

Grup Unitari

Josep Planelles

July 29, 2019

1 El grup $GL(n)$ de les transformacions lineals

Una transformació lineal és una funció F que té un rang i un domini que són espais vectorials, $F : V \rightarrow W$, de manera que:

$$\begin{aligned} F(u+v) &= F(u) + F(v) & \forall u, v \in V \\ F(\lambda v) &= \lambda F(v) & \forall v \in V, \lambda \in \mathbb{C} \end{aligned} \quad (1)$$

Per tant, fixades les bases de V i W , és immediat trobar la seua representació matricial $\mathbb{F}$. Per exemple, considerem $F : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2 / F(x, y, z) = (x + 2z, -y)$.

$\mathbb{F}$ serà una matriu 2×3 . Per trobar els seus elements $\mathbb{F}_{ij} = \langle v_i^{\mathbb{R}^2} | F | v_j^{\mathbb{R}^3} \rangle$ en la base natural de $\mathbb{R}^2$ $\{|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\}$, i la de $\mathbb{R}^3$ (la base anàloga en tres dimensions, que representem $\{|i\rangle, |j\rangle, |k\rangle\}$ o $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$), calcularem l'acció de F sobre la base de $\mathbb{R}^3$:

$$\begin{aligned} F|i\rangle &= F \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + 2 \times 0 \\ -0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ F|j\rangle &= F \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} \\ F|k\rangle &= F \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2)$$

i multiplicarem escalarment per la base $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ de $\mathbb{R}^2$. Per exemple,

$$\begin{aligned} \mathbb{F}_{11} &= \langle 1 | F | 1 \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot F(1, 0, 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \\ \mathbb{F}_{12} &= \langle 1 | F | 2 \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot F(0, 1, 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} = 2 \\ &\dots\dots\dots \\ \mathbb{F}_{23} &= \langle 2 | F | 3 \rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot F(0, 0, 1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = -1 \end{aligned} \quad (3)$$

Amb la qual cosa tenim que $\mathbb{F} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$. Efectivament:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x + 2z \\ -y \end{pmatrix}.$$

(vegeu, però, apèndix 1).

El cas més interessant és aquell en que V i W tenen la mateixa dimensió (o són el mateix espai). En tal cas, les matrius són quadrades i les transformacions automorfismes (canvis de base), cosa que assegura l'existència d'inverses (tornar a la base original) i, per tant, garanteix l'estructura de grup al conjunt de tots els canvis de base d'un espai vectorial n -dimensional que, en general, considerem complex ($\mathbb{C}$). Anomenem $GL(n)$ a aquest grup.

2 El grup $U(n)$ de les transformacions unitàries

Entre les transformacions lineals, aquelles que no alteren la longitud (o norma) d'un vector tenen una especial rellevància. S'anomenen transformacions unitàries U . Si representem per $|u\rangle$ un vector columna i per $\langle u|$ el seu traspost conjugat, tenim que si $U|u\rangle = |w\rangle$ aleshores, $\langle u|U^\dagger = \langle w|$, on $U^\dagger$ és la trasposta conjugada de U . Per tant, $\langle u|U^\dagger U|u\rangle = \langle w|w\rangle$. Si volem que $|u\rangle$ i $|w\rangle$ tinguin la mateixa norma haurem d'obligar que $U^\dagger U = \mathbb{I}$, on $\mathbb{I}$ és la matriu unitat. Ara, de la identitat $U = U(U^\dagger U) = (UU^\dagger)U$, trobem que $UU^\dagger = U^\dagger U$, cosa que juntament amb $U^\dagger U = \mathbb{I}$, permeten concloure que $U^\dagger = U^{-1}$.

Les matrius unitàries poden ser expressades com l'exponencial de matrius hermítiques (una matriu hermítica és aquella que és igual a la seua trasposta conjugada, $A^\dagger = A$, aquestes matrius tenen una especial rellevància en mecànica quàntica per ser la representació matricial d'operadors associats a magnituds físiques). En efecte, si $U = e^{iA}$ i A és hermítica, aleshores $U^\dagger = e^{-iA^\dagger} = e^{-iA}$. Per tant, $UU^\dagger = e^{iA}e^{-iA} = e^0 = \mathbb{I}$.

