Título em Português:	Bases da Teoria da Representação e Aplicações em Física
Título em Inglês:	basics representation theory and applications to physics
Autor:	Vinicius Pereira Pinto
Instituição:	Universidade de São Paulo
Unidade:	Instituto de Física de São Carlos
Orientador:	Igor Mencattini
Área de Pesquisa / SubÁrea:	Física Geral
Agência Financiadora:	CNPq - PIBIC

29º SIICUSP

Bases da Teoria da Representação e Aplicações em Física

Vinícius Pereira Pinto

Igor Mencattini

Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

viniciusppinto@usp.br

Objetivos

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

Este projeto tem como objetivo expor o estudante a bases da teoria da representação de grupos de Lie compactos com o intuito de analisar os orbitais eletrônicos e o momento angular dos modelos atômicos, com ênfase no caso particular do átomo de hidrogênio, uma vez que sua generalização fornece análises para outros átomos e permite a introdução da tabela periódica dos elementos. Por isso, este trabalho apresenta um extenso desenvolvimento das ferramentas matemáticas, a aplicação para simetria esférica do átomo de hidrogênio, a forma funcional do potencial de Coulomb e uma visualização dos orbitais atômicos a partir da representação da função de onda do elétron por harmônicos esféricos.

Metodologia

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

O estudo se resume nos seguintes pontos:

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

Aplicações

Há uma representação natural e irredutível do grupo *SO(3)* no subespaço dos polinômios harmônicos de grau l de três variáveis. Tem-se que todo polinômio na 2-esfera em $\mathbb{R}^3$ pode ser escrito como uma soma de polinômios harmônicos. Qualquer função de $L^2(\mathbb{R}^3)$ pode ser aproximada por uma soma finita de termos da forma $f(r)g(\theta,\varphi)$.

Isso implica que o movimento do elétron no átomo de hidrogênio tem uma previsão específica, como os subespaços invariantes, irredutíveis e não triviais correspondem aos estados elementares do átomo de hidrogênio.

Com a álgebra de simetria do átomo de Hidrogênio, é possível fazer predições sobre os níveis de energia do mesmo. Uma vez que a energia é invariante por rotação, todo subnível deve pertencer a um nível de energia.

nível de energia	subnível	dimensão
menor	s	2
2º e 3º menor	$s,\ p$	8
4º e 5º menor	$s,\ p,\ d$	18
6º e 7º menor	$s,\ p,\ d,\ f$	32
⋮	⋮	⋮

Figura 1: Tabela com níveis de energia do átomo de Hidrogênio e suas dimensões

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

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

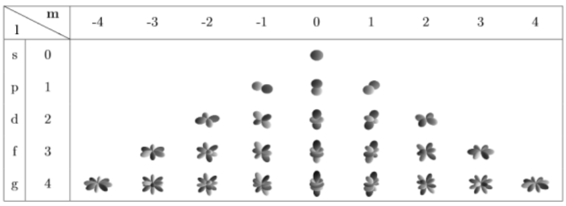

Figura 2: Tabela com visualizações das soluções dos Harmônicos Esféricos em três dimensões

Conclusão

No trabalho foi apresentado uma série de definições que permitem caracterizar simetrias de sistemas quânticos a partir de representações unitárias do grupo de simetrias, estudando também o significado de subespaços invariantes e representações irredutíveis.

Para estudos de sistemas quânticos, se estabelece um espaço vetorial que modela os estados de tais sistema, permitindo definir representações naturais a partir de um grupo de simetria.

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

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

Referências Bibliográficas

[1] S. F. SINGER, Linearity, Symmetry, and Prediction in the Hydrogen Atom, Undergraduate Texts in Mathematics: Springer, 2005.

[2] S. STERNBERG, Group Theory and Physics, Cambridge: Cambridge University Press, 1994.

[3] A. BEISER, Concepts of Modern Physics, New York: McGraw-Hill, 2003.

Bases of Representation Theory and Applications in Physics

Vinícius Pereira Pinto

Igor Mencattini

São Carlos Institute of Physics/University of São Paulo

viniciusppinto@usp.br

Objectives

The theory of group representation has a wide list of applications in mathematics, physics and chemistry, some of them being the analysis of atomic structures, crystallography and the classification of symmetries of a physical system. This theory makes use of linear and abstract algebra and combined analysis that form mathematical bases of quantum mechanics, allowing the predictions of the elementary states of quantum systems from their symmetries.

