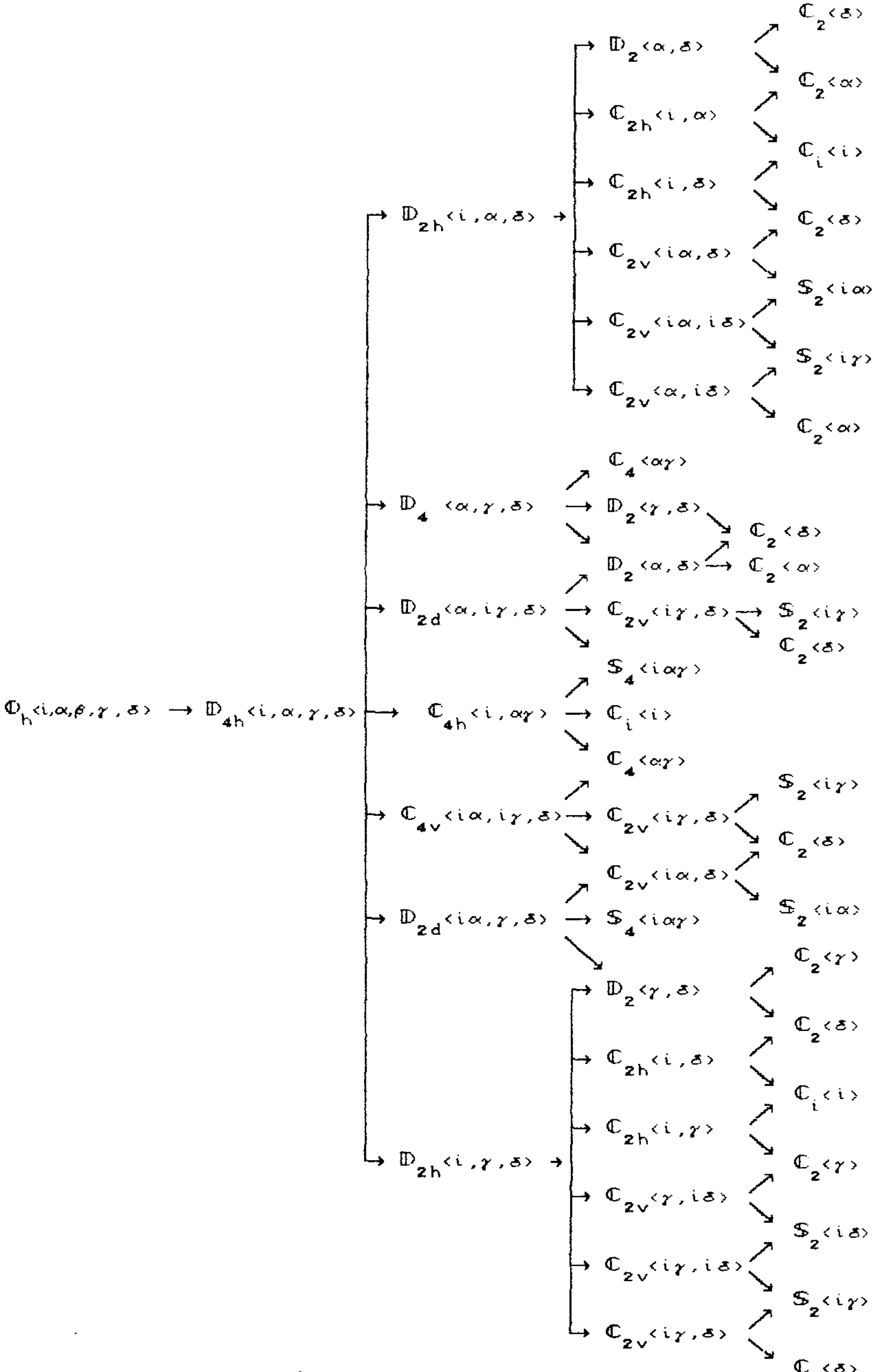

FIGURA 4.5 - Sequências de subgrupos máximos de $\mathbb{O}_h$

$$\begin{tikzcd}
 & & \mathbb{C}_3\langle\beta\rangle & \\
 & \mathbb{T}\langle\beta,\gamma,\delta\rangle \arrow[ur] \arrow[ddr] & & \\
 & & & \mathbb{C}_2\langle\gamma\rangle \\
 & & \mathbb{D}_2\langle\gamma,\delta\rangle \arrow[ur] \arrow[dr] & \\
 & & & \mathbb{C}_2\langle\delta\rangle \\
\mathbb{O}_h\langle i,\alpha,\beta,\gamma,\delta\rangle \quad \mathbb{T}_h\langle i,\beta,\gamma,\delta\rangle \arrow[uuuur] \arrow[r] \arrow[ddddr] & \mathbb{D}_{2h}\langle i,\gamma,\delta\rangle \arrow[uur] \arrow[r] \arrow[ddr] & \mathbb{C}_{2h}\langle i,\delta\rangle \arrow[ur] \arrow[dr] & \\
 & & & \mathbb{C}_i\langle i\rangle \\
 & & \mathbb{C}_{2h}\langle i,\gamma\rangle \arrow[ur] \arrow[dr] & \\
 & & & \mathbb{C}_2\langle\gamma\rangle \\
 & \mathbb{S}_6\langle i,\beta\rangle & &
\end{tikzcd}$$

FIGURA 4.6 - Sequências de subgrupos máximos de $\mathbb{O}_h$

4.3 - Grupos Solúveis Infinitos.

Em princípio nosso método pode parecer aplicável apenas a grupos finitos. Como dissemos acima estamos interessados nos grupos de Shubnikov, cuja definição está associada a redes de Bravais infinitas. Podemos trabalhar com grupos infinitos desde que primeiro assumamos ter uma rede de Bravais finita onde os geradores das translações fundamentais têm uma periodicidade dada por parâmetros inteiros de ordem m. Temos assim, um grupo "finito" de Shubnikov e podemos aplicar-lhe o nosso método. Após obter os geradores dos subgrupos correspondentes à versão "finita", fazemos as ordens dos geradores das translações na rede de Bravais tenderem a infinito e obtemos, assim, os subgrupos máximos do, então, grupo de Shubnikov infinito. Vejamos como podemos exprimir matematicamente estes conceitos:

Seja $\mathbb{G}$ um grupo espacial com um subgrupo invariante n-dimensional das translações puras T. A rede de Bravais correspondente tem a simetria de T e é invariante sob as operações de um grupo pontual $\mathbb{P}$ que determina o sistema cristalino de $\mathbb{G}$. Assim: $\mathbb{G}/T \sim \mathbb{P}$.

Como vimos na seção 4.1, se $\mathbb{Z}$ é o grupo aditivo dos números inteiros, T é isomorfo ao produto direto de n grupos $\mathbb{Z}$. Por outro lado, sendo $\mathbb{Z}_m$ um grupo finito abeliano com m elementos (adição módulo m) e $m\mathbb{Z}$ o grupo aditivo infinito dos inteiros que são múltiplos de m, então $\mathbb{Z}$ é dado por

$$\mathbb{Z}/m\mathbb{Z} \sim \mathbb{Z}_m,$$

e podemos escrever o grupo das translações T como:

$$T/mT \sim T_m \ ,$$

onde por definição

$$mT \sim (m\mathbb{Z})^n$$

e

$$T_m \sim (\mathbb{Z}_m)^n \quad .$$

Para definir uma cópia finita do nosso grupo $\mathbb{G}$, é necessário provar que mT também é um subgrupo invariante de $\mathbb{G}$. Sejam $\vec{a}$ e $\vec{b}$ dois vetores de translação da rede de Bravais. Então, a relação

$$\vec{b} = r^{-1}\,\vec{a}\,r$$

tem que valer para algum $r \in \mathbb{P}$.

Se t_i ($i = 1, \cdots, n$) são os geradores de T, teremos

$$r^{-1}\sum_i a_i\,t_i\,r = \sum_i b_i\,t_i \ .$$

Tomando $m\vec{a}$ e $m\vec{b}$ como sendo os vetores translacionais do grupo mT, teremos

$$r^{-1}\left(\sum_i a_i \, mt_i \right) r = \sum_i b_i \, m \, t_i$$

e assim, mT também é um subgrupo invariante de $\mathbb{G}$.

Finalmente estamos em condições de definir $\mathbb{G}_m$, a cópia finita do grupo $\mathbb{G}$, usando o mapeamento canônico

$$\varphi : \mathbb{G} \to \mathbb{G}/mT \sim \mathbb{G}_m .$$

Usando o terceiro teorema do isomorfismo podemos escrever

$$\mathbb{G}_m/T_m \sim (\mathbb{G}/mT)/(T/mT) \sim \mathbb{G}/T \sim \mathbb{P} .$$

Assim, o grupo $\mathbb{G}_m$ é um grupo espacial realizado em uma rede com m células em cada eixo de coordenadas.

No caso geral, se $\mathbb{H}$, $\mathbb{K}$, $\cdots$ forem subgrupos de um grupo espacial $\mathbb{G}$, $\varphi : \mathbb{H}$, $\varphi : \mathbb{K}$, $\cdots$ serão subgrupos de $\mathbb{G}_m$. Então, dada a seqüência $\mathbb{G}_m \supseteq \mathbb{H}_m \supseteq \mathbb{K}_m \supseteq \cdots$, o inverso do mapeamento canônico φ fornece a seqüência $\mathbb{G} \supseteq \mathbb{H} \supseteq \mathbb{K} \supseteq \cdots$, e portanto, é possível obter um subgrupo infinito de um grupo espacial, a partir de uma cópia finita.

Neste ponto é importante notar que, supondo $\mathbb{G}$ conhecido, então, como ele é infinito, conhecemos sua apresentação. Ou seja, $\mathbb{G}$ é um grupo com um número finito de geradores e relações, isto é, finitamente apresentado. De acordo com o exposto na seção **4**.1 sobre a série chefe de um grupo cristalográfico, este tipo de grupo é finitamente apresentado de modo que os grupos de Shubnikov também o são.

Na nossa construção, as cópias $\mathbb{G}_m$ terão as mesmas relações de $\mathbb{G}$ acrescidas das relações $t_i^m = \mathbf{1}$ $\forall$ $t_i \in T$. Obtidos os geradores dos subgrupos de $\mathbb{G}_m$, eles satisfazem as mesmas relações e, portanto, para obter os subgrupos de $\mathbb{G}$, basta eliminar as relações adicionais sobre os geradores $t_i \in T$.

Por último lembramos que para as redes de Bravais pretas e brancas[56], características de grupos de Shubnikov do tipo IV [57], o isomorfismo $T \sim \mathbb{Z}^n$ ainda vale e a construção das cópias homomorfas $\mathbb{G}_m$ de $\mathbb{G}$ pode ser feita como mostramos acima.

5

TRAÇOS E IRREPS DE GRUPOS SOLÚVEIS

Como vimos no capítulo 1 a estrutura dos grupos finitos fica completamente determinada se conhecermos sua tabela de multiplicação, pois a partir dela é possível se obter as propriedades de um grupo finito e, em particular, sua tabela de traços e as correspondentes irreps.

Neste capítulo e no seguinte desenvolveremos um método recorrente aplicável a grupos solúveis finitos que permite simultaneamente calcular a tabela de traços e as correspondentes irreps dos grupos. Além disso, as irreps obtidas por nosso método estão adaptadas em simetria às séries de composição dos grupos solúveis. Desde que os fatores das séries de composição dos grupos solúveis são isomorfos a grupos cíclicos de ordem prima, o método pode ser aplicado recorrentemente a partir do subgrupo trivial de ordem um.

A importância deste trabalho reside no fato que os métodos conhecidos para os cálculos dos traços[58,59] baseiam-se na diagonalização simultânea das constantes de estrutura do centro da álgebra de Frobenius[60], cálculo que em geral é , não só muito longo, como extremamente trabalhoso. Em relação às representações, conseguimos obter irreps adaptadas em simetria a seqüências de grupos solúveis finitos, ainda nos casos em que o método tradicional de indução não é aplicável. O método pode ser estendido a qualquer grupo finito não simples através da utilização do refinamento de séries derivadas, que leva a que os grupos fatores (também para as seqüências derivadas) sejam grupos cíclicos de ordem prima.

5.1- Traços e Representações

Sejam $\mathbb{G}$ e $\mathbb{H}$ grupos finitos tais que $\mathbb{H} \triangleleft \mathbb{G}$, e $\mathbb{G}/\mathbb{H} \sim \langle t\mathbb{H} \mid (t\mathbb{H})^p = \mathbb{H} \rangle$ com p sendo um número primo.

Seja $\gamma \in \mathrm{Irrep}(\mathbb{H})$; como já vimos, o estabilizador de γ em $\mathbb{G}$ é definido por $\mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma) = \{g \in \mathbb{G} \mid \gamma^g(h) = \gamma(ghg^{-1}) \sim \gamma(h) \ \forall\ h \in \mathbb{H}\}$.

Expressaremos agora, de uma maneira aplicável aos nossos cálculos dois resultados já conhecidos sobre as irreps do grupo $\mathbb{G}$[61]:

-1) A representação induzida $\gamma\uparrow\mathbb{G}$, é irreduzível em $\mathbb{G}$, se o estabilizador de γ em $\mathbb{G}$ for $\mathbb{H}$.

Os elementos de matriz das representações induzidas de $\mathbb{G}$ são dados por

$$\gamma\uparrow\mathbb{G}(g)_{ij} = \begin{cases} \gamma(t^i g t^{-j}) & \text{se } t^i g t^{-j} \in \mathbb{H} \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \qquad (5.1.1)$$

onde $0 \leq i,j < p$. Desta equação, é fácil encontrar os traços $\chi^{\gamma\uparrow\mathbb{G}}$ da representação $\gamma\uparrow\mathbb{G}$,

$$\chi^{\gamma\uparrow\mathbb{G}}(h) = \sum_{k=1}^{p} \chi^{\gamma}(t^k h t^{-k}) \quad , \quad \chi^{\gamma\uparrow\mathbb{G}}(t^n h) = 0, \text{ se } h \in \mathbb{H},\ 0<n<p.$$

Calculando $|\chi^{\gamma\uparrow\Gamma}(g)|^2$ temos:

$$(1/|\mathbb{G}|) \sum_{g\in\mathbb{G}} |\chi^{\gamma\uparrow\mathbb{G}}(g)|^2 = (1/|\mathbb{G}|) \sum_{k=1}^{p} \sum_{h\in\mathbb{H}} |\chi^{\gamma}(t^k h t^{-k})|^2$$

$$= p\ |\mathbb{H}|/|\mathbb{G}| = 1 \ ,$$

que permite concluir que a matriz induzida $\gamma\uparrow\mathbb{G}$ é irreduzível em $\mathbb{G}$ se $S_{\mathbb{G}}(\gamma) = \mathbb{H}$ e $\mathbb{G}/\mathbb{H} \sim \mathbb{C}_p$, cqd.

Por outro lado, desde que p é primo, a outra alternativa para $S_{\mathbb{G}}(\gamma)$ é $\mathbb{G}$. Então,

-2) Quando $S_{\mathbb{G}}(\gamma) = \mathbb{G}$, e $\mathbb{G}/\mathbb{H} \sim \mathbb{C}_p$ a representação induzida $\gamma\uparrow\mathbb{G}$ é reduzível em p irreps Γ_k de $\mathbb{G}$ relacionadas por

$$\Gamma_j(t^l h) = \omega^{(j-k)l}\ \Gamma_k(t^l h) \ . \qquad (5.1.1')$$

Demonstração:

Neste caso temos que $\gamma(ghg^{-1}) = U(g)\gamma(h)U(g^{-1})$, $\forall\ g \in \mathbb{G}$ com $U(g)$ a matriz unitária representando g. Se $(g_1, g_2) \in \mathbb{G}$ forem tais que $g_1 g_2 = g_3$, pela definição de $U(g)$ teremos:

$$U(g_1)\ U(g_2)\ \gamma(h)\ U(g_2^{-1})U(g_1^{-1}) = U(g_1)\ \gamma(g_2hg_2^{-1})\ U(g_1^{-1}) =$$

$$= \gamma(g_1g_2h(g_1g_2)^{-1}) = \gamma(g_3hg_3^{-1}) = U(g_3)\ \gamma(h)\ U(g_3^{-1})\ .$$

Então, $U(g)$ é uma representação irreduzível e *projetiva* de $\mathbb{G}$, pois as matrizes $U(g)$ para $g \in \{\ \mathbb{G}-\mathbb{H}\ \}$ estão definidas a menos de um fator de fase, e a representação tem então a forma $U(g_1)\ U(g_2) = \omega(g_1,g_2,g_3)\ U(g_3)$, onde $\omega(g_1,g_2,g_3)$ é um fator de fase de módulo igual a 1 chamado *fator de estrutura* da representação projetiva.

