

## Trabalho



<b>Título em Português:</b>	Representações irredutíveis de grupos finitos.
<b>Título em Inglês:</b>	Irreducible representations of finite groups
<b>Autor:</b>	Eduardo Zago Braga
<b>Instituição:</b>	Universidade de São Paulo
<b>Unidade:</b>	Instituto de Física de São Carlos
<b>Orientador:</b>	Esmerindo de Sousa Bernardes
<b>Área de Pesquisa / SubÁrea:</b>	Áreas Clássicas de Fenomenologia e suas Aplicações
<b>Agência Financiadora:</b>	USP - Programa Unificado de Bolsas



## **Representações irreduzíveis de grupos finitos**

**Estudante: Eduardo Zago Braga**

**Orientador: Esmerindo de Sousa Bernardes**

Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo (IFSC - USP)

[zaago@usp.br](mailto:zaago@usp.br)

### **Objetivos**

O projeto visa construir, por meio de computação algébrica, as representações irreduzíveis (irreps) dos grupos finitos de simetria  $D_{6h}$  e  $O_h$ . Estes grupos são de grande relevância para áreas como Física do Estado Sólido e Spintrônica. O método central utilizado é o dos Conjuntos Completos de Operadores Comutantes (CCOC). Um objetivo secundário é a criação de uma metodologia documentada e acessível que possa ser utilizada por outros estudantes.

### **Métodos e Procedimentos**

A metodologia aplicada é a implementação computacional do método CCOC para derivar as representações irreduzíveis. O procedimento inicia com a definição da estrutura algébrica do grupo, identificando todos os seus elementos e separando-os em suas respectivas classes de conjugação. Em seguida, adota-se a representação regular, na qual o espaço vetorial é formado pelos próprios elementos do grupo, e cada operador é representado por uma matriz de permutação.

Os operadores de classe são construídos pela soma das matrizes correspondentes aos elementos de uma mesma classe. Para resolver a degenerescência em representações multidimensionais, o conjunto de operadores é expandido utilizando-se uma cadeia de

subgrupos, formando assim o CCOC. Este conjunto de matrizes é então diagonalizado simultaneamente via computação algébrica. Os autovetores resultantes formam a base de simetria, e são agrupados de acordo com seus autovalores para identificar os subespaços invariantes de cada irrep. Por fim, as matrizes explícitas das representações irreduzíveis são construídas a partir da ação dos geradores do grupo sobre os vetores desta base de simetria.

### **Resultados**

Para a construção do projeto, foi feito um estudo preliminar no tópico de teoria de grupos e de representações; Em seguida, o método foi aplicado com sucesso para os grupos  $D_{6h}$  e  $O_h$ . Para o grupo  $D_{6h}$  (ordem 24), foram identificadas suas 12 classes de conjugação. A diagonalização do CCOC permitiu a construção de suas 8 representações unidimensionais e 4 bidimensionais ( $E_{1g}$ ,  $E_{2g}$ ,  $E_{1u}$ ,  $E_{2u}$ ), conforme previsto teoricamente. As matrizes explícitas para os geradores do grupo foram obtidas para cada irrep. Ao final, a tabela de caracteres completa do grupo foi gerada, validando os resultados.

Para o grupo  $O_h$  (ordem 48), um caso de maior complexidade, suas 10 classes de conjugação foram determinadas. A metodologia computacional derivou com sucesso as 10 representações irreduzíveis: 4 unidimensionais, 2 bidimensionais e 4 tridimensionais. A tabela de caracteres correspondente foi construída. Um resultado importante foi a interpretação



física da base de simetria, que demonstrou corresponder às combinações lineares de orbitais atômicos adaptadas à simetria cúbica, prevendo corretamente o desdobramento dos orbitais d em níveis de energia  $E_g$  (duplamente degenerado) e  $T_{2g}$  (triplamente degenerado) em um campo cristalino.

## Conclusões

O método computacional baseado no formalismo CCOC demonstrou ser uma abordagem robusta e sistemática para a derivação completa das representações irreduzíveis de grupos finitos complexos, como o  $D_{6h}$  e o  $O_h$ . A implementação foi capaz de gerar não apenas as tabelas de caracteres, mas também as matrizes de representação explícitas e, crucialmente, os vetores de base adaptados à simetria. Estes vetores têm interpretação física direta, como no desdobramento de níveis de energia de orbitais atômicos em campos cristalinos, um conhecimento fundamental para o cálculo de propriedades ópticas e magnéticas de materiais em spintrônica. O projeto cumpriu seu objetivo, estabelecendo um procedimento documentado e eficaz para a análise de simetria em sistemas físicos.