This project aims to expose the student to the basis of the theory of the representation of compact Lie groups in order to analyze the electronic orbitals and the angular momentum of the atomic models, with emphasis on the particular case of the hydrogen atom, since its generalization provides analyses for other atoms and allows the introduction of the periodic table of elements. Therefore, this work presents an extensive development of mathematical tools, the application for spherical symmetry of the hydrogen atom, the functional form of Coulomb's potential and a visualization of atomic orbitals from the representation of the electron wave function by spherical harmonics.

Methods

The research methodology consists of a directed study of the **book Linearity, Symmetry, and Prediction** in the **Hydrogen Atom** by Singer [1] which is the main reference. In particular, the representation of the elementary states of physical systems, more specifically quantum systems, was first analyzed, which, in a second stage, was applied to the case of hydrogen atom.

The study boils down to the following points:

1. Study of Groups, Representations, Lie Algebras and Representations of Lie Algebras, presenting definitions and properties.
2. Discussion on Representation and Elementary States of physical systems, more specifically quantum systems.
3. Applications of Representation Theory for the Hydrogen Atom and definitions used in the Periodic Table.
4. Study of applications for visualization of atomic orbitals calculating probability density of electron wave function using spherical harmonic representation.

Applications

There is a natural and irreducible representation of the SO(3) group in the subspace of the three-variable grade l harmonic polynomials. It has been that every polynomial in the 2-sphere in $\mathbb{R}^3$ can be written as a sum of harmonic polynomials. Any function of $L^2(\mathbb{R}^3)$ can be approximated by a finite sum of terms of form $f(r)g(\theta,\varphi)$.

This implies that the movement of the electron in the hydrogen atom has a specific prediction, as the invariant, irreducible and non-trivial subspaces correspond to the elemental states of the hydrogen atom.

With the symmetry algebra of the Hydrogen atom, it is possible to make predictions about the energy levels of the hydrogen atom. Since energy is invariant by rotation, every sublevel must belong to an energy level.

nível de energia	subnível	dimensão
menor	s	2
2º e 3º menor	$s,\ p$	8
4º e 5º menor	$s,\ p,\ d$	18
6º e 7º menor	$s,\ p,\ d,\ f$	32
⋮	⋮	⋮

Figure 1: Table with energy levels of the Hydrogen atom and its dimensions

The size of the energy levels present a pattern, are twice as perfect squares. This is a consequence of Schrödinger's operator. The Coulombian potential allows to find a hidden symmetry that does not correspond to spatial symmetry. We also have that the Hamiltonian energy eigenspace of the hydrogen atom must be a representation of Lie's algebra *so(4).*

With this, it is possible to obtain a list of allowed energy levels and their representations, and their dimensions with the two of the spin will give the number of elements of each row of the periodic table.

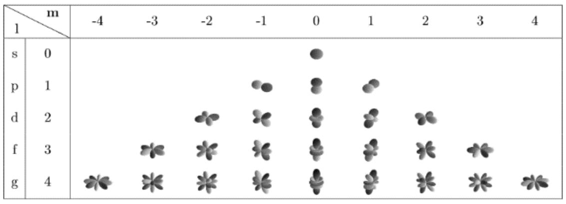

Figure 2: Table with visualizations of the solutions of the spherical harmonics in three dimensions

Conclusions

In the work, a series of definitions were presented that allow to characterize symmetries of quantum systems from unitary representations of the symmetries group, also studying the meaning of invariant subspaces and irreducible representations.

For studies of quantum systems, a vector space is established that models the states of such systems, allowing to define natural representations from a symmetry group.

Every quantum system has elementary states and these must be independent ofobservers. That is, any observer should be able (in theory) to recognize a state experimentally and all observers must agree. In addition, an elementary state must be indivisible and cannot be an overlay of two other states. With this, if you define a model in which every recognizable state corresponds to a vector subspace of the system state space, then it can be concluded that the elementary states correspond to irreducible representations. This independence of the observer's choice forces subspace to be invariant over representation.

So, to make concrete predictions of a quantum system, just classify its irreducible representations of the symmetry group.

References

[1] S. F. SINGER, Linearity, Symmetry, and Prediction in the Hydrogen Atom, Undergraduate Texts in Mathematics: Springer, 2005.

[2] S. STERNBERG, Group Theory and Physics, Cambridge: Cambridge University Press, 1994.

[3] A. BEISER, Concepts of Modern Physics, New York: McGraw-Hill, 2003.