Notemos que um elemento geral g de $\mathbb{G}$, tem a forma $g = t^l h$, $0 \le l < p$ e $h \in \mathbb{H}$ e é representado por $g \to U(t)^l\gamma(h)$. Portanto, o fator de fase de $U(t^l)$ pode ser expresso em termos do fator de fase $e^{i\phi}$ de $U(t)$. Suponhamos que $V(t)$ é a representação correta de t, portanto $U(t) = V(t)e^{i\phi}$ com ϕ real. Como $t^p = h_o$, segue que $U(t)^p = e^{ip\phi}\gamma(h_o)$, o que determina o fator $e^{i\phi}$ a menos de uma potência m de ω, com $\omega^p = 1$ e m inteiro. Além disso, desde que $\mathbb{G}/\mathbb{H} \sim \mathbb{C}_p$, $\mathbb{G}$ tem ao menos p irreps unidimensionais dadas por $\lambda_k(t^l h) = \eta_k(t^l\mathbb{H}) = \omega^{kl}$, com $1 \le k \le p$ e onde $\eta_k(t^l\mathbb{H})$ são as irreps de $\mathbb{G}/\mathbb{H}$. Então, uma particular escolha do expoente m apenas produzirá um rearranjo das irreps Γ_k de $\mathbb{G}$, as quais são da forma $\Gamma_k(t^l h) = U(t^l h)\omega^{kl}$, cqd.

Este resultado nos encoraja a procurar um procedimento para obter as representações de um grupo $\mathbb{G}$ na forma irreduzível, quando o estabilizador das irreps de seu subgrupo normal é o próprio grupo $\mathbb{G}$.

Usando os resultados anteriores, encontraremos as relações para os traços das irreps Γ_k dentro de uma dada classe lateral $t^l\mathbb{H}$, para $0 < l \le p$ e $\Gamma_k(h) = \gamma(h)$:

$$\sum_{h\in\mathbb{H}} |\chi^{\Gamma_k}(t^l h)|^2 = \sum_{h\in\mathbb{H}} \sum_{\substack{\alpha,\beta\\ \tau,\mu}} \Gamma_k(t^l)_{\alpha\beta}\Gamma_k(h)_{\beta\alpha}\ \Gamma_k(h^{-1})_{\tau\mu}\Gamma_k(t^{-l})_{\mu\tau}$$

$$= \sum_{\substack{\alpha,\beta\\ \tau,\mu}} \Gamma_k(t^l)_{\alpha\beta}\Gamma_k(t^{-l})_{\mu\tau} \sum_{h\in\mathbb{H}} \Gamma_k(h)_{\beta\alpha}\Gamma_k(h^{-1})_{\tau\mu}$$

$$= (|\mathbb{H}|/|\Gamma_k|) \sum_{\substack{\alpha,\beta\\ \tau,\mu}} \Gamma_k(t^l)_{\alpha\beta}\Gamma_k(t^{-l})_{\mu\tau}\ \delta_{\alpha\tau}\delta_{\beta\mu}$$

e portanto,

$$\sum_{h\in\mathbb{H}} |\chi^{\Gamma_k}(t^l h)|^2 = |\mathbb{H}| \quad \text{se} \quad \mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma) = \mathbb{G}\ . \qquad (5.1.2)$$

Desta equação vemos que há ao menos um traço diferente de zero em cada classe lateral $t^l\mathbb{H}$. Por outro lado, se $A_1 \in$ irrep $(\mathbb{H})$ não estiver contido na restrição de uma irrep Γ_k de $\mathbb{G}$ sobre $\mathbb{H}$, a seguinte relação de ortogonalidade entre os traços tem que valer,

$$\sum_{h\in\mathbb{H}} \chi^{\Gamma_k}(t^l h) = 0\ . \qquad (5.1.3)$$

A eq. (5.1.3) mostra que se houver duas ou mais classes de conjugação de $\mathbb{G}$ dentro da classe lateral $t^l\mathbb{H}$, ao menos dois traços $\chi^{\Gamma}(t^l h)$ terão que ser diferentes de zero. Se $\Gamma_{\mathbb{H}} \neq A_1$, e se a classe lateral $t^l\mathbb{H}$ contiver apenas uma classe de conjugação completa de $\mathbb{G}$, a igualdade $\chi^{\Gamma}(t^l h) = 0$ terá que valer, em contradição com a eq. (5.1.2). A compatibilidade entre esses dois resultados, implica que se $\langle t^l\mathbb{H}\rangle = \mathscr{C}(t^l)$, então não haverá irreps Γ_k de $\mathbb{G}$ tais que $\Gamma_k(h) = \gamma(h) \neq A_1(h)$. Isto pode ser mostrado usando o seguinte processo.

Primeiro vamos provar que o transversal t pode sempre ser escolhido tal que sua ordem, $o(t)$, seja p^{α}, α um inteiro positivo. Suponhamos que $v\mathbb{H}$ é o gerador de $\mathbb{G}/\mathbb{H}$. Então temos que $v^{p} = h_{o}$, $h_{o} \in \mathbb{H}$. A ordem de h_{o} sempre pode ser escrita como $o(h_{o}) = kp^{\alpha-1}$ com $(k,p) = 1$, e desde que $(v\mathbb{H})^{k} \to (v\mathbb{H})$ é um automorfismo de $\mathbb{G}/\mathbb{H}$, podemos sempre escrever $t = v^{k}$ e então $o(t) = p^{\alpha}$, cqd.

Agora mostraremos que as classes laterais $t^{k}\mathbb{H}$ contém elementos em classes de conjugação completas $\mathscr{C}(t)$ de $\mathbb{G}$, e que, ou todas elas contém apenas uma classe de conjugação, ou todas elas contém duas ou mais classes de conjugação de $\mathbb{G}$.

Para provar isto, é conveniente escrever um elemento genérico de $\mathbb{G}$ como $t^{k}h$, $h \in \mathbb{H}$. Desde que $\mathbb{H}$ é normal em $\mathbb{G}$, temos

$$(t^{k}h_{j})(t^{l}h)(t^{k}h_{j})^{-1} = t^{l}(t^{k-l}h_{j}t^{l-k})(t^{k}hh_{j}^{-1}t^{-k})$$

$$= t^{l}h', \quad 0 < l < p \quad e \quad h' \in \mathbb{H}.$$

Suponhamos agora que $t^{l}\mathbb{H}$ contém apenas uma classe de conjugação $\mathscr{C}(t^{l})$ de $\mathbb{G}$. Então, $|\mathscr{C}(t^{l})| = |\mathbb{H}| = |\mathbb{G}|/|\mathbb{C}_{\mathbb{G}}(t^{l})|$, onde $\mathbb{C}_{\mathbb{G}}(t^{l})$ é o *centralizador* de t^{l} em $\mathbb{G}$, isto é, o conjunto de todos os elementos de $\mathbb{G}$ que comutam com t^{l}. Portanto, $\mathbb{C}_{\mathbb{G}}(t^{l}) = \langle\, t \mid t^{p} = 1 \,\rangle$ e como p é primo, com $(l,p) = 1$, segue que $\mathbb{C}_{\mathbb{G}}(t^{l}) = \mathbb{C}_{\mathbb{G}}(t^{k})$, $\forall\ 0 < k,l < p$, cqd. Então, a eq. (5.1.3) mostra que se $\{t^{l}\mathbb{H}\} = \mathscr{C}(t^{l})$, e se $A_{1} \in \mathrm{Irrep}(\mathbb{H})$ não estiver contida em $\Gamma \in \mathrm{Irrep}(\mathbb{G})$, $\chi^{\Gamma}(t^{l}h) = 0$ terá que valer $\forall\ 0 < l < p$, $h \in \mathbb{H}$.

Estamos agora prontos para descrever o processo de cálculo dos traços das irreps Γ do grupo finito $\mathbb{G}$ como função dos traços e das irreps γ de seu subgrupo normal $\mathbb{H}$, se $\mathbb{G}/\mathbb{H} \sim \mathbb{C}_{p}$

e $\mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma) = \mathbb{G}$. Seja então Γ uma irrep do grupo $\mathbb{G}$ tal que sua restrição ao subgrupo invariante $\mathbb{H}$ de $\mathbb{G}$ é uma irrep γ de $\mathbb{H}$. Neste caso, utilizando as relações de ortogonalidade para os elementos de matriz $\gamma(h)_{\alpha\beta}$, podemos estabelecer a igualdade:

$$\Gamma(g_i)_{\alpha\tau}\Gamma(g_j^{-1})_{\sigma\beta} = (|\Gamma|/|\mathbb{H}|)\sum_{h\in\mathbb{H}}\Gamma(g_i h)_{\alpha\beta}\Gamma(g_j^{-1}h^{-1})_{\sigma\tau} \quad , \qquad (5.1.4)$$

onde g_i, $g_j \in \mathbb{G}$. Tomando $\sigma = \beta$ e somando sobre β, a eq. (5.1.4) se transforma em

$$\Gamma(g_i)_{\alpha\tau}\chi^{\Gamma}(g_j)^{*} = (|\Gamma|/|\mathbb{H}|)\sum_{h\in\mathbb{H}}\Gamma(g_i h g_j^{-1}h^{-1})_{\alpha\tau} \quad . \qquad (5.1.5)$$

No caso em que g_i e g_j pertencem à mesma classe lateral $t^k\mathbb{H}$ de $\mathbb{H}$ em $\mathbb{G}$, o argumento de Γ no somatório da eq. (5.1.5) pertence a $\mathbb{H}$. Fazendo $\tau = \alpha$, somando sobre α e chamando $\mathscr{C}_i, \mathscr{C}_j$ às classes de conjugação que contêm g_i e g_j respectivamente, obtemos:

$$\chi^{\Gamma}(\mathscr{C}_i)\ \chi^{\Gamma}(\mathscr{C}_j)^{*} = (|\Gamma|/|\mathbb{H}|)\sum_{h\in\mathbb{H}}\chi^{\gamma}(g_i h g_j^{-1}h^{-1}) \quad , \qquad (5.1.6)$$

com $\mathscr{C}_i$, $\mathscr{C}_j \subset t^k\mathbb{H}$.

É possível simplificar a eq. (5.1.6) observando que um elemento genérico de $\mathbb{G}$ pode sempre ser escrito como $g_j^l h$, já que se tomarmos $g_j = t^k h_j$, kl mod p tomará sempre todos os valores entre 0 e p-1 para qualquer valor de $k \neq 0$ mod p e l variando entre 0 e p-1. Então, o conjunto

$$\{\ (g_j^l h)^{-1} g_j\ g_j^l h \ \mid\ 0 \leq l < p\ ,\ h \in \mathbb{H}\ \}$$

é igual a $|\mathbb{C}_{\mathbb{G}}(g_j)|$ cópias da classe de conjugação $\mathscr{C}_j$ e também a p cópias do conjunto $\{h^{-1}g_jh \mid h \in \mathbb{H}\}$. Portanto, neste último conjunto temos $|\mathbb{C}_{\mathbb{G}}(g_j)|/p$ cópias da classe de conjugação $\mathscr{C}_j$ e a eq. (5.1.6) pode ser reescrita como:

$$\chi^{\Gamma}(\mathscr{C}_i)\ \chi^{\Gamma}(\mathscr{C}_j)^{*} = (|\Gamma|/|\mathscr{C}_j|)\sum_{g_k\in\mathscr{C}_j}\chi^{\gamma}(g_ig_k^{-1}) \ , \qquad (5.1.7)$$

onde as classes de conjugação $\mathscr{C}_i$ e $\mathscr{C}_j$ estão contidas na classe lateral $t\mathbb{H}$.

Como mostramos, sempre há uma classe de conjugação $\mathscr{C}_{\alpha} \subset \{t\mathbb{H}\}$ tal que $\chi^{\Gamma}(\mathscr{C}_{\alpha}) \neq 0$. Isto nos permite definir

$$\xi^{\Gamma}(\mathscr{C}_i) = (\chi^{\Gamma}(1)/(|\mathscr{C}_{\alpha}|\,|\chi^{\Gamma}(\mathscr{C}_{\alpha})|))\sum_{g_k\in\mathscr{C}_{\alpha}}\chi^{\gamma}(g_ig_k^{-1}) \ . \qquad (5.1.8)$$

Substituindo (5.1.7) em (5.1.8) obtemos:

$$\xi^{\Gamma}(\mathscr{C}_i) = \chi^{\Gamma}(\mathscr{C}_i)\ \chi^{\Gamma}(\mathscr{C}_{\alpha})^{*}/|\chi^{\Gamma}(\mathscr{C}_{\alpha})| = \chi^{\Gamma}(\mathscr{C}_i)\ e^{-i\phi} \ , \qquad (5.1.9)$$

que evidencia o fato de que através da eq. (5.1.8) podemos calcular os traços $\chi^{\Gamma}(\mathscr{C}_i)$ das classes de conjugação na classe lateral $t\mathbb{H}$ a menos de um fator de fase $e^{i\phi}$ comum a todos eles.

A fim de encontrar $\xi^{\Gamma}(\mathscr{C}_m)$ para as classes de conjugação de $\mathbb{G}$ contidas nas classes laterais $t^k\mathbb{H}$ $(1 < k < p)$ construiremos uma segunda relação tomando $\beta = \alpha$, $\tau = \sigma$ em (5.1.4), e somando sobre α e σ

$$\chi^{\Gamma}(\mathscr{C}_m) = (|\Gamma|/|\mathbb{H}|)\sum_{g\in t\mathbb{H}}\chi^{\Gamma}(g_mg^{-1})\chi^{\Gamma}(g) \ , \qquad (5.1.10)$$

onde $g_m \in \mathscr{C}_m$.

Aplicando esta relação recorrentemente para as classes de conjugação $\mathscr{E}_m$ contidas nas classes laterais $t\mathbb{H}$, $t^2\mathbb{H}$, etc, e usando (5.1.9), obtemos

$$\xi^\Gamma(\mathscr{E}_m) = \chi^\Gamma(\mathscr{E}_m)\, e^{-il\phi} \qquad (5.1.11)$$

onde $\mathscr{E}_m \subset t^l\mathbb{H}$. Substituindo esta relação na eq. (5.1.10) temos uma segunda fórmula que nos fornece os $\xi^\Gamma(\mathscr{E}_m)$ para as classes de conjugação de $\mathbb{G}$ contidas nas classes laterais $t^l\mathbb{H}$ com $1 < l < p$, que têm a forma:

$$\xi^\Gamma(\mathscr{E}_m) = (|\Gamma|/|\mathbb{H}|) \sum_{g\in t\mathbb{H}} \xi^\Gamma(g_m g^{-1})\ \xi^\Gamma(g) \ . \qquad (5.1.12)$$

Conhecidos os valores de $\xi^\Gamma(\mathscr{E}_m)$ para toda classe de conjugação de $\mathbb{G}$ no conjunto $(\mathbb{G} - \mathbb{H})$, o fator de fase $e^{i\phi}$ pode ser calculado na seguinte forma: a classe de conjugação $\mathscr{E}_\alpha^{-1}$ deve necessariamente estar contida na classe lateral $t^{p-1}\mathbb{H}$. Portanto, das eq. (5.1.11) e (5.1.9) obtemos:

$$\xi^\Gamma(\mathscr{E}_\alpha^{-1}) = \chi^\Gamma(\mathscr{E}_\alpha^{-1}) e^{-i(p-1)\phi} = \chi^\Gamma(\mathscr{E}_\alpha)^*\ e^{i\phi} e^{-ip\phi} = \xi^\Gamma(\mathscr{E}_\alpha)^* e^{-ip\phi},$$

donde

$$e^{ip\phi} = \xi^\Gamma(\mathscr{E}_\alpha^{-1})^*/\xi^\Gamma(\mathscr{E}_\alpha) \ . \qquad (5.1.13)$$

Esta equação determina $e^{i\phi}$ a menos de um fator ω^m ($\omega^p = 1$). Note-se que a escolha de um valor particular de m apenas intercambiará as irreps Γ_k e, assim, podemos calcular os traços de qualquer irrep Γ_k a partir das relações (5.1.5) a (5.1.9).

Tomando $g_i = \mathbf{1}$, $g_j = t$, $\sigma = \tau$ e somando sobre σ em (5.1.4), obtemos a relação,

$$\Gamma(t) = (|\Gamma|/|\mathbb{H}|) \sum_h \chi^\Gamma(th^{-1})\ \gamma(h) \ . \qquad (5.1.14)$$

Usando a eq.(5.1.14) calcularemos $\Gamma_k(t)$ a partir de χ^{Γ_k}, para toda irrep γ de $\mathbb{H}$, com $\mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma) = \mathbb{G}$.