O autor declara não haver conflito de interesses.

## Referências

- [1] PING, J.; WANG, F.; CHEN, J. Group Representation Theory For Physicists (2nd Edition). World Scientific Publishing Company, 2002.
- [2] HAMERMESH, M. Group Theory and Its Application to Physical Problems. Addison Wesley Series in Physics, Dover Publications, 1989.



## **Irreducible representations of finite groups**

**Student: Eduardo Zago Braga**

**Supervisor: Esmerindo de Sousa Bernardes**

Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo (IFSC - USP)

[zaago@usp.br](mailto:zaago@usp.br)

### **Objectives**

This project aims to construct, through algebraic computation, the irreducible representations (irreps) of the finite symmetry groups  $D_{6h}$  and  $O_h$ . These groups are highly relevant in fields such as Solid State Physics and Spintronics. The core methodology is the Complete Sets of Commuting Operators (CSCO) method. A secondary goal is to create a documented and accessible method that can be utilized by other students.

### **Métodos e Procedimentos**

The theoretical foundation for this work is built upon the principles of group representation theory. The initial step involves a rigorous study of abstract group theory, including the definitions of groups, subgroups, conjugacy classes, and the structure of finite point groups relevant to physical symmetries, such as the dihedral and octahedral groups. The core of the methodology rests on the theory of linear representations, where group elements are mapped to linear operators acting on a vector space. Key concepts such as reducible and irreducible representations (irreps), the orthogonality of characters, and Maschke's theorem—which guarantees that any representation can be decomposed into a direct sum of irreps—are fundamental. This framework leads to the central concept of the

Complete Set of Commuting Operators (CSCO). The simultaneous diagonalization of these operators partitions the representation space into invariant subspaces, each corresponding to an irrep, with the eigenvectors forming a symmetry-adapted basis. The computational approach leverages these principles by constructing the operators within the regular representation, where the group elements themselves form the basis of the vector space.

The applied methodology is the computational implementation of the CSCO method to derive the irreducible representations. The procedure begins by defining the group's algebraic structure and partitioning its elements into their respective conjugacy classes. The left regular representation is then adopted, where the vector space is spanned by the group elements themselves, and each operator is represented by a permutation matrix.

Class operators are constructed by summing the matrices corresponding to the elements within the same class. To resolve degeneracy in multidimensional representations, the set of operators is expanded by using a chain of subgroups, thus forming the CSCO. This set of matrices is then simultaneously diagonalized using computational algebra systems. The resulting eigenvectors form the symmetry-adapted basis, which are grouped by their eigenvalues to identify the invariant subspaces for each irrep. Finally, the explicit representation matrices are constructed from the action of the group generators on these symmetry-adapted basis vectors.



## Resultados

The method was successfully applied to the  $D_{6h}$  and  $O_h$  groups.

For the  $D_{6h}$  group (order 24), its 12 conjugacy classes were identified. The CSCO diagonalization allowed for the construction of its 8 one-dimensional and 4 two-dimensional representations ( $E_{1g}$ ,  $E_{2g}$ ,  $E_{1u}$ ,  $E_{2u}$ ), as predicted by theory. Explicit matrices for the group generators were obtained for each irrep. The complete character table for the group was generated, validating the results.

## Conclusions

The computational method based on the CSCO formalism proved to be a robust and systematic approach for the complete derivation of irreducible representations of complex finite groups, such as  $D_{6h}$  and  $O_h$ . The implementation successfully generated not only the character tables but also the explicit representation matrices and the symmetry-adapted basis vectors. These vectors have a direct physical interpretation, such as in the energy level splitting of atomic orbitals in crystal fields, which is fundamental knowledge for calculating optical and magnetic properties of materials in spintronics and optoelectronics. The project fulfilled its objective by establishing an effective and documented procedure for symmetry analysis in physical systems.

The author declare no conflict of interest.

## References

- [1] PING, J.; WANG, F.; CHEN, J. Group Representation Theory For Physicists (2nd Edition). World Scientific Publishing Company, 2002.
- [2] HAMERMESH, M. Group Theory and Its Application to Physical Problems. Addison Wesley Series in Physics, Dover Publications, 1989.