Como o método de indução permite construir irreps $\gamma\uparrow\mathbb{G}$ de ordem $p|\gamma|$, as irreps unidimensionais de $\mathbb{G}$ poderiam, em princípio, serem calculadas usando nosso método, a partir de irreps unidimensionais γ de $\mathbb{H}$ com estabilizador $S_{\mathbb{G}}(\gamma) = \mathbb{G}$. No entanto, nosso método é mais trabalhoso que o uso do mapeamento canônico $\alpha : \mathbb{G} \longrightarrow \mathbb{G}/\mathbb{G}'$, onde $\mathbb{G}'$ é o subgrupo derivado de $\mathbb{G}$. Como $\mathbb{G}/\mathbb{G}'$ é abeliano, se chamarmos $\lambda_k(g\mathbb{G}')$ às suas irreps, as irreps unidimensionais Γ_k de $\mathbb{G}$ serão dadas pela igualdade $\Gamma_k(g) = \lambda_k(g\mathbb{G}')$ para $\lambda_k \in \mathrm{Irrep}(\mathbb{G}/\mathbb{G}')$. Como as irreps

$\mathbb{G}$	χ^{Γ_α}	$\chi^{\Gamma_{k,\beta}}$
$\mathbb{H}$	$\sum_{j=1}^{p} \chi^{\gamma_\alpha}(t^{-j}\ h\ t^{j})$	$\chi^{\gamma_\beta}(h)$
...	0	...
$t^l\mathbb{H}$	0	$\omega^{kl}\ \chi^{\Gamma_{k',\beta}}(t^l h)$
...	0	...
ESTABILIZADORES	$\mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma_\alpha) = \mathbb{H}$	$\mathbb{S}_{\mathbb{G}}(\gamma_\beta) = \mathbb{G}$
IRREPS	$\Gamma_\alpha(t)_{m,m+1} = \gamma_\alpha(1)$, $0<m<p$ $\Gamma_\alpha(t)_{p,1} = \gamma_\alpha(t^p)$	$\Gamma_{k,\beta}(t) = \frac{\lvert\gamma_\beta\rvert}{\lvert\mathbb{H}\rvert} \sum_{h\in\mathbb{H}} \chi^{\Gamma_{k,\beta}}(th^{-1})\gamma_\beta(h)$

TABELA 5.1 - Tabela de traços e irreps de $\mathbb{G}$. α e β rotulam as irreps de $\mathbb{H}$ de ordem maior que um, k' é um valor fixo de k e p é um número primo tal que $\omega^p = 1$.

unidimensionais de $\mathbb{G}$ resultam da aplicação de nosso método a irreps de $\mathbb{H}$ com estabilizador igual a $\mathbb{G}$ e dimensão 1, é necessário aplicar o método apenas a partir de irreps γ tais que $S_{\mathbb{G}}(\gamma) = \mathbb{G}$ e $|\gamma| > 1$. Na tabela 5.1 mostramos os traços e as irreps de ordem maior que 1 calculadas pelo método de indução e por nosso método, e os correspondentes estabilizadores.

5.2- As Irreps do Grupo Octaédrico

Nesta seção desenvolveremos como exemplo o grupo $\mathbb{O}$, construiremos suas irreps e as compararemos com as obtidas pelo método tradicional de indução usando as irreps dos subgrupos normais. Este grupo é interessante por três razões:

i) Ele é um dos grupos mais conhecidos entre os espectroscopistas e como tem apenas 24 elementos, sua estrutura de subgrupos é simples.

ii) Uma vez que o estabilizador das irreps B_i $(i = 1, 2, 3)$ de $\mathbb{D}_2$ em $\mathbb{O}$ é $S_{\mathbb{O}}(B_i) = \mathbb{D}_4$, para obter as irreps de $\mathbb{O}$ é necessário procurar as *representações permitidas*(*) de $\mathbb{D}_4$. Então, este é um exemplo típico da aplicação do método de indução onde o estabilizador é tal que $\mathbb{H} \subsetneq S_{\mathbb{G}} \subsetneq \mathbb{G}$.

iii) O grupo $\mathbb{O}$ é um grupo monomial[62], isto é, todas as representações podem ser induzidas de irreps unidimensionais dos seus subgrupos, o que torna fácil o cálculo das irreps de $\mathbb{O}$

(*) Uma representação permitida do estabilizador $S_{\mathbb{G}}(\gamma)$ associada a uma irrep γ de um subgrupo normal $\mathbb{H}$ de $\mathbb{G}$, é qualquer irrep de $S_{\mathbb{G}}(\gamma)$ que subduz um múltiplo de γ.

usando métodos alternativos.

5.2.1- O MÉTODO DE INDUÇÃO.

Primeiro tentaremos obter todas as irreps de $\mathbb{O}$ pelo método tradicional de indução. A tabela 5.2 mostra os traços do grupo $\mathbb{D}_2$ e os estabilizadores de suas irreps. Usando esta tabela, calculamos os traços da representação induzida $A_1\uparrow \mathbb{O}$:

$$\chi^{A_1\uparrow\mathbb{O}}(1) = \chi^{A_1\uparrow\mathbb{O}}(3C_2) = 6 \ , \quad \chi^{A_1\uparrow\mathbb{O}}(g) = 0 \quad \forall\, g \in (\mathbb{O} - \mathbb{D}_2) \ .$$

Dos traços de $\mathbb{O}$, pode-se deduzir que $A_1\uparrow \mathbb{O} = A_1\oplus A_2\oplus 2E$. <u>Devemos notar que isto ilustra o caso em que o processo de indução falha, isto é para aquelas irreps de $\mathbb{G}$ induzidas de representações permitidas do estabilizador, que é o próprio</u> $\mathbb{G}$. Para calcular T_1 e T_2 a partir de B_1 de $\mathbb{D}_2$ precisamos saber as

$\mathbb{D}_2$	1	C_2^z	C_2^y	C_2^x	$\mathbb{S}_{\mathbb{O}}(\gamma)$	$\mathbb{S}_{\mathbb{T}}(\gamma)$
A_1	1	1	1	1	$\mathbb{O}$	$\mathbb{T}$
B_1	1	1	-1	-1	$\mathbb{D}_4\langle C_4^z, C_2^y\rangle$	$\mathbb{D}_2$
B_2	1	-1	1	-1	$\mathbb{D}_4\langle C_4^y, C_2^z\rangle$	$\mathbb{D}_2$
B_3	1	-1	-1	1	$\mathbb{D}_4\langle C_4^x, C_2^y\rangle$	$\mathbb{D}_2$

TABELA 5.2 - Traços e estabilizadores das irreps do $\mathbb{D}_2$

as irreps permitidas Γ_i de $\mathbb{D}_4$ que subduzem B_1, i.e. $\Gamma_i\downarrow \mathbb{D}_2 = B_1$. Da tabela de traços de $\mathbb{D}_4$ (veja tab. 5.3) é fácil ver que as representações permitidas são A_2 e B_2, e elas dão as representações induzidas T_1 e T_2 de $\mathbb{O}$ na forma irredutível.

$\mathbb{D}_4$	$\mathbb{D}_2$: 1	C_2^z	C_2^x, C_2^y	$\alpha\,\mathbb{D}_2$: $2C_2'$	$2C_4$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1	1
B_1	1	1	1	-1	-1
B_2	1	1	-1	1	-1
E	2	-2	0	0	0

TABELA 5.3 - Traços das irreps de $\mathbb{D}_4$
$(\alpha = C_2^{x(-y)})$

Agora, usando que

$$\mathbb{O} = \mathbb{D}_4 \oplus \beta\,\mathbb{D}_4 \oplus \beta^2\,\mathbb{D}_4 \ , \quad \mathbb{D}_4 = \mathbb{D}_2 \oplus \alpha\,\mathbb{D}_2 \ ,$$

onde $\alpha = C_2^{x(-y)}$, $\beta = C_3^{xyz}$ com $\beta\alpha\beta = \alpha$, obtemos para T_1 de $\mathbb{O}$,

$$T_1(\alpha) = -\begin{Bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Bmatrix} \qquad T_1(\beta) = \begin{Bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{Bmatrix} ,$$

$$T_1(h) = \begin{Bmatrix} B_2(h) & 0 & 0 \\ 0 & B_3(h) & 0 \\ 0 & 0 & B_1(h) \end{Bmatrix} , \ B_i(h) \in \mathrm{irreps}(\mathbb{D}_2) \ .$$

Finalmente, se A_2 for a irrep unidimensional de $\mathbb{O}$ com núcleo $\mathbb{T}$, terá que valer $T_2 = A_2 T_1$. Então,

$$T_2(\alpha) = -T_1(\alpha) \ , \ T_2(\beta) = T_1(\beta) \ , \ T_2(h) = T_1(h) \quad \forall\ h \in \mathbb{D}_2 \ .$$

5.2.2- NOSSO MÉTODO.

Para calcular a tabela de traços e as irreps de $\mathbb{O}$ pelo nosso método, primeiro fazemos cálculos sobre o grupo $\mathbb{T}$, começando com as irreps de $\mathbb{D}_2$ e depois obtemos as irreps e traços de $\mathbb{O}$ a partir dos de $\mathbb{T}$. Desde que o grupo tetraédrico é $\mathbb{T} = \mathbb{D}_2 \oplus \beta\, \mathbb{D}_2 \oplus \beta^2\, \mathbb{D}_2$, onde $\beta\, \mathbb{D}_2 = \mathscr{C}(\beta)$, a tabela de traços para $\mathbb{T}$ pode ser calculada na seguinte forma: as irreps unidimensionais de $\mathbb{T}$ são determinadas do mapeamento canônico $\mathbb{T} \to \mathbb{T}/\mathbb{D}_2 \sim \mathbb{C}_3$, resultando

$$\chi^{\Gamma_k}(1) = \chi^{\Gamma_k}(3C_2) = 1 \quad , \quad \chi^{\Gamma_k}(4C_3) = \omega^k \quad , \quad \chi^{\Gamma_k}(4C_3^2) = \omega^{2k} \quad ,$$

com $\Gamma_0 \equiv A_1$, $\Gamma_1 \equiv E_1$, $\Gamma_2 \equiv E_2$ e $\omega^3 = 1$. Desde que as irreps B_i de $\mathbb{D}_2$ são representações conjugadas, a outra irrep de $\mathbb{T}$ é tridimensional, e seus traços podem ser calculados usando o método de indução:

$$\chi^{T}(h) = \sum_{i=1}^{3} \chi^{B_i}(h) \quad , \quad \chi^{T}(g) = 0 \quad \forall\, g \in (\mathbb{T} - \mathbb{D}_2) \; .$$

$\mathbb{T}$	$\mathbb{D}_2$ 1	$3C_2^z$	$\beta\mathbb{D}_2$ $4C_3$	$\beta^2\mathbb{D}_2$ $4C_3^2$	$\mathcal{S}_{\mathbb{O}}(\gamma)$
A_1	1	1	1	1	$\mathbb{O}$
E_1	1	1	ω	ω^2	$\mathbb{T}$
E_2	1	1	ω^2	ω	$\mathbb{T}$
T	3	-1	0	0	$\mathbb{O}$

TABELA 5.4 - Traços e estabilizadores das irreps de $\mathbb{T}$. ($\beta = C_3^{xyz}$, $\omega = \exp(2\pi i/3)$)

O resultado é dado na tabela 5.4, que também mostra os estabilizadores das irreps de $\mathbb{T}$ em $\mathbb{O}$. A representação T de $\mathbb{T}$ é

$$T(\beta) = \begin{Bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{Bmatrix}, \quad T(h) = \begin{Bmatrix} B_2(h) & 0 & 0 \\ 0 & B_3(h) & 0 \\ 0 & 0 & B_1(h) \end{Bmatrix} ,$$

onde $B_i(h) \in \mathrm{irreps}(\mathbb{D}_2)$.

As irreps unidimensionais do grupo $\mathbb{O}$ são determinadas do mapeamento canônico $\mathbb{O} \to \mathbb{O}/\mathbb{T} \sim \mathbb{C}_2$, de modo que

$$\chi^{A_2}(1) = \chi^{A_2}(3C_2) = \chi^{A_2}(8C_3) = 1 \ , \ \chi^{A_2}(6C_2') = \chi^{A_2}(6C_4) = -1 \ .$$

Agora, usando a eq. (5.1.1), segue imediatamente que

$$E(\alpha) = \begin{Bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{Bmatrix} \ , \quad E(h) = \begin{Bmatrix} E_2(h) & 0 \\ 0 & E_1(h) \end{Bmatrix} ,$$

onde $E_i(h) \in \mathrm{irrep}(\mathbb{T})$.

Finalmente, para calcular T_1 e T_2 usamos a eq. (5.1.8) e as tabelas de multiplicação dos grupos $\mathbb{T}$ e $\mathbb{O}$. Então

$$\xi^{\Gamma}(6C_2') = [\chi^{T}(1) + \chi^{T}(3C_2)]/2 = 1 \ ,$$

$$\xi^{\Gamma}(6C_4) = \chi^{T}(3C_2) = -1 \ ,$$

onde $\Gamma = T_1, T_2$ e $C_\alpha = 6C_2'$. Substituindo esses valores na eq. (5.1.13) obtemos que $e^{i\phi} = \pm 1$. De acordo com a nomenclatura de Mülliken[63], temos:

$$\chi^{T_1}(6C_2') = -1 \ , \ \chi^{T_1}(6C_4) = 1 \ , \ \chi^{T_2}(6C_2') = 1 \ , \ \chi^{T_2}(6C_4) = -1 .$$

$\mathbb{O}$	$\mathbb{T}$ 1	$3C_2$	$8C_3$	$\alpha\mathbb{T}$ $6C'_2$	$6C_4$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
E	2	2	-1	0	0
T_1	3	-1	0	-1	1
T_2	3	-1	0	1	-1

TABELA 5.5 - Traços das irreps de $\mathbb{O}$
$(\alpha = C_2^{x(-y)})$

Se colocarmos a expressão de $T \in \text{irrep}(\mathbb{T})$ obtida de $\mathbb{D}_2$ na eq. (5.1.12), teremos o seguinte resultado para o elemento α, que está de acordo com o obtido pelo método de indução,

$$T_1(\alpha) = - \begin{Bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Bmatrix} \quad \text{e} \quad T_2 = A_2 T_1 \ .$$

5.3- Irreps e Traços : Uma Simplificação ao Método de Bradley e Craknell

Bradley e Cracknell[64] propuseram um método para calcular as irreps de um grupo $\mathbb{G}$ a partir das irreps de seu subgrupo $\mathbb{H}$ quando $\mathbb{G}/\mathbb{H} \sim \mathbb{C}_p$, com p sendo um número primo.

O método consiste em calcular uma quantidade $\mathbb{Q}(\mathbb{X})$ através da seguinte relação:

$$\mathbb{Q}(\mathbb{X}) = (1/|\mathbb{H}|) \sum_{h \in \mathbb{H}} \gamma(tht^{-1}) \, \mathbb{X} \, \gamma(h^{-1}) \ , \qquad (5.3.1)$$

onde $\mathbb{X}$ é uma matriz escolhida convenientemente, tal que $\mathbb{Q}(\mathbb{X})$ é unitária.

Uma vez que a quantidade

$$\Gamma(t^{-1})\mathbb{Q}(\mathbb{X}) = (1/|\mathbb{H}|)\sum_{h\in\mathbb{H}} \gamma(h)\ \Gamma(t^{-1})\ \mathbb{X}\ \gamma(h^{-1}) \qquad (5.3.2)$$

comuta com $\gamma(h)$, do Lema de Schur segue que $\Gamma(t^{-1})\mathbb{Q}(\mathbb{X}) = \lambda\ I$, e portanto,

$$\mathbb{Q}(\mathbb{X}) = \lambda\ \Gamma(t)\ . \qquad (5.3.3)$$

Vejamos como é possível simplificar a equação (5.3.1). Tomando $\mathbb{X} = \gamma(h_\alpha^{-1})$, a eq. (5.1.2) fica

$$\Gamma(t^{-1}) = (1/|\mathbb{H}|)\sum_{h\in\mathbb{H}} \Gamma(ht^{-1}h_\alpha^{-1}h^{-1}) = \lambda\ I\ . \qquad (5.3.4)$$

Tomando os traços do segundo e terceiro membro da eq. (5.3.4) obtemos $\chi^\Gamma(th_\alpha)^* = \lambda\chi^\Gamma(1)$, onde o valor de h_α deve ser fixado de modo que $\chi^\Gamma(th_\alpha) \neq 0$. Usando este resultado nas eqs. (5.3.3) e (5.3.1) temos:

$$\Gamma(t) = (\chi^\Gamma(1)/|\mathbb{H}|\chi^\Gamma(th_\alpha)^*)\sum_{h\in\mathbb{H}} \gamma(tht^{-1}h_\alpha^{-1}h^{-1})\ . \qquad (5.3.5)$$

Agora, trocando h por $h'h^{-1}$ em (5.3.5), e substituindo, no resultado, h' por h, obtemos finalmente:

$$\Gamma(t) = (\chi^\Gamma(1)/|\mathbb{H}|\chi^\Gamma(th_\alpha)^*)\sum_{h\in\mathbb{H}} \gamma(th(th_\alpha)^{-1}h^{-1})\ . \qquad (5.3.6)$$

Observe-se que a equação (5.3.6) pode ser derivada diretamente da nossa eq. (5.1.5) tomando $g_i = t$ e $g_j = th_\alpha$.

É possível modificar a eq. (5.3.6) de forma a evitar o cálculo do traço $\chi^{\Gamma}(th_{\alpha})$. A partir da eq. (5.1.6) podemos calcular $|\chi^{\Gamma}(th_{\alpha})|$ em função de $\chi^{\gamma}(h)$, o que nos permite definir:

$$\Delta(t) = (\chi^{\Gamma}(1)/(|\mathbb{H}||\chi^{\Gamma}(th_{\alpha})|)) \sum_{h\in\mathbb{H}} \gamma(tht^{-1}h_{\alpha}^{-1}h^{-1}) , \qquad (5.3.7)$$

de modo que

$$\Delta(t) = \chi^{\Gamma}(th_{\alpha})\Gamma(t)/|\chi^{\Gamma}(th_{\alpha})| = e^{i\phi}\,\Gamma(t) . \qquad (5.3.8)$$

Mas $\Delta(t)^{p} = e^{ip\phi}\,\Gamma(t)^{p} = e^{ip\phi}\,\gamma(h_{0})$ nos dá $e^{i\phi}$ a menos de um fator de fase ω^{m} $(\omega^{p} = 1)$, e, portanto, obteremos $\Gamma(t)$.

Como todo grupo solúvel tem uma série de composição cujos fatores são grupos cíclicos de ordem prima, o método de indução junto com o método de Bradley e Cracknell e nossa simplificação, permitem calcular as irreps de dimensão maior que um, de qualquer grupo solúvel em uma forma recorrente começando com o grupo unidade. As irreps de dimensão igual a um podem ser calculadas através do mapeamento canônico $\mathbb{G} \to \mathbb{G}/\mathbb{G}'$, onde $\mathbb{G}'$ é o grupo derivado de $\mathbb{G}$, e $\mathbb{G}/\mathbb{G}'$ é abeliano.

Em princípio, as eqs. (5.3.7) e (5.3.8) permitem calcular com simplicidade e elegância $\Gamma(t)$, mas para obter os traços das irreps de $\mathbb{G}$ é necessário calcular $\Gamma(t)^{k}\gamma(h)$ para todos os geradores das classes de conjugação de $\mathbb{G}$ contidas em $(\mathbb{G} - \mathbb{H})$. Na prática, se estivermos interessados somente na tabela de traços de $\mathbb{G}$ e nas irreps dos geradores de $\mathbb{G}$, o método descrito na seção 5.1 é mais prático. Por outro lado, se desejarmos somente as representações dos geradores, o método descrito acima é mais simples.

6

ROTULADORES E IRREPS ADAPTADAS EM SIMETRIA A SEQÜÊNCIAS CANÔNICAS

No capítulo anterior construímos um método que permite calcular a tabela de traços de grupos finitos solúveis e de alguns outros grupos finitos. Neste capítulo desenvolveremos um método para calcular as irreps orientadas segundo uma seqüência canônica, conhecendo somente a tabela de traços dos grupos na seqüência. Trabalhos recentes nesta área podem ser encontrados nas referências [65] e [66].

6.1- Rotuladores

Dado um grupo $\mathbb{G}$ com pelo menos uma série canônica $\mathbb{G} = \mathbb{G}_0 \supset \mathbb{G}_1 \supset \mathbb{G}_2 \supset \cdots \supset \mathbb{G}_i \supset \cdots$, terminando em um grupo abeliano, construiremos um operador Λ com a finalidade de adaptar em simetria a base do espaço vetorial e tal que todos seus autovalores evidenciem a descendência em simetria das irreps dos subgrupos na seqüência[67].

A chave para a construção deste operador consiste essencialmente em adotar a notação de Bethe para as irreps, de modo que os autovalores do operador sejam números inteiros dados numa forma conveniente para rotular as irreps de cada grupo na seqüência. Para construir Λ, necessitaremos apenas da tabela de traços dos grupos envolvidos na seqüência e veremos que a diagonalização de uma particular combinação linear da representação regular à direita e da representação regular à esquerda do operador Λ nos dará as irreps adaptadas em simetria à seqüência canônica.

O operador Λ será construído como uma combinação linear dos idempotentes principais na álgebra dos subgrupos $\mathbb{G}_i$ (*).

Seja Γ uma irrep do grupo $\mathbb{G}_k$ com classes de conjugação $\mathscr{C}_i$. Sendo $|\Gamma|$ a dimensão de Γ, definimos um operador que é a expressão dos idempotentes da álgebra de $\mathbb{G}_k$:

$$P^{\Gamma}(\mathbb{G}_k) = (|\Gamma|/|\mathbb{G}_k|) \sum_{g\in\mathbb{G}} \chi^{\Gamma}(g)^{*}\, g$$

$$= (|\Gamma|/|\mathbb{G}_k|) \sum_{i} \chi^{\Gamma}(\mathscr{C}_i)^{*}\, S(\mathscr{C}_i) \qquad (6.1.1)$$

(*) Veja apêndice A

onde

$$\chi^{\Gamma}(g) = \sum_{k=1}^{|\Gamma|} \Gamma(g)_{kk} \qquad \text{e} \qquad S(\mathscr{C}_i) = \sum_{g\in\mathscr{C}_i} g$$

são os elementos do centro da álgebra de $\mathbb{G}_k$.

Então,

$$P^{\Gamma}(\mathbb{G}_k)\; P^{\Gamma'}(\mathbb{G}_k) = \frac{|\Gamma|\,|\Gamma'|}{|\mathbb{G}_k|^2} \sum_{\substack{g_1, g_2 \\ \in\, \mathbb{G}_k}} \chi^{\Gamma}(g_1)^* \,\chi^{\Gamma'}(g_2)^* g_1 g_2$$

$$= \frac{|\Gamma|\,|\Gamma'|}{|\mathbb{G}_k|^2} \sum_{g_1, g_3} \chi^{\Gamma}(g_1)^* \,\chi^{\Gamma'}(g_1^{-1} g_3)^* \, g_3 \ ,$$

onde $g_3 = g_1 g_2$. Em função dos elementos de matriz, temos

$$P^{\Gamma}(\mathbb{G}_k) P^{\Gamma'}(\mathbb{G}_k) = \frac{|\Gamma|\,|\Gamma'|}{|\mathbb{G}_k|^2} \sum_{\substack{\alpha,\beta,\sigma \\ g_1, g_3}} \Gamma(g_1)^*_{\alpha\alpha}\ \Gamma'(g_1)_{\beta\sigma}\ \Gamma'(g_3)^*_{\sigma\beta}\ g_3$$

$$= \frac{|\Gamma|\,|\Gamma'|}{|\mathbb{G}_k|^2} \sum_{\substack{g_3 \\ \alpha,\beta,\sigma}} \Gamma'(g_3)^*_{\sigma\beta}\ g_3\ \Big[\sum_{g_1} \Gamma(g_1)_{\alpha\alpha}\ \Gamma'(g_1)^*_{\beta\sigma} \Big]^* \ ,$$

e usando a completeza dos traços das irreps,

$$P^{\Gamma}(\mathbb{G}_k)\; P^{\Gamma'}(\mathbb{G}_k) = \frac{|\Gamma|\,|\Gamma'|}{|\mathbb{G}_k|^2} \sum_{\substack{g_3 \\ \alpha,\beta,\sigma}} \Gamma'(g_3)^*_{\alpha\beta}\ g_3\ \frac{|\mathbb{G}_k|}{|\Gamma|}\ \delta_{\Gamma\Gamma'}\ \delta_{\alpha\beta}\ \delta_{\alpha\sigma}$$

$$= \delta_{\Gamma\Gamma'}\ \frac{|\Gamma'|}{|\mathbb{G}_k|} \sum_{g_3} \chi^{\Gamma'}(g_3)^*\ g_3 = \delta_{\Gamma\Gamma'}\ P^{\Gamma'}(\mathbb{G}_k) \ . \qquad (6.1.2)$$

Devemos notar que se $g^{-1} = g^{\dagger}$, $P^{\Gamma}(\mathbb{G}_k)$ é um operador auto-adjunto e, neste caso, ele é um operador projeção. Por outro lado, se os elementos de $\mathbb{G}_k$ não são operadores unitários, $P^{\Gamma}(\mathbb{G}_k)$ não é auto-adjunto, mas se $\mathbb{G}_k$ for um grupo finito, sempre será possível escolher $\Gamma(g)^{\dagger} = \Gamma(g^{-1})$ e, neste caso, as representações de P^{Γ} na base das irreps de $\mathbb{G}_k$ serão matrizes auto-adjuntas e o nosso resultado permanece válido.

Da eq. (6.1.1) temos:

$$\frac{1}{|\Gamma|}\,\chi^{\Gamma}(\mathcal{C}_j)\; P^{\Gamma}(\mathbb{G}_k) = \frac{1}{|\mathbb{G}_k|}\;\sum_i \chi^{\Gamma}(\mathcal{C}_i)^{*}\;\chi^{\Gamma}(\mathcal{C}_j)\; S(\mathcal{C}_i)\;,$$

e somando sobre Γ,

$$\sum_{\Gamma}\frac{1}{|\Gamma|}\,\chi^{\Gamma}(\mathcal{C}_j)\; P^{\Gamma}(\mathbb{G}_k) = \sum_i \left(\frac{1}{|\mathbb{G}_k|}\sum_{\Gamma}\chi^{\Gamma}(\mathcal{C}_i)^{*}\;\chi^{\Gamma}(\mathcal{C}_j)\right) S(\mathcal{C}_i)$$

$$= \sum_i S(\mathcal{C}_i)\;\frac{\delta_{ij}}{|\mathcal{C}_i|} = \frac{S(\mathcal{C}_j)}{|\mathcal{C}_j|}$$

onde $|\mathcal{C}_j|$ é a ordem da classe $\mathcal{C}_j$. Daqui,

$$S(\mathcal{C}_j) = |\mathcal{C}_j|\;\sum_{\Gamma}\frac{1}{|\Gamma|}\;\chi^{\Gamma}(\mathcal{C}_j)\; P^{\Gamma}(\mathbb{G}_k)\;. \qquad (6.1.3)$$

Esta equação mostra que as representações dos operadores $S(\mathcal{C}_i)$ dentro do espaço $|\Gamma\gamma\rangle$ são dadas por matrizes diagonais com autovalores $(|\mathcal{C}_i|/|\Gamma|)\;\chi^{\Gamma}(\mathcal{C}_i)$.

Para construir um operador auto-adjunto que rotule as bases das irreps de um grupo finito, definimos o operador

$$N(\mathbb{G}_k) = \sum_n n\; P^{\Gamma_n}(\mathbb{G}_k) = \sum_n n\;\frac{|\Gamma_n|}{|\mathbb{G}_k|}\;\sum_i \chi^{\Gamma_n}(\mathcal{C}_i)^{*}\; S(\mathcal{C}_i)\;,$$

e chamando

$$a_i = \frac{1}{|\mathbb{G}_k|} \sum_n n \; |\Gamma_n| \; \chi^{\Gamma_n}(\mathcal{C}_i)^*$$

temos

$$N(\mathbb{G}_k) = \sum_i a_i \; S(\mathcal{C}_i) \; . \qquad (6.1.4)$$

Vemos que $N(\mathbb{G}_k)$ pode ser calculado usando apenas a tabela de traços do grupo $\mathbb{G}_k$.

Agora, se tivermos uma seqüência

$$\mathbb{G}_0 \supset \mathbb{G}_1 \supset \cdots \supset \mathbb{G}_l \; ,$$

e sendo b-1 um limite superior para o número de irreps de cada subgrupo $\mathbb{G}_i$ da série, definiremos o operador rotulador por:

$$\Lambda = \sum_{k=0}^{l} b^{l-k} \; N(\mathbb{G}_k) \; . \qquad (6.1.5)$$

Uma vez que os operadores $N(\mathbb{G}_k)$ comutam $\forall$ k, os autovalores λ_j de Λ têm a forma $\lambda_j = n_0 n_1 n_2 \cdots n_l$, e são números inteiros na base b.

Mostraremos agora como usar o operador Λ para calcular as irreps adaptadas em simetria correspondentes a uma seqüência canônica. Para tal, chamemos $\Gamma(g)_{\lambda\lambda'}$ ao elemento de matriz de uma irrep de $\mathbb{G}$ adaptada em simetria à seqüência canônica $\mathbb{G} = \mathbb{G}_0 \supset \mathbb{G}_1 \supset \cdots \supset \mathbb{G}_l$, lembrando que $\mathbb{G}_l$ é abeliano.

Para simplificar a notação vamos omitir o subíndice n_0 em Γ, uma vez que $\Gamma(g)_{\lambda\lambda'} \neq 0$ se e somente se,

$$\lambda = n_0 n_1 \cdots n_l \qquad \text{e} \qquad \lambda' = n_0 n'_1 \cdots n'_l \quad .$$

Além disso, como $\Gamma(g)$ está, por hipótese, adaptada em simetria, temos que:

$$\Gamma(g)_{\lambda\lambda'} = [\prod_{k=0}^{i} \delta_{n_k n_k'}] \, \Gamma(g)_{\mu\mu'} \quad \forall\, g \in \mathbb{G}_i \qquad (6.1.6)$$

com $0 \le i \le l$, $\mu = n_i n_{i+1} \cdots n_l$ e $\mu' = n_i n_{i+1}' \cdots n_l'$.

Uma vez que a expressão para o operador Λ em termos dos elementos do grupo $\mathbb{G}$ é

$$\Lambda = \sum_k b^{l-k} \sum_{n_k} \left[\frac{n_k \, |\Gamma_{n_k}|}{|\mathbb{G}_k|} \right] \sum_{g \in \mathbb{G}_k} \chi^{n_k}(g)^* \, g \ , \qquad (6.1.7)$$

vemos que a representação regular de Λ está diretamente relacionada com a representação regular do próprio $\mathbb{G}$. De fato, o ij-ésimo elemento de matriz da representação regular à esquerda de Λ é dado por:

$$^{L}\Lambda_{ij} = \sum_k b^{l-k} \sum_{n_k} \left[\frac{n_k \, |\Gamma_{n_k}|}{|\mathbb{G}_k|} \right] \sum_{g \in \mathbb{G}_k} \chi^{n_k}(g)^* \, \delta_{g_i, g g_j} \ . \qquad (6.1.8)$$

Desta equação temos:

$$\sum_j {}^{L}\Lambda_{ij} \, \Gamma(g_j)^*_{\lambda\lambda'} =$$

$$= \sum_j \sum_k b^{l-k} \sum_{n_k} n_k \frac{|\Gamma_{n_k}|}{|\mathbb{G}_k|} \sum_{g \in \mathbb{G}_k} \chi^{n_k}(g)^* \, \delta_{g_i, g g_j} \, \Gamma(g_j)^*_{\lambda\lambda'} \ ,$$

onde a $\delta_{g_i, g g_j}$ impõe que $g = g_i g_j^{-1}$. Logo, o lado direito da equação anterior fica:

$$=\sum_{j,k} b^{l-k} \sum_{\substack{n_k \\ \alpha,\beta}} n_k \frac{|\Gamma_{n_k}|}{|\mathbb{G}_k|} \Gamma_{n_k}(g_i)^{*}_{\alpha\beta} \, \Gamma_{n_k}(g_j)_{\beta\alpha} \, \Gamma(g_i)^{*}_{\lambda\lambda'} .$$

Da relação de completeza para as irreps, segue que

$$\sum_j {}^{L}\Lambda_{ij} \, \Gamma(g_j)^{*}_{\lambda\lambda'} = \sum_{j,k} b^{l-k} \, n_k \, \Gamma(g_j)^{*}_{\lambda\lambda'} \, \delta_{ij}$$

$$= \left(\sum_k b^{l-k} \, n_k \right) \Gamma(g_i)^{*}_{\lambda\lambda'} = \lambda \, \Gamma(g_i)^{*}_{\lambda\lambda'} , \tag{6.1.9}$$

de modo que o elemento de matriz $\Gamma(g_j)^{*}_{\lambda\lambda'}$ $(j = 1, \cdots, |\mathbb{G}|)$ é a j-ésima componente do autovetor da representação regular à esquerda de Λ.

Analogamente, escrevendo os elementos de matriz da representação regular à direita de Λ, temos

$${}^{R}\Lambda_{ij} = \sum_k b^{l-k} \sum_{n_k} n_k \frac{|\Gamma_{n_k}|}{|\mathbb{G}_k|} \sum_{g\in\mathbb{G}_k} \chi^{n_k}(g)^{*} \, \delta_{g_i, g_j g^{-1}} , \tag{6.1.10}$$

e a sua aplicação sobre o elemento $\Gamma(g_j)$, resulta em:

$$\sum_j {}^{R}\Lambda_{ij} \, \Gamma(g_j)_{\lambda\lambda'} = \lambda' \Gamma(g_i)_{\lambda\lambda'} . \tag{6.1.11}$$

Então, das equações (6.1.9) e (6.1.11) e do fato que ${}^{L}\Lambda$ e ${}^{R}\Lambda$ comutam, temos que os autovetores normalizados da matriz

$$\mathbf{Y} = {}^{L}\Lambda^{*} \, b^{l} + {}^{R}\Lambda , \tag{6.1.12}$$

tomam a forma:

$$u^{\lambda\lambda'}(g) = (|\Gamma|/|\mathbb{G}|)^{(1/2)} \, e^{i\alpha(\lambda\lambda')} \, \Gamma(g)_{\lambda\lambda'} \tag{6.1.13}$$

onde $\lambda\lambda' = n_0 n_1 \cdots n_l n'_0 n'_1 \cdots n'_l$ e $e^{i\alpha(\lambda\lambda')}$ é um fator de fase arbitrário para cada autovetor.

No que segue mostraremos que é possível usar a eq. (6.1.13) para obter uma irrep Γ' equivalente a Γ.

No apêndice A, mostramos que os idempotentes principais da irrep Γ de $\mathbb{G}$, satisfazem as relações:

$$e^{\Gamma}_{\lambda,\mu}\, e^{\Gamma}_{\mu,\lambda'} = e^{\Gamma}_{\lambda,\lambda'} \tag{6.1.14}$$

onde por exemplo $e^{\Gamma}_{\lambda,\mu}$ tem a forma,

$$e^{\Gamma}_{\lambda,\mu} = (|\Gamma|/|\mathbb{G}|)\sum_{g\in\mathbb{G}} \Gamma(g)^{*}_{\lambda\mu}\, g \ . \tag{6.1.15}$$

Substituindo a eq.(6.1.15) na eq. (6.1.14), reordenando e usando a condição de unitariedade de Γ, obtemos:

$$\Gamma(g)_{\lambda\lambda'} = (|\Gamma|/|\mathbb{G}|)\sum_{g_i\in\mathbb{G}} \Gamma(g_i)^{*}_{\mu\lambda}\, \Gamma(g_i g)_{\mu\lambda'} \ . \tag{6.1.16}$$

A relação (6.1.16) mostra que na verdade é necessário conhecer apenas uma fila (ou coluna) da irrep Γ para todo $g_i \in \mathbb{G}$, para caracterizar Γ completamente.

Seja μ um valor arbitrário de λ, para o qual definimos a fila

$$\Gamma'(g)_{\mu\lambda} = u^{\mu\lambda}(g)/u^{\mu\mu}(1) = e^{i(\alpha(\mu\lambda)-\alpha(\mu\mu))}\Gamma(g)_{\mu\lambda} \ . \tag{6.1.17}$$

As outras filas de Γ' devem ser calculadas através da eq. (6.1.16), da qual obtemos:

$$\Gamma'(g)_{\lambda\lambda'} = (|\Gamma|/|\mathbb{G}|)\sum_{g_i\in\mathbb{G}} \Gamma'(g_i)^{*}_{\mu\lambda}\, \Gamma'(g_i g)_{\mu\lambda'} =$$

$$= e^{i(\alpha(\mu\lambda')-\alpha(\mu\lambda))}\Gamma(g)_{\lambda\lambda'} \ . \qquad (6.1.18)$$

A equação (6.1.18) mostra que $\Gamma' = U\Gamma U^{-1}$ onde $U_{\rho\tau} = e^{-i\alpha(\mu\rho)}\delta_{\rho\tau}$ é uma matriz unitária.

6.2- Aplicação

Como exemplo da utilização dos rotuladores tomemos a seqüência canônica $\mathbb{C}_{4v} \supset \mathbb{C}_2$, com

$$\mathbb{C}_{4v} = \{ e, \gamma\alpha, \delta, \alpha\gamma, i\alpha, i\gamma, i\alpha\delta, i\gamma\delta \} ,$$

$$\mathbb{C}_2 = \{ e, i\gamma \} ,$$

onde $\alpha = C_2^{1\bar{1}0}$, $\gamma = C_2^x$, $\delta = C_2^z$, e i é o operador inversão. As tabelas de traços são

$\mathbb{C}_{4v}$	e	2σ $(i\alpha)$	$2\sigma'$ $(i\gamma)$	δ	$2C_4$ $(\alpha\gamma)$
Γ_1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	-1	-1	1	1
Γ_3	1	-1	1	1	-1
Γ_4	1	1	-1	1	-1
Γ_5	2	0	0	-2	0

$\mathbb{C}_2$	e	$i\gamma$
Γ_1	1	1
Γ_2	1	-1

Tabela 6.1 - Tabelas de traços de $\mathbb{C}_{4v}$ e $\mathbb{C}_2$

de modo que para os operadores **N**, teremos:

$$N(\mathbb{C}_{4v}) = (1/4)[20e + (5e - 2\gamma\alpha + i\gamma)(e + \delta)]$$

$$N(\mathbb{C}_2) = (1/2)(3e - i\gamma)$$

e então,

$$\Lambda = bN(\mathbb{C}_{4v}) + N(\mathbb{C}_2) \ .$$

Uma vez que estamos interessados em construir **Y**, e que os traços das irreps de ambos os grupos são reais, basta calcularmos a representação regular à esquerda de Λ e somarmos a representação regular à direita multiplicada por b^2. Com isso temos a matriz da figura 6.2.

$$\begin{bmatrix} 3939.0 & -505.0 & -1262.5 & -505.0 & 0.0 & -303.0 & 0.0 & -252.5 \\ -505.0 & 3939.0 & -505.0 & -1262.5 & -253.0 & 0.0 & -302.5 & 0.0 \\ -1262.5 & -505.0 & 3939.0 & -505.0 & 0.0 & -252.5 & 0.0 & -303.0 \\ -505.0 & -1262.5 & -505.0 & 3939.0 & -302.5 & 0.0 & -253.0 & 0.0 \\ 0.0 & -253.0 & 0.0 & -302.5 & 3939.0 & -505.0 & -1262.5 & -505.0 \\ -303.0 & 0.0 & -252.5 & 0.0 & -505.0 & 3939.0 & -505.0 & -1262.0 \\ 0.0 & -302.5 & 0.0 & -253.0 & -1262.5 & -505.0 & 3939.0 & -505.0 \\ -252.5 & 0.0 & -303.0 & 0.0 & -505.0 & -1262.5 & -505.0 & 3939.0 \end{bmatrix}$$

Figura 6.1 - Representaçao matricial do operador $\mathbf{Y} = {}^{L}\Lambda^{*}b^{2} + {}^{R}\Lambda$.

Diagonalizando a matriz de $\mathbf{Y}$ obtemos os autovalores 1111, 2222, 3232, 4141, 5151, 5152, 5251, 5252. A matriz unitária $\mathbf{M}$ que diagonaliza $\mathbf{Y}$,é

$$\mathbf{M} = (2\sqrt{2})^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & -\sqrt{2} & \sqrt{2} & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} & 0 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & \sqrt{2} & 0 & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & -\sqrt{2} & -\sqrt{2} & 0 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & \sqrt{2} & \sqrt{2} & 0 \end{bmatrix}$$

Esta matriz fornece as irreps adaptadas em simetria à seqüência do exemplo, e em cada uma de suas colunas, da esquerda para a direita, podemos ver os autovetores correspondentes aos respectivos autovalores encontrados.

7

CONCLUSÕES

Nesta tese, desenvolvemos métodos com a finalidade de obter da estrutura de subgrupos de um grupo solúvel finito, o cálculo de suas irreps orientadas segundo seqüências canônicas e a adaptação em simetría das funções base de espaços vetoriais finitos sobre as quais os elementos do grupo atuam.

Dentro da classificação de grupos finitos e solúveis, temos os grupos pontuais cristalográficos (em duas ou trés dimensões), seus grupos duplos e seus correspondentes grupos magnéticos. Grupos em dimensões maiores como por exemplo o grupo hipercúbico[68] em 4 dimensões também podem ser estudados por esses métodos, pois a ordem do grupo hipercúbico em quatro dimensões é 384 (2^{16}x3) e pelo Teorema de Burnside[69] este grupo é solúvel.

Entretanto, este conjunto de trabalhos foi feito visando a extensão dos métodos a grupos solúveis infinitos através do uso de cópias finitas introduzidas na última parte do Capítulo 4. Um exemplo disto é o estudo dos grupos magnéticos e/ou duplos da rede cristalina cúbica, através de sua estrutura de subgrupos e de suas irreps que contêm uma dada irrep $\exp(i\vec{k}.\vec{r})$ do grupo das translações T . No caso, a menor cópia finita do grupo cristalográfico cúbico em três dimensões tem ordem 384 ($48\text{x}2^3$, sendo 48 a ordem de $\mathbb{O}_h$) o que implica que sua tabela de multiplicação ocupará aproximadamente 3 MBytes de memória do computador. Isto possibilita a sua manipulação em computadores pessoais do tipo 386, com memória maior ou igual a 4 MegaBytes. Usando nas copias finitas geradores de ordem 3 para as translações, nos asseguramos que o grupo dos automorfismos de T será igual ao de T_m, já que $\mathbb{Z}$ e $\mathbb{Z}_3$ têm grupos de automorfismos isomorfos a $\mathbb{C}_2$.

Com o propósito de aplicar os métodos dados nesta tese, estamos desenvolvendo um programa de computação que permite construir grupos finitos solúveis usando sua série de composição. O programa atualmente calcula a tabela de multiplicação do grupo, sua estrutura de classes, seu grupo do centro e o grupo derivado com a sua tabela de traços. Como próximo passo pensamos implementar o cálculo de todos os subgrupos invariantes e os subgrupos máximos com suas correspondentes apresentações, todas as seqüências canônicas e suas irreps (contendo uma dada irrep de T) orientadas segundo uma daquelas seqüências, com as correspondentes funções base.

A extensão do programa para o cálculo de grupos cristalográficos duplos, grupos magnéticos de todos os tipos e de suas co-representações, não envolve dificuldades e permitirá que o programa atinja também um objetivo didático.

Uma aplicação importante consiste em estudar os grupos cristalográficos em n > 3 dimensões. Possivelmente muitos destes grupos são solúveis e têm aplicações na teoria das fases cristalinas incomensuráveis[70].

Outro tema que está intimamente ligado aos métodos desenvolvidos nesta tese é o cálculo de níveis de energia e a parametrização das probabilidades de transição de modelos semi-empíricos de íons complexos em matrizes isolantes ou magnéticas.

Na referência [65] mostramos que a diagonalização de uma combinação linear de nosso operador Λ com certos operadores irreduzíveis invariantes, permite simultaneamente rotular e calcular as energias dos orbitais $|JM\rangle$ a um elétron. Devido a que os diferentes coeficientes necessários aos cálculos dos níveis de energia das camadas d^n e f^n podem ser tabelados, esperamos no futuro acrescentar no nosso programa uma subrotina para este tipo de cálculo.

O contínuo crescimento do poder de cálculo dos computadores pessoais, nos permitirá incluir em nosso programa a solução de modelos semi-empíricos cada vez mais sofisticados, que facilitarão ainda mais no futuro a análise dos resultados provenientes de diversas espectroscopias.

APÊNDICE A

ÁLGEBRAS LINEARES ASSOCIATIVAS

Uma visão mais ampla das álgebras lineares associativas pode ser obtida da leitura, entre outras, das referências [38], [58] e [71].

A.1- Álgebras

Uma *álgebra linear associativa* $\mathscr{A}$ *sobre um campo de escalares* $\mathscr{F}$ é um conjunto não vazio de operadores lineares $\{A_i\}$, fechado sob adição e produto de operadores, e sob o produto de operadores por escalares. Ou seja, os elementos da álgebra satisfazem os mesmos axiomas que os elementos de um espaço vetorial, e mais

(i) Se A_i, $A_j \in \mathscr{A} \longrightarrow A_iA_j \in \mathscr{A}$

(ii) Se A_i, A_j e $A_k \in \mathscr{A} \longrightarrow$ 1) $(A_iA_j)A_k = A_i(A_jA_k)$

2) $A_i(A_j + A_k) = A_iA_j + A_iA_k$

3) $(A_i + A_j)A_k = A_iA_k + A_jA_k$

(iii) Se A_i, $A_j \in \mathscr{A}$ e α, $\beta \in \mathscr{F} \longrightarrow (\alpha A_i)(\beta A_j) = (\alpha\beta)(A_iA_j)$

Uma vez que os elementos da álgebra satisfazem os axiomas de um espaço vetorial, o conceito de independência linear se aplica e portanto $\mathscr{A}$ terá bases cujo número de elementos será a *dimensão de* $\mathscr{A}$. Isto é, numa álgebra de dimensão n, pode-se encontrar um conjunto de n elementos linearmente independentes, a_1, a_2, $\cdots$, a_n, tal que cada elemento da álgebra é expresso de maneira única

$$\alpha_1 a_1 + \alpha_2 a_2 + \cdots + \alpha_n a_n ,$$

onde $\alpha_i \in \mathscr{F}$. Os elementos a_1, a_2, $\cdots$, a_n, formam uma base da álgebra. Se

$$a_i a_j = \sum_k c_{ijk}\ a_k , \tag{A.1.1}$$

então o conjunto de n^3 números c_{ijk} define a álgebra; e esses números são as *constantes de estrutura da álgebra*.

Daqui por diante, falaremos apenas em "álgebras", entendendo que nos referimos às álgebras lineares associativas de dimensão finita sobre o campo dos números complexos.

A.2- Subálgebras

Se uma álgebra $\mathscr{A}$ tem um subconjunto linear $\mathscr{B}$ que forma por si mesmo uma álgebra, então $\mathscr{B}$ é uma *subálgebra* de $\mathscr{A}$ e denotamos $\mathscr{B} \subseteq \mathscr{A}$. Se $\mathscr{B}$ é fechado sob o produto de elementos de $\mathscr{A}$, ou seja, se para cada elemento $A_i \in \mathscr{A}$ e cada elemento $B_j \in \mathscr{B}$ os produtos A_iB_j e B_jA_i pertencerem a $\mathscr{B}$, então $\mathscr{B}$ será chamada *subálgebra invariante* de $\mathscr{A}$. Note-se que se $\mathscr{B}$ e $\mathscr{D}$ forem subálgebras invariantes de $\mathscr{A}$, então $\mathscr{B} + \mathscr{D}$ também o será, pois

$$\mathscr{A}(\mathscr{B} + \mathscr{D}) = \mathscr{A}\mathscr{B} + \mathscr{A}\mathscr{D} \subseteq \mathscr{B} + \mathscr{D}$$

$$(\mathscr{B} + \mathscr{D})\mathscr{A} = \mathscr{B}\mathscr{A} + \mathscr{D}\mathscr{A} \subseteq \mathscr{B} + \mathscr{D} .$$

Suponha agora que uma álgebra $\mathscr{A}$ de ordem n possua duas subálgebras invariantes $\mathscr{B}$ e $\mathscr{D}$, tais que $\mathscr{B} \cap \mathscr{D} = \emptyset$ e $\mathscr{B} \cup \mathscr{D} = \mathscr{A}$. Então, qualquer elemento A_1 de $\mathscr{A}$ pode ser escrito univocamente na forma

$$A_1 = B_1 + D_1$$

com $B \in \mathscr{B}$ e $D \in \mathscr{D}$. Similarmente,

$$A_2 = B_2 + D_2 ,$$

de modo que

$$A_1 + A_2 = (B_1 + B_2) + (D_1 + D_2) .$$

E, uma vez que $\mathscr{B}$ e $\mathscr{D}$ são subálgebras invariantes de $\mathscr{A}$, os produtos B_1D_2 e D_1B_2 devem pertencer a ambas, mas $\mathscr{B}$ e $\mathscr{D}$ são disjuntas, portanto esses produtos são nulos e, então,

$$A_1A_2 = B_1B_2 + D_1D_2 \; .$$

Assim, as propriedades de $\mathscr{A}$ são exatamente a soma das propriedades das álgebras independentes $\mathscr{B}$ e $\mathscr{D}$. $\mathscr{A}$ é dita uma álgebra *redutível* e é *equivalente à soma direta* das álgebras $\mathscr{B}$ e $\mathscr{D}$: $\mathscr{A} = \mathscr{B} \oplus \mathscr{D}$.

Uma álgebra que não é reduzível é dita *irredutível*. Vemos que para estudar as propriedades das álgebras basta analisar as estruturas das álgebras irreduzíveis.

A.3- Elementos Idempotentes

Um elemento e de uma álgebra $\mathscr{A}$ será um *idempotente* se ele satisfizer a relação: $e^2 = e$. Diz-se que um idempotente e é *unidade* em $\mathscr{A}$ se $eA_i = A_ie = A_i \;\; \forall \; A_i \in \mathscr{A}$. Neste caso a notação será $e = \mathbf{1}$.

O conjunto de elementos da forma eA_ie claramente forma uma álgebra para a qual e é a unidade, pois

$$e(eA_ie) = (eA_ie)e = eA_ie \; .$$

Um idempotente e é dito um *primitivo* em $\mathscr{A}$ se e for o único idempotente na álgebra $e\mathscr{A}e$.

Dois idempotentes e_i e e_j são *ortogonais* se $e_ie_j = e_je_i = 0$. Claramente, a soma de dois idempotentes ortogonais é também um idempotente. Um idempotente será chamado *principal em* $\mathscr{A}$ se não existirem em $\mathscr{A}$ idempotentes ortogonais a ele. Obviamente o elemento unidade é um idempotente principal.

Se um idempotente e for exprimível como a soma de dois idempotentes, na forma $e = e_1 + e_2$, com e_1 ortogonal a e_2, ele será dito *redutível*; caso contrário será chamado *irredutível*. Se a álgebra possuir outro idempotente além da unidade, então ele será redutível pois $1 = e + (1 - e)$ e como $1^2 = 1$ e $e^2 = e$, $(1 - e)^2 = (1 - e)$ o que implica que $e(1 - e) = (1 - e)e = 0$. É simples provar que cada idempotente, e em particular a unidade de uma álgebra, pode ser expresso como uma soma de idempotentes irredutíveis.

Se existir $A \in \mathscr{A}$ tal que $A\mathscr{A} = \mathscr{A}$, então a álgebra $\mathscr{A}$ conterá um idempotente. Vejamos: seja $\{a_1, a_2, \cdots, a_n\}$ uma base de $\mathscr{A}$. Então, cada elemento de $A\mathscr{A} = \mathscr{A}$ pode ser expresso como uma combinação linear de elementos Aa_i, $i = 1, \cdots, n$. Assim $\{Aa_1, \cdots, Aa_n\}$ é uma base de $\mathscr{A}$ e

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i A a_i = 0 \implies \alpha_i = 0, \quad i = 1, \cdots, n \quad .$$

Então, se $AX = 0$, $X \in \mathscr{A} \longrightarrow X = 0$. Mas desde que $A\mathscr{A} = \mathscr{A}$, deve existir um elemento $e \in \mathscr{A}$, tal que $Ae = A$. Assim, $Ae^2 = Ae$, e $A(e^2 - e) = 0 \implies e^2 = e$; portanto e é o idempotente cqd.

A.4- Elementos Nilpotentes

Um elemento A de uma álgebra $\mathscr{A}$ é *nilpotente* se para alguma potência finita p, $A^p = 0$. Se também o produto AA_j for nilpotente para cada elemento A_j de $\mathscr{A}$, então A será chamado *propriamente nilpotente* em $\mathscr{A}$. Assim, cada produto A_jA é também nilpotente, pois se $(AA_j)^p = 0$, então

$$(A_jA)^{p+1} = A_j(AA_j)^p A = 0 \; .$$

Um elemento nilpotente não é idempotente.

É simples mostrar que os elementos propriamente nilpotentes formam uma subálgebra invariante de $\mathscr{A}$. Definimos como *nilpotente* uma álgebra $\mathscr{A}$ tal que, para alguma potência finita p, $\mathscr{A}^p = 0$. Note-se que uma subálgebra de uma álgebra nilpotente é também nilpotente.

Se $\mathscr{M}$ e $\mathscr{N}$ são subálgebras invariantes nilpotentes de $\mathscr{A}$, então $\mathscr{M} + \mathscr{N}$ também o é. Para ver isto basta investigar as potências de $\mathscr{M} + \mathscr{N}$. Uma vez que $(\mathscr{M} + \mathscr{N})^r$ pode ser expandida em 2^r termos, cada um deles envolvendo um produto de ordem r, se em um desses termos, $\mathscr{M}$ ocorrer q vezes, então $\mathscr{N}$ ocorrerá r - q vezes. Desde que $\mathscr{M}$ e $\mathscr{N}$ são invariantes, esse termo típico será um elemento de $\mathscr{M}^q$ e de $\mathscr{N}^{r-q}$. Escolhendo r suficientemente grande, vemos que $\mathscr{M}^q = 0$ ou $\mathscr{N}^{r-q} = 0$, e então $\mathscr{M} + \mathscr{N}$ é nilpotente e também invariante, já que $\mathscr{M}$ e $\mathscr{N}$ o são.

Pode-se mostrar[72] que cada álgebra que <u>não</u> <u>é</u> nilpotente contém:

(i) um elemento idempotente;

(ii) um primitivo idempotente;

(iii) um idempotente principal.

A.5- Álgebras Simples, Semi-simples, "Matric" e Autoadjunta

Alguns tipos especiais de álgebras não nilpotentes são de grande interesse na Mecânica Quântica e por isto vamos estudar sua estrutura.

Uma álgebra $\mathscr{A}$ é dita *semi-simples* se ela não tiver nenhuma subálgebra invariante nilpotente, e é chamada *simples* se ela for não nilpotente e não contiver nenhuma subálgebra invariante. É óbvio que uma álgebra simples é semi-simples.

Uma álgebra $\mathscr{A}$ é chamada uma *álgebra matric simples* se ela tiver uma base $\{a_{rs};\ r,s = 1, \cdots, f\}$ tal que

$$a_{rs}a_{tu} = \delta_{st}a_{ru} \,. \qquad (A.5.1)$$

É fácil ver que uma álgebra matric simples é simples.

A seguir demonstraremos alguns teoremas necessários à análise da estrutura das álgebras simples.

Lema A.5.1- Se e for um idempotente de uma álgebra simples $\mathscr{A}$, então $e\mathscr{A}e$ será simples.

- Seja $\mathscr{B}$ uma subálgebra invariante de $e\mathscr{A}e$; uma vez que $\mathscr{A}\mathscr{B}\mathscr{A}$ também é subálgebra invariante de $\mathscr{A}$ e $\mathscr{A}$ é simples, então $\mathscr{A}\mathscr{B}\mathscr{A} = \mathscr{B}$. Notando que $e\mathscr{B}e = \mathscr{B} \subset e\mathscr{A}e$, temos: $e\mathscr{A}e = e\mathscr{A}\mathscr{B}\mathscr{A}e = (e\mathscr{A}e)\mathscr{B}(e\mathscr{A}e) = \mathscr{B}$. De modo que não há subálgebras invariantes de $e\mathscr{A}e$, a não ser ela mesma.

Lema A.5.2- Se e for um idempotente primitivo de uma álgebra simples $\mathscr{A}$, então cada elemento não nulo de $e\mathscr{A}e$ terá um inverso multiplicativo em $e\mathscr{A}e$.

- Seja $(A \neq 0) \in e\mathscr{A}e \longrightarrow Ae\mathscr{A}e \subseteq e\mathscr{A}e$. Como e é a unidade em $e\mathscr{A}e$ e como $\mathscr{A}$ é simples, temos que $\mathscr{A}A\mathscr{A} = \mathscr{A}$. Então, $(e\mathscr{A}e)^r = (e\mathscr{A}eAe\mathscr{A}e)^r = (e\mathscr{A}e)(Ae\mathscr{A}e)^r$, e como $e\mathscr{A}e$ é não nilpotente, $Ae\mathscr{A}e$ também o é. Assim, $Ae\mathscr{A}e$ deve ter um idempotente, o qual tem que ser e, pois $Ae\mathscr{A}e \subseteq e\mathscr{A}e$ e e é primitivo. Consequentemente, $\mathscr{A}$ tem que ter um inverso multiplicativo em $e\mathscr{A}e$.

Lema A.5.3- Se e for um idempotente primitivo de uma álgebra simples $\mathscr{A}$, então $e\mathscr{A}e$ será unidimensional.

- Seja A um elemento não nulo de $e\mathscr{A}e$, e n um inteiro tal que A^n seja uma combinação linear não nula de e e potências menores de A, isto é

$$A^n = c_0 e + \sum_{j=1}^{n-1} c_j A^j.$$

Uma vez que a correspondente equação algébrica em termos de uma variável escalar pode ser fatorizada,

$$a^n - \sum_{j=1}^{n-1} c_j x^j - c_0 = \prod_{j=1}^{n} (a - r_j) = 0 ,$$

(r_j são as raízes do polinômio), temos que

$$A^n - \sum_{j=1}^{n-1} c_j A^j - c_0 e = \prod_{j=1}^{n} (A - r_j e) = 0.$$

Usando o lema A.5.2, notamos que $BD = 0$ (com $B, D \in e\mathscr{A}e$) implica que ou $B = 0$ ou $D = 0$. Conseqüentemente, um dos fatores $(A - r_j e)$ tem que ser nulo, de modo que A é um múltiplo de e, e portanto $e\mathscr{A}e$ é unidimensional.

Teorema A.5.1 - Uma álgebra simples $\mathscr{A}$ tem um conjunto de idempotentes primitivos mutuamente ortogonais $\{e_{rr};\ r = 1, \cdots, f\}$, a soma dos quais é o elemento unidade.

- Das seções anteriores, sabemos que se $\mathscr{A}$ é não nilpotente, ela tem um idempotente primitivo, que chamaremos e_{11}, e uma unidade e. Se $e_{11} = e$, o teorema está demonstrado. Se $e_{11} \neq e \longrightarrow (e - e_{11})$ é um idempotente tal que $e_{11}(e - e_{11}) = 0$. A álgebra simples $(e - e_{11})\mathscr{A}(e - e_{11})$ por sua vez, tem que conter um idempotente primitivo, digamos e_{22}. Vemos que $e_{11}e_{22} = e_{11}[(e - e_{11}) e_{22}] = 0$. Se $(e - e_{11}) - e_{22} = 0$ a prova está completa; caso contrário, temos que considerar o idempotente $(e - e_{11}) - e_{22}$. Continuando, encontraremos a seqüência desejada de idempotentes primitivos ortogonais $e_{11}, \cdots, e_{ff}$ de modo que

$$e_{rr}e_{ss} = \delta_{rs}e_{rs} \qquad e \qquad e = \sum_{r=1}^{f} e_{rr} \quad \text{cqd.}$$

Lema A.5.4- Se e_1 e e_2 forem idempotentes primitivos numa álgebra simples $\mathscr{A}$, então $e_1\mathscr{A}e_2$ será um espaço unidimensional.

- Desde que $\mathscr{A}$ não tem subálgebras invariantes não triviais, $\mathscr{A}e_1\mathscr{A} = \mathscr{A}e_2\mathscr{A} = \mathscr{A}$, e $\mathscr{A}(e_1\mathscr{A}e_2)\mathscr{A} = \mathscr{A}$. Então, podemos escolher um elemento $A \in e_1\mathscr{A}e_2$, não nulo. Supondo que $\mathscr{N}$ é um subespaço (não necessariamente uma álgebra) de $e_1\mathscr{A}e_2$ tal que $A \notin \mathscr{N}$ e notando do lema 3 que $e_1\mathscr{A}e_1$ e $e_2\mathscr{A}e_2$ são unidimensionais, obtemos

$$\begin{aligned} e_1\mathscr{A}e_2 \cap \mathscr{A}\mathscr{N}\mathscr{A} &= e_1\mathscr{A}e_2 \cap e_1\mathscr{A}\mathscr{N}\mathscr{A}e_2 \\ &= e_1\mathscr{A}e_2 \cap (e_1\mathscr{A}e_1)\mathscr{N}(e_2\mathscr{A}e_2) \\ &= e_1\mathscr{A}e_2 \cap \mathscr{N} = \mathscr{N} \quad . \end{aligned}$$

Então, ou $\mathscr{A}\mathscr{N}\mathscr{A}$ é uma subálgebra invariante que não contém A, ou $\mathscr{A}\mathscr{N}\mathscr{A} = 0$. Mas como $\mathscr{A}$ é simples, $\mathscr{A}\mathscr{N}\mathscr{A} = 0$ e desde que $\mathscr{A}$ tem um elemento unidade, $\mathscr{N} \subseteq \mathscr{A}\mathscr{N}\mathscr{A} = 0$. Então, $\mathscr{N} = 0$ e $e_1\mathscr{A}e_2$ é unidimensional. Com estes resultados estamos prontos para provar que cada álgebra simples é uma algebra matric simples.

Teorema A.5.2 - Se $(e_{11}, e_{22}, \cdots, e_{ff})$ for um conjunto de idempotentes primitivos mutuamente ortogonais que somam a identidade de uma álgebra simples $\mathscr{A}$, então $\mathscr{A}$ terá uma base $\{e_{rs}, r,s = 1, \cdots, f\}$ tal que $e_{rs}e_{tu} = \delta_{st}e_{ru}$. Em conseqüência, toda álgebra simples é uma álgebra matric simples.

- Definimos os espaços $\mathscr{A}_{st} \equiv e_{ss}\mathscr{A}e_{tt}$. Pelo lema A.5.4, eles são todos unidimensionais. Como $\mathscr{A}$ é simples $\mathscr{A}\mathscr{A}_{st}\mathscr{A} = \mathscr{A}$, e

$$\mathscr{A}_{ru} = e_{rr}\mathscr{A}e_{uu} = e_{rr}\mathscr{A}\mathscr{A}_{st}\mathscr{A}e_{uu} = e_{rr}\mathscr{A}e_{ss}\mathscr{A}e_{tt}\mathscr{A}e_{uu}$$

$$= \mathscr{A}_{rs}\mathscr{A}_{st}\mathscr{A}_{tu}$$

Escolhendo $t = u = r = 1$ nesta relação temos:

$$\mathscr{A}_{11} = \mathscr{A}_{1s}\mathscr{A}_{s1}\mathscr{A}_{11} = \mathscr{A}_{1s}\mathscr{A}_{s1} .$$

Assim, deverão existir $e_{1s} \in \mathscr{A}_{1s}$ e $e_{s1} \in \mathscr{A}_{s1}$ tal que $e_{1s}e_{s1} = e_{11}$ para $s = 1, \cdots, f$. Escolhendo $u = t$ e $s = 1$, temos: $\mathscr{A}_{rt} = \mathscr{A}_{r1}\mathscr{A}_{1t}$, de modo que podemos definir um elemento de $\mathscr{A}_{rt}$, $e_{rt} \equiv e_{r1}e_{1t}$, $r \neq t$. Então,

$$(e_{rs}e_{sr})^2 = (e_{r1}e_{1s}e_{s1}e_{1r})^2 = (e_{r1}e_{11}e_{1r})^2$$

$$= (e_{r1}e_{1r})^2 = e_{r1}e_{11}e_{1r} = e_{r1}e_{1r} \in \mathscr{A}_{rr} .$$

Mas, há apenas um idempotente e_{rr} em $\mathscr{A}_{rr}$, então, $e_{r1}e_{1r} = e_{rr}$, e finalmente

$$e_{rs}e_{tu} = e_{rs}e_{ss}e_{tt}e_{tu} = \delta_{st}e_{rs}e_{su} ,$$

$$e_{rs}e_{su} = e_{r1}e_{1s}e_{s1}e_{1u} = e_{r1}e_{11}e_{1u} = e_{r1}e_{1u} = e_{ru}$$

cqd

Agora voltemos nossa atenção para as álgebras semi-simples seguindo o mesmo esquema que para as álgebras simples.

Lema A.5.5- Uma subálgebra invariante $\mathcal{B}$ de uma álgebra semi-simples $\mathcal{A}$ é semi-simples

- Seja $\mathcal{D}$ uma subálgebra invariante de $\mathcal{B}$. Lembrando que $\mathcal{A}^2 = \mathcal{A}$, temos

$$(\mathcal{A}\mathcal{D}\mathcal{A})^{2p} = [(\mathcal{A}\mathcal{D}\mathcal{A})\mathcal{D}]^p\mathcal{A} \subseteq (\mathcal{B}\mathcal{D})^p\mathcal{A} \subseteq \mathcal{D}^p\mathcal{A} \quad ,$$

mas como $\mathcal{A}\mathcal{D}\mathcal{A} \neq 0$ é invariante em $\mathcal{A}$, ela não pode ser nilpotente. Então, $(\mathcal{A}\mathcal{D}\mathcal{A})^{2p} \neq 0$ tal que $\mathcal{D}^p \neq 0$ para todo p. Assim, $\mathcal{B}$ não contém subálgebras invariantes nilpotentes.

Lema A.5.6- Se $\mathcal{B} \neq \mathcal{A}$ for uma subálgebra invariante de uma álgebra semi-simples $\mathcal{A}$, então $\mathcal{A}$ será a soma direta de $\mathcal{B}$ e uma segunda subálgebra semi-simples $\mathcal{D}$, invariante em $\mathcal{A}$: $\mathcal{A} = \mathcal{B} \oplus \mathcal{D}$.

- Do lema A.5.5, $\mathcal{B}$ é semi-simples e então tem uma unidade e. Seja $\mathbf{1}$ a unidade de $\mathcal{A}$. Definimos $e' \equiv \mathbf{1} - e$. Agora, $\forall$ A $\in \mathcal{A}$, temos que $e(Ae') \in \mathcal{B}$, já que $\mathcal{B}$ é invariante. Mas $(eAe)e = 0$ desde que $e'e = 0$, e como e é a unidade de $\mathcal{B}$, $eAe' = 0$. Similarmente, $e'Ae = 0$. Então, $A = eAe + e'Ae'$ é a única decomposição de A de modo que $\mathcal{A}$ é a soma direta de $\mathcal{B}$ e $\mathcal{D} = e'\mathcal{A}e'$. A álgebra $\mathcal{D}$ é invariante em $\mathcal{A}$ pois $e'e = ee' = 0$ e $\mathcal{D}$ é semi-simples desde que uma subálgebra invariante nilpotente em $\mathcal{D}$ seria invariante também em $\mathcal{A}$.

Lema A.5.7- Se $\mathcal{B}$ for uma subálgebra invariante de uma álgebra semi-simples $\mathcal{A}$, e $\mathcal{D}$ for uma subálgebra invariante de $\mathcal{B}$, então $\mathcal{D}$ será uma subálgebra invariante em $\mathcal{A}$.

- Do lema A.1.5 segue que $\mathcal{B}$ e $\mathcal{D}$ são semi-simples, e do lema A.1.6, $\mathcal{B} = \mathcal{D} \oplus \mathcal{D}'$ e $\mathcal{A} = \mathcal{B}' \oplus \mathcal{D} \oplus \mathcal{D}'$ com unidades **b'**, **d**, e **d'** em $\mathcal{B}'$, $\mathcal{D}$ e $\mathcal{D}'$ respectivamente, que são ortogonais: **b'd** = **b'd'** = **dd'** = **db'** = **d'b'** = **d'd** = 0, Assim, $\mathcal{A}\mathcal{D}\mathcal{A} = \mathcal{A}\mathbf{d}\mathcal{D}\mathbf{d}\mathcal{A} = \mathcal{D}\mathcal{D}\mathcal{D} = \mathcal{D}$, e $\mathcal{D}$ é invariante em $\mathcal{A}$, cqd.

Teorema A.5.3 - Qualquer álgebra semi-simples é a soma direta única de subálgebras simples invariantes.

-Se $\mathcal{A}$ for unidimensional, o teorema vale. Para mostrar o teorema por indução, suponha que vale também para álgebras de dimensão menor que a dimensão de $\mathcal{A}$. Vejamos o que ocorre para $\mathcal{A}$. Primeiro vamos mostrar que $\mathcal{A}$ é a soma direta de subálgebras invariantes *simples*: pelo lema A.5.7 vemos que existe uma sub-álgebra invariante mínima, $\mathcal{A}_1$ de $\mathcal{A}$, que não contém nenhuma outra subálgebra invariante e é simples. Se $\mathcal{A}_1 = \mathcal{A}$ o teorema está demonstrado. Se $\mathcal{A}_1 \neq \mathcal{A}$, então, pelo lema A.5.6, haverá uma álgebra invariante semi-simples $\mathcal{A}'_1 \subset \mathcal{A}$ tal que $\mathcal{A} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}'_1$. Desde que a dimensão de $\mathcal{A}'_1$ é menor que a de $\mathcal{A}$, $\mathcal{A}'_1$ pode ser decomposta como a soma direta de subálgebras invariantes: $\mathcal{A}'_1 = \mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{A}_3 \oplus \cdots$, e $\mathcal{A} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}_2 \oplus \cdots$. Para mostrar que a decomposição é única, seja $\mathcal{B}$ uma subálgebra invariante simples arbitrária de $\mathcal{A}$. Então, é fácil ver que $\mathcal{A}_i \cap \mathcal{B}$ ou é zero ou é uma subálgebra invariante de $\mathcal{A}_i$ e de $\mathcal{B}$. Mas $\mathcal{A}_i$ e $\mathcal{B}$ não podem ter subálgebras invariantes próprias pois são simples. Então, ou $\mathcal{A}_i \cap \mathcal{B} = 0$ ou $\mathcal{B} = \mathcal{A}_i \cap \mathcal{B} = \mathcal{A}_i$.

Finalmente, podemos dizer que uma álgebra semi-simples $\mathcal{A}$ é a soma direta de álgebras matrics simples $\mathcal{A}^\alpha$,

$$\mathcal{A} = \sum_\alpha \oplus \mathcal{A}^\alpha ,$$

com a α-ésima álgebra matric simples $\mathcal{A}^\alpha$ tendo, de acordo com o teorema A.5.2, uma base

$$\{ e^{\alpha}_{rs};\ r,s = 1 \text{ a } f^{\alpha}\} .$$

A base matric de $\mathscr{A}$ é então a união de cada uma destas bases, para as álgebras matric simples cuja regra de multiplicação de seus elementos é,

$$e^{\alpha}_{rs}\, e^{\beta}_{tu} = \delta_{\alpha\beta}\, \delta_{st}\, e^{\alpha}_{ru} .$$

O elemento unidade e^{α} de cada subálgebra matric simples $\mathscr{A}^{\alpha}$, é a soma de idempotentes primitivos,

$$e^{\alpha} = \sum_{r=1}^{f^{\alpha}} e^{\alpha}_{rr} .$$

Estes elementos unidade são únicos e ortogonais, ou seja

$$e^{\alpha}\, e^{\beta} = \delta_{\alpha\beta}\, e^{\alpha} ,$$

de modo que e^{α} aniquila todos os elementos das subálgebras matric simples, exceto os de $\mathscr{A}^{\alpha}$:

$$e^{\alpha}\mathscr{A} = \mathscr{A}e^{\alpha} = \mathscr{A}^{\alpha} .$$

Finalmente, a soma dos e^{α} é a identidade de $\mathscr{A}$:

$$\mathbf{1} = \sum_{\alpha} e^{\alpha} .$$

Na Mecânica Quântica trabalhamos com um espaço vetorial **V**, fechado, sobre o qual atuam operadores. Neste espaço está definido um produto interno e operadores adjuntos, ou seja, se $|u\rangle$ e $|v\rangle \in \mathbf{V}$, $\hat{O}^{\dagger}$ é o operador adjunto de $\hat{O}$ e é definido por:

$$\langle \hat{O}u|v\rangle = \langle u|\hat{O}^{\dagger}v\rangle \quad \text{onde} \quad |\hat{O}u\rangle = \hat{O}|u\rangle \text{ e } |\hat{O}^{\dagger}v\rangle = \hat{O}^{\dagger}|v\rangle .$$

Chamamos *álgebra autoadjunta* a uma álgebra $\mathscr{A}$ de operadores tal que o adjunto de cada elemento de $\mathscr{A}$ também pertence a ela.

Seja $\mathscr{A}$ uma álgebra autoadjunta e $\mathscr{B}$ uma subálgebra invariante de $\mathscr{A}$. Se $B \neq 0$ for um elemento de $\mathscr{B}$, então $B^{\dagger}B \in \mathscr{A}\mathscr{B} \subseteq \mathscr{B}$. Como $B \neq 0$, existe um ket $|v\rangle \in \mathbf{V}$ tal que $B\,|v\rangle \neq 0$ e o elemento de matriz $\langle v|B^{\dagger}B|v\rangle$ é não nulo. Assim, $B^{\dagger}B \neq 0$ e, similarmente, $(B^{\dagger}B)^2 = (B^{\dagger}B)^{\dagger}(B^{\dagger}B) \neq 0$. Seguindo o raciocínio podemos ver que para qualquer potência $k = 2^n$, $n = 1, 2, \cdots$, $(B^{\dagger}B)^k \neq 0$, de modo que as subálgebras invariantes das álgebras autoadjuntas são não nilpotentes. Vemos assim que as álgebras autoadjuntas são semisimples e, portanto, têm uma estrutura como a descrita acima.

A.6- Representações de Álgebras

Uma *representação matricial* de uma álgebra $\mathscr{A}$ é um conjunto de matrizes $\Gamma(\mathscr{A})$ que forma uma imagem homomorfa de $\mathscr{A}$. Isto é, se $\Gamma(A_1)$, $\Gamma(A_2)$, $\Gamma(A_3)$ forem matrizes que representam os elementos A_1, A_2 e $A_3 \in \mathscr{A}$, e k for um número complexo, então,

(i) $A_1A_2 = A_3 \Longrightarrow \Gamma(A_1)\,\Gamma(A_2) = \Gamma(A_3)$,

(ii) $A_1 + A_2 = A_3 \Longrightarrow \Gamma(A_1) + \Gamma(A_2) = \Gamma(A_3)$,

(iii) $kA_1 = A_2 \Longrightarrow k\Gamma(A_1) = \Gamma(A_2)$.

A representação é *fiel* se cada elemento de $\mathscr{A}$ tiver uma representação matricial distinta de todos os demais elementos, $A_i \neq A_j \Longrightarrow \Gamma(A_i) \neq \Gamma(A_j)$, $\forall\, A_i,\ A_j \in \mathscr{A}$.

Dizemos que a representação $\Gamma(\mathscr{A})$ é *redutível* se ela puder ser levada à forma de blocos por uma transformação não singular U,

$$\Gamma(A) \rightarrow U\Gamma(A)U^{-1} = \begin{bmatrix} \Gamma_1(A) & 0 \\ 0 & \Gamma_2(A) \end{bmatrix} , \forall A \in \mathscr{A} .$$

Neste caso dizemos que a representação Γ é a soma direta de Γ_1 e Γ_2 e escrevemos $\Gamma(\mathscr{A}) = \Gamma_1(\mathscr{A}) + \Gamma_2(\mathscr{A})$. Se uma representação não puder ser levada à forma de blocos diagonais por uma transformação não singular, ela será dita *irredutível*.

Teorema A.6.1 - Se os elementos de uma álgebra semi-simples $\mathscr{A}$ com base matric $\{e^{\alpha}_{rs}$, α, r, s, variando$\}$ forem expandidos em termos da base matric como

$$A = \sum_{\alpha r s} \Gamma_{\alpha}(A)_{rs}\, e^{\alpha}_{rs} ,$$

então as matrizes $\Gamma_{\alpha}(A)$ $(A \in \mathscr{A})$ com o (r,s)-ésimo elemento sendo $\Gamma_{\alpha}(A)_{rs}$, formarão uma representação irreduzível de $\mathscr{A}$.

- Para mostrar que as matrizes $\Gamma(A)$ formam uma representação, vejamos que:

$$\sum_{\alpha r s} \Gamma_{\alpha}(A_1A_2)_{rs} = A_1A_2 = \sum_{\substack{\alpha r u \\ \beta t s}} \Gamma_{\alpha}(A_1)_{ru}\, \Gamma_{\beta}(A_2)_{ts}\, e^{\alpha}_{ru}\, e^{\beta}_{ts}$$

mas $e^{\alpha}_{ru}\, e^{\beta}_{ts} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{ut} e^{\alpha}_{rs}$, então:

$$A_1A_2 = \sum_{\alpha r s} \sum_{t} \Gamma_{\alpha}(A_1)_{rt}\, \Gamma_{\beta}(A_2)_{ts}\, e^{\alpha}_{rs}$$

Mas os e^{α}_{rs} são linearmente independentes,

$$\Gamma_\alpha(A_1A_2)_{rs} = \sum_t \Gamma_\alpha(A_1)_{rt}\ \Gamma_\alpha(A_2)_{ts} .$$

Como a representação de e^β_{tu} em $\Gamma_\alpha(A)$ é:

$$\Gamma_\alpha(e^\beta_{tu})_{rs} = \delta_{\alpha\beta}\ \delta_{rt}\ \delta_{us} ,$$

então $\Gamma_\alpha(A)$ é uma representação dada por matrizes de dimensão $|\Gamma_\alpha|^2$. Ela forma uma álgebra de dimensão $|\Gamma_\alpha|^2$ a qual não pode ser mudada por uma transformação não singular, como aconteceria se $\Gamma_\alpha(A)$ fosse diagonalizável a blocos. Assim, $\Gamma_\alpha(A)$ é irredutível.

A seguir, demonstraremos um teorema que nos permitirá encontrar as relações de ortogonalidade e completicidade das irreps de um grupo $\mathbb{G}$, sem utilizar o caminho convencional via lema de Schur.

Teorema A.6.2 - Os elementos da base matric de uma álgebra de grupos são dados por:

$$e^\alpha_{rs} = (|\Gamma_\alpha|/|\mathbb{G}|) \sum_{g\in\mathbb{G}} \Gamma^\alpha(g^{-1})_{sr}\ g .$$

- Como $\mathbb{G}$ é uma base para a álgebra de grupo $\mathcal{A}(\mathbb{G})$, os elementos da base matric podem ser expandidos como:

$$e^\alpha_{rs} = \sum_{g\in\mathbb{G}} c_g(e^\alpha_{rs})\ g ,$$

mas

$$g\ e^\alpha_{rs} = \sum_{g'\in\mathbb{G}} c_{g'}(e^\alpha_{rs})\ g\ g' .$$

Fazendo $gg' = g'' \Longrightarrow g' = g^{-1}g''$, temos:

$$g\ e^{\alpha}_{rs} = \sum_{g''\in\mathbb{G}} c_{(g^{-1}g'')}(e^{\alpha}_{rs})\ g''$$

$$= \sum_{g''\in\mathbb{G}} c_{(g^{-1}g'')}(e^{\alpha}_{rs}) \sum_{\beta tu} \Gamma_{\beta}(g'')_{tu}\ e^{\beta}_{t}\ . \qquad (a)$$

E

$$g\ e^{\alpha}_{rs} = \sum_{\beta tu} \Gamma_{\beta}(g)_{tu}\ e^{\beta}_{tu}\ e^{\alpha}_{rs} = \sum_{\beta tu} \Gamma_{\beta}(g)_{tu}\ \delta_{\alpha\beta}\ \delta_{ur}\ \overset{\alpha}{e}_{ts}$$

$$= \sum_{t} \Gamma_{\alpha}(g)_{tr}\ e^{\alpha}_{ts} = \sum_{g''\in\mathbb{G}} \sum_{t} \Gamma_{\alpha}(g)_{tr}\ c_{g''}(e^{\alpha}_{ts})\ g''. \quad (b)$$

Comparando as eqs. (a) e (b), primeiro sobre a base do grupo,

$$c_{(g^{-1}g'')}(e^{\alpha}_{rs}) = \sum_{t} \Gamma_{\alpha}(g)_{tr}\ c_{g''}(e^{\alpha}_{ts}) \qquad (c)$$

e sobre a base matric,

$$\sum_{g''\in\mathbb{G}} c_{(g^{-1}g'')}(e^{\alpha}_{rs})\ \Gamma_{\beta}(g'')_{tu} = \delta_{\alpha\beta}\ \delta_{us}\ \Gamma_{\alpha}(g)_{tr}\ . \qquad (d)$$

Fazendo $g'' = g$ na eq. (c), temos:

$$c_{1}(e^{\alpha}_{rs}) = \sum_{t} \Gamma_{\alpha}(g)_{tr}\ c_{g}(e^{\alpha}_{ts}) \qquad (e.1)$$

e

$$g\ c_{1}(e^{\alpha}_{rs}) = \sum_{t} \sum_{g\in\mathbb{G}} \Gamma_{\alpha}(g)_{tr}\ c_{g}(e^{\alpha}_{ts})\ , \qquad (e.2)$$

com $g = 1$, $\alpha = \beta$ e $r = t$ na eq. (d), temos:

$$\sum_{g''\in\mathbb{G}} c_{g''}(e^{\alpha}_{ts})\ \Gamma_{\alpha}(g'')_{tu} = \delta_{us}\ \Gamma_{\alpha}(1)_{tt} = \delta_{us}\ . \qquad (f.1)$$

E assim,

$$\sum_{t}\sum_{g''\in\mathbb{G}} c_{g''}(e^{\alpha}_{ts})\ \Gamma_{\alpha}(g'')_{tu} = |\Gamma_{\alpha}|\ \delta_{us}\ . \qquad (f.2)$$

Comparando as eqs. (e) e (f),

$$g\ c_{1}(e^{\alpha}_{rs}) = |\Gamma_{\alpha}|\ \delta_{rs}\ ,$$

e, fazendo novamente g″ = g na eq. (c) obtemos

$$\sum_{r}\Gamma_{\alpha}(g^{-1})_{ru}\Big[\sum_{t}\Gamma_{\alpha}(g)_{tr}\ c_{g}(e^{\alpha}_{ts})\Big] = \sum_{r}\Gamma_{\alpha}(g^{-1})_{ru}\ c_{1}(e^{\alpha}_{rs})$$

$$=\sum_{r}\Gamma_{\alpha}(g^{-1})_{ru}\ (|\Gamma_{\alpha}|/|\mathbb{G}|)\ \delta_{rs} = \Gamma_{\alpha}(g^{-1})_{su}(|\Gamma_{\alpha}|/|\mathbb{G}|)\ ,$$

$$c_{g}(e^{\alpha}_{us}) = \sum_{t}\Gamma_{\alpha}(gg^{-1})_{tu}\ c_{g}(e^{\alpha}_{ts})$$

$$= (|\Gamma_{\alpha}|/|\mathbb{G}|)\ \Gamma_{\alpha}(g^{-1})_{su}\ ,$$

o que completa a prova.

A.7- Relações de Ortogonalidade

Agora vamos obter o teorema de ortogonalidade para as representações matriciais do grupo.

Teorema A.7.1 - Para uma álgebra de grupo $\mathcal{A}(\mathbb{G})$ as irreps satisfazem:

$$\sum_{g\in\mathbb{G}}\Gamma_{\alpha}(g^{-1})_{sr}\ \Gamma_{\beta}(g)_{vt} = (|\mathbb{G}|/|\Gamma_{\alpha}|)\ \delta_{\alpha\beta}\ \delta_{vr}\ \delta_{st}$$

- Do teorema A.6.2 temos

$$e^{\alpha}_{rs} = (|\Gamma_{\alpha}|/|\mathbb{G}|) \sum_{g\in\mathbb{G}} \Gamma_{\alpha}(g^{-1})_{sr}\, g \ ,$$

e

$$e^{\beta}_{tu} = (|\Gamma_{\beta}|/|\mathbb{G}|) \sum_{g'\in\mathbb{G}} \Gamma_{\beta}(g'^{-1})_{ut}\, g' \ .$$

Assim,

$$e^{\alpha}_{rs}\, e^{\beta}_{tu} = (|\Gamma_{\alpha}||\Gamma_{\beta}|/|\mathbb{G}|^2) \sum_{g,g'\in\mathbb{G}} \Gamma_{\alpha}(g^{-1})_{sr} \ \times$$

$$\times \ \Gamma_{\beta}(g'^{-1})_{ut}\, g\, g' \ .$$

Tomando $g\, g' = g''$ teremos,

$$e^{\alpha}_{rs}\, e^{\beta}_{tu} = (|\Gamma_{\alpha}||\Gamma_{\beta}|/|\mathbb{G}|^2) \sum_{g'',g\in\mathbb{G}} \Gamma_{\alpha}(g^{-1})_{sr} \ \times$$

$$\times\ \Gamma\ ((g''^{-1})g)\ g'' \ ,$$

mas também,

$$e^{\alpha}_{rs} e^{\beta}_{tu} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{st} e^{\alpha}_{ru}$$

$$= \delta_{\alpha\beta}\delta_{st}(|\Gamma_{\alpha}|/|\mathbb{G}|)\sum_{g''\in\mathbb{G}} \Gamma_{\alpha}((g'')^{-1})_{ur}\ g'' \ .$$

Comparando os coeficientes dos elementos do grupo

$$(|\Gamma_{\beta}|/|\mathbb{G}|)\sum_{g\in\mathbb{G}} \Gamma_{\alpha}(g^{-1})_{sr}\Gamma_{\beta}((g'')^{-1}g)_{dt} =$$

$$= \delta_{\alpha\beta}\delta_{st}\Gamma_{\alpha}((g'')^{-1})_{ur} \ ,$$

multiplicando por $\Gamma_{\beta}(g'')_{vu}$ e somando sobre u,

$$(|\Gamma_\beta|/|\mathbb{G}|)\sum_{\substack{g\in\mathbb{G}\\u}}\Gamma_\alpha(g^{-1})_{sr}\,\Gamma_\beta(g'')_{vu}\,\Gamma_\beta((g'')^{-1}g)_{ut}=$$

$$=\delta_{\alpha\beta}\,\delta_{st}\sum_u\Gamma^\beta(g'')_{vu}\,\Gamma^\alpha((g'')^{-1})_{ur}\,,$$

$$(|\Gamma_\beta|/|\mathbb{G}|)\sum_{g\in\mathbb{G}}\Gamma_\alpha(g^{-1})_{sr}\,\Gamma_\beta(g''(g'')^{-1}g)_{vt}=$$

$$=\delta_{\alpha\beta}\,\delta_{st}\,\Gamma^\beta(g''(g'')^{-1})_{vr}\,.$$

Finalmente

$$(|\Gamma_\alpha|/|\mathbb{G}|)\sum_{g\in\mathbb{G}}\Gamma_\alpha(g^{-1})_{sr}\,\Gamma_\beta(g)_{vt}=\delta_{\alpha\beta}\,\delta_{st}\,\delta_{vr}\,. \qquad (A.7.1)$$

Os teoremas A.6.1, A.6.2 e A.7.1 proporcionam os resultados da teoria de representações das álgebras de grupos. Dentre estes resultados, o teorema da ortogonalidade das irreps é frequentemente mostrado via lema de Schur. Os e^α_{rs} são definidos através do teorema A.6.2 e as regras de multiplicação da base matric são mostradas seguindo o teorema da ortogonalidade.

Definindo o *traço* da α-ésima irrep de um elemento A de uma álgebra semi-simples como

$$\chi^\alpha(g) = \sum_{i=1}^{f^\alpha}\Gamma^\alpha(g)_{ii}$$

vemos que a relação de ortogonalidade para os traços segue diretamente do teorema A.7.1 fazendo r = s, w = t, e somando sobre r e t na relação

$$\sum_g\Gamma_\alpha(g^{-1})_{sr}\,\Gamma_\beta(gg_0)_{vt}\,,$$

obtemos

$$(1/|\mathbb{G}|) \sum_{g\in\mathbb{G}} \chi^{\alpha}(g)^{*} \chi^{\beta}(gg_{o}) = \delta_{\alpha\beta} (\chi^{\alpha}(g_{o})/\chi^{\alpha}(1)) .$$

A.8- Relações de Completeza

Das definições anteriores temos que

$$1 = \sum_{\alpha,r} e^{\alpha}_{rr} ,$$

e usando a expressão de e^{α}_{rr} em função dos elementos de matriz de Γ_{α} obtemos:

$$\mathbf{1} = (1/|\mathbb{G}|) \sum_{\alpha} |\Gamma_{\alpha}| \sum_{g\in\mathbb{G}} \chi^{\alpha}(g)^{*} g .$$

Se definirmos a ação dos elementos $g \in \mathbb{G}$ sobre o espaço de coordenadas x_i como sendo $g\, f(\vec{x}) = f(g^{-1} \vec{x}) = f(x')$ para qualquer função contínua de $\vec{x}$, aplicando $\mathbf{1}$ obtemos

$$f(\vec{x}) = \sum_{g\in\mathbb{G}} [(1/|\mathbb{G}|)\sum_{\alpha} |\Gamma_{\alpha}| \chi^{\alpha}(g)^{*}] f(\vec{x}') ,$$

mostrando que o termo entre parênteses na expressão pode ser exprimido da seguinte forma:

$$(1/|\mathbb{G}|) \sum_{\alpha} |\Gamma_{\alpha}| \chi^{\alpha}(g)^{*} = \delta_{g,\mathbf{1}} . \qquad (A.8.1)$$

Uma vez que $\chi^{\alpha}(\mathbf{1}) = |\Gamma_{\alpha}|$, o resultado anterior permite obter o teorema de Burnside que toma a forma

$$(1/|\mathbb{G}|) \sum_{\alpha} \chi^{\alpha}(1)^2 = 1 \quad .$$

A equação (A.8.1) parece ser um caso particular, com $g_i = \mathbf{1}$, da relação

$$(|\mathscr{C}(g_i)|/|\mathbb{G}|) \sum_{\alpha} \chi^{\alpha}(g_i)\ \chi^{\alpha}(g_j)^* = \delta_{ij} \ , \qquad (A.8.2)$$

comumente encontrada na literatura. Para mostrar que ambas são equivalentes usaremos a igualdade

$$\chi^{\alpha}(g_i)\ \chi^{\alpha}(g_j)^* = (\chi^{\alpha}(1)/|\mathbb{G}|) \sum_{g\in\mathbb{G}} \chi^{\alpha}(g_i g g_j^{-1} g^{-1}) \ , \qquad (A.8.3)$$

similar à eq. (5.1.6). Se somarmos sobre α em (A.8.3) e usarmos (A.8.2) obtemos:

$$\sum_{\alpha} \chi^{\alpha}(g_i)\ \chi^{\alpha}(g_j)^* = \sum_{g\in\mathbb{G}} (1/|\mathbb{G}|) \sum_{\alpha} \chi^{\alpha}(1)\chi^{\alpha}(g_i g g_j^{-1} g^{-1}) =$$

$$= \sum_{g\in\mathbb{G}} \delta_{g_i g g_j^{-1} g^{-1}, \mathbf{1}} = C_{\mathbb{G}}(g_i)\ \delta_{i,j} = (|\mathbb{G}|/|\mathscr{C}(g_i)|)\ \delta_{i,j} \ ,$$

que mostra a equivalência das relações de completeza expressas pelas equações (A.8.1) e (A.8.3).

A relação entre o procedimento desenvolvido aqui e o padrão pode ser melhor visualizada considerando-se a geração algébrica das representações pela ação da álgebra sobre um espaço vetorial. Seguindo este caminho podemos ver que a teoria das representações está implicita na estrutura algébrica e vice-versa.

A.9- Lema de Schur

Suponhamos que existe uma matriz **A** tal que $A\Gamma(g) = \Gamma(g)A$ para todo $g \in \mathbb{G}$. Da definição da base "matric" $e^{\Gamma}_{\beta\gamma}$, podemos calcular

$$\sum_{\beta} A^{*}_{\alpha\beta}\; e^{\Gamma}_{\beta\gamma} = \sum_{\beta} e^{\Gamma}_{\alpha\beta}\; A^{*}_{\beta\gamma} \; . \tag{A.9.1}$$

Multiplicando ambos os membros desta equação por $e^{\Gamma}_{\mu\nu}$ e usando o teorema A.5.1 encontramos que

$$\Big(\sum_{\beta} A^{*}_{\alpha\beta}\; e^{\Gamma}_{\beta\nu} \Big)\; \delta_{\gamma\mu} = A^{*}_{\mu\gamma}\; e^{\Gamma}_{\alpha\nu} \tag{A.9.2}$$

No caso $\gamma \neq \mu$ esta equação se transforma em

$$A^{*}_{\gamma\mu}\; e^{\Gamma}_{\alpha\nu} = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad A^{*}_{\gamma\mu} = 0 \;, \quad \gamma \neq \mu \;, \tag{A.9.3}$$

e se $\gamma = \mu$, usando o resultado de (A.9.3) em (A.9.2), temos que

$$A^{*}_{\alpha\alpha}\; e^{\Gamma}_{\alpha\nu} = A^{*}_{\mu\mu}\; e^{\Gamma}_{\alpha\nu} \qquad \Longrightarrow \qquad A^{*}_{\alpha\alpha} = A^{*}_{\mu\mu} \; . \tag{A.9.4}$$

De (A.9.3) e (A.9.4) concluímos que a matriz **A** é um múltiplo da matriz identidade: $A = \lambda I$. Então, uma matriz **A**, arbitrária, que comuta com todas as matrizes de uma representação $\Gamma(\mathbb{G})$, é um múltiplo da matriz identidade. Este resultado é conhecido como Primeiro Lema de Schur.

REFERÊNCIAS

[1] - ARMSTRONG, M. A., *Groups and Symmetry*, Springer-Verlag New York Inc, New York, 1988.

[2] - AZEVEDO, A. & PICCININI, R., *Introdução à Teoria dos Grupos*, Monografias de Matemática nº 1, IMPA-CNPq, Rio de Janeiro, 1969.

[3] - BURNSIDE, W., *Theory of Groups of Finite Order*, Dover Publications Inc., New York, 1955.

[4] - KUROSH, A. G., *The Theory of Groups* - Vol 1, Chelsea Publishing Company, New York, 1960.

[5] - KUROSH, A. G., *The Theory of Groups* - Vol 2, Chelsea Publishing Company, New York, 1960.

[6] - ROBINSON, D. J., *A Course in the Theory of Groups*, Springer-Verlag New York Inc, New York, 1982.

[7] - ROSE, J. S., *A Course on Group Theory*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1978.

[8] - ROTMAN. J. J., *The Theory of Groups: An Introduction*, 2^{nd} Ed., Allyn and Bacon Inc., Boston, 1973.

[9] - SCOTT, W. R., *Group Theory*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1964.

[10] - SUZUKI, M., *Group Theory* I, Springer-Verlag New York Inc, New York, 1982.

[11] - SUZUKI, M., *Group Theory* II, Springer-Verlag New York Inc, New York, 1986.

[12] - ALTMAN, S. L., *Induced Representations in Crystals and Molecules*, Academic Press Inc, London, 1977.

[13] - BRADLEY, C. J. & CRACKNELL, A. P., *The Mathematical Theory Of Symmetry in Solids*, Oxford University Press, Oxford, 1972.

[14] - BUTLER, P. H., *Point Group Symmetry Applications*, Plenum Press, New York, 1981.

[15] - CHESNUT, D. B., *Finite Groups and Quantum Theory*, John Wiley & Sons Inc, New York, 1974.

[16] - CORNWELL, J. F., *Group Theory in Physics*, Vol 1, Academic Press Inc, London, 1984.

[17] - CRACKNELL, A. P., *Group Theory in Solid-State Physics*, Taylor & Francis LTD, London, 1975.

[18] - FLURRY Jr, Robert L., *Symmetry Groups*, Prentice-Hall, Inc, New Jersey, 1980.

[19] - JANSEN, L. & BOON, M., *Theory of Finite Groups: Applications in Physics*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1967.

[20] - KRAMER, P., (Mario Dal Cin Eds) *Groups, Systems and Many-Body Physics*, Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig, 1980.

[21] - TUNG, Wu-Ki, *Group Theory in Physics*, World Scientific Publishing Co Pte LTD, Philadelphia, 1985.

[22] - HAMERMESH, M., *Group Theory and its Application to Physical Problems*, Addison-Wesley Publishing Company Inc, Reading, Mass., 1962.

[23] - Vide Ref [13], p 43.

[24] - Vide Ref [12], p 104.

[25] - BURNS, G. R. & GLAZER, A. M., *Space Groups for Solid State Scientists*, Academic Press Inc, New York, p 36 (1978).

[26] - Vide Ref [13], p 37.

[27] - Vide Ref [13], p 569.

[28] - Vide Ref [22], p 92.

[29] - COLEMAN, A. J., em *Group Theory and its Applications* (E. M. Loebl ed) Vol 1, p 57, Academic Press Inc, New York, 1868.

[30] - Vide Ref [12], p 137-150 e Ref [19], p 133-162.

[31] - BOERNER, H., *Representations of Groups*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, p 96-108, 1970.

[32] - Vide Ref [6], p 52.

[33] - Vide Ref [6]. p 53.

[34] - CARIDE, A. O. & ZANETTE, S. I., Mol. Phys. 56, 1, 79-81 (1985).

[35] - WIGNER, E P, *Group Theory*, Academic Press Inc, New York, p 119, 1959.

[36] - LÖWDIN, P-O., Rev. Mod. Phys. 39, 259 (1967).

[37] - GRIFFITH, J. S., *The Theory of Transition Metal Ions*, Cambridge Univ. Press, New York, 1964.

[38] - WIGNER, E. P., in *Spectroscopic and Group Theoretical Methods in Physics* (F. Bloch et al, ed.) p 131, North-Holland Publ. Co, Amsterdan, 1968.

[39] - KLEIN, J. S., CARLISLE, C. H. & MATSEN, F.A., em *Advances in Quantum Chemistry* (P-O. Löwdin ed) Vol 5, p 219, Academic Press Inc, New York, 1970.

[40] - MATSEN, F. A. & PLUMER, O. R., em *Group Theory and its Applications* (E. M. Loebl eds.) Vol 1, p 221, Academic Press Inc, New York, 1968.

[41] - Vide Ref [10], p 43-44.

[42] - CARIDE, A. O., ZANETTE, S. I. & NOGUEIRA, S. R. A., Notas de Fisica - CBPF -NF 021/87, RJ, Brasil (1987).

[43] - Vide Ref [11], p 265.

[44] - Vide Ref [29].

[45] - Vide Ref [6], p 301-341 e Ref [10], p 192-230.

[46] - Vide Ref [13], p 25-9.

[47] - Vide ref [5], p 158-165 e ref [7], p 58-109.

[48] - Vide ref [6],p 135.

[49] - Vide ref [5], p 162.

[50] - Vide ref [7], p 89.

[51] - Vide ref [6], p 135.

[52] - Vide ref [3], p 110-111.

[53] - Vide ref [6], p 131.

[54] - Vide ref [11], p 104.

[55] - NOGUEIRA, S. R. A., CARIDE, A. O. & ZANETTE, S. I., Bull. Mag. Res. 08, n°314, 208 (1986).

[56] - Vide ref [13], p 569.

[57] - Vide ref [13], p 575.

[58] - LEE W. & CHEN K., J Phys A: Math Gen 19, 2935 (1986)

[59] - CHEN, J. Q., GAO, M. J., MA, G. Q., Rev. of Mod. Phys. 57, 211 (1985)

[60] - MATSEN, F. A., em *Group Theory and Its Applications* (E. M. Loebl ed.) Vol 3, p 143, Academic Press Inc, New York, 1975.

[61] - Vide ref [19], p 148.

[62] - Vide ref [6], p 235-239.

[63] - MULLIKEN, R. S., Phys. Rev. 43, 279-302 (1933).

[64] - Vide Ref [13], p 201.

[65] - Vide ref [55].

[66] - PING, J. L., ZHENG, Q. R., CHEN, B. Q. & CHEN, J. Q., Computer Phys. Comm. 52, 355 (1989).

[67] - NOGUEIRA, S. R. A., CARIDE, A. O. & ZANETTE, S. I., J. Phys. A 21, 1321 (1988).

[68] - BAAKE, M., GEMÜNDEN, B. & OEDINGEN, R., J. Math. Phys. 23(6), 944 (1982).

[69] - Vide Ref. [8], p 116.

[70] - JANSSEN, T. & JANNER, A., Adv. Phys. 36, n° 5, 519-624 (1987).

[71] - KLEIN, D. J., em *Group Theory and its Applications*, (E. M. Loebl ed.) Vol 3, p 1, Academic Press Inc, New York, 1975.

[72] - Vide Ref [69] p 6-7.

"MÉTODOS DE CÁLCULO DA TEORIA DOS GRUPOS PARA A MATÉRIA CONDENSADA"

SONIA REGINA ALVES NOGUEIRA DE SÁ

Tese de Doutorado apresentada ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes professores:

Susana Isabel Zanette de Caride
Presidente

Horácio Carlos Panepucci

Rudolf Richard Maier

Antonio Fernandes da Fonseca Teixeira

Jorge Silvio Helman

Rio de Janeiro, 21 de setembro de 1990