2.1 El grup $U(2)$ de les transformacions unitàries en dos dimensions

Una matriu $U(2)$ és l'exponencial d'una matriu hermítica $A(2 \times 2)$. Com $A = A^\dagger$, A ha de ser de la forma $\begin{pmatrix} a_1 & c - id \\ c + id & a_2 \end{pmatrix}$, on $a_1, a_2, c, d \in \mathbb{R}$ i $i = \sqrt{-1}$. Si escrivim $a_1 = a + b$, $a_2 = a - b$, podem expressar la matriu en la seua base natural:

$$\begin{pmatrix} a+b & c-id \\ c+id & a-b \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + d \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = a\mathbb{I} + b\sigma_z + c\sigma_x + d\sigma_y \quad (4)$$

on $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ són les anomenades matrius de Pauli. Per tant,

$$U = \exp[i(a\mathbb{I} + b\sigma_z + c\sigma_x + d\sigma_y)]. \quad (5)$$

Les matrius unitàries U conserven la norma del vector però poden introduir-li una fase complexa. En efecte,

$$\langle u|U^\dagger U|u\rangle = \langle u|u\rangle = \langle u|e^{-i\phi}e^{i\phi}|u\rangle \quad (6)$$

Per exemple, si $b = c = d = 0$, aleshores, $U = \exp[ia\mathbb{I}] = e^{ia}\mathbb{I}$, és a dir, U equival a multiplicar per la fase e^{ia} .

En general, $\det U = e^{i\phi}$. En efecte, tenint en compte les dues primeres de les següents propietats general del determinants,

$$\begin{aligned} \det(A \cdot B) &= \det(A) \cdot \det(B) \\ \det(A^\dagger) &= \det(A^*) = \det(A)^* \\ \det(e^A) &= e^{\text{tr}(A)} \end{aligned} \quad (7)$$

i el fet que $U^\dagger U = \mathbb{I}$, tenim que $\det(U^\dagger) \det(U) = 1$ i.e., $\det(U)^* \det(U) = 1 \rightarrow \det(U) = e^{i\phi}$.

El subgrup de $U(2)$ que inclou les transformacions unitàries de fase unitat s'anomena $SU(2)$. A partir de les propietats anteriors (7.1) i (7.3) trobem que $\det(U) = \det(e^{ia\mathbb{I}}) \cdot \det(e^{i[b\sigma_z + c\sigma_x + d\sigma_y]})$. Ara be, com les matrius de Pauli tenen traça zero, el segon determinant val la unitat, demanera que queda: $\det(U) = e^{ia}\det(\mathbb{I}) = e^{ia}$. Per tant, les matrius de $SU(2)$ tenen el coeficient $a = 0$, de manera que:

$$U = \exp[i(b\sigma_z + c\sigma_x + d\sigma_y)]. \quad (8)$$

En general, les matrius de $SU(n)$ són l'exponencial de matrius hermítiques de traça zero. La matriu $SU(2)$ general la podem escriure $U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$ amb $|a|^2 + |b|^2 = 1$. En efecte: $U^\dagger U = (|a|^2 + |b|^2) \mathbb{I}_{2 \times 2} = \mathbb{I}_{2 \times 2}$ amb $a, b \in \mathbb{C}$.

El subgrup de matrius reals $\begin{pmatrix} a & b \\ -b & a \end{pmatrix}$ amb $a^2 + b^2 = 1$ s'anomenen $SO(2)$. Tanmateix, com $a^2 \leq 1$ podem fer el canvi $a = \cos\theta$ i, aleshores escrivim les matrius $SO(2)$ en la seua forma més familiar: $\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$.

2.2 Relació entre grup SU(2) i el grup ortogonal SO(3)

La forma en que actuen les transformacions unitàries de SU(2) sobre una matriu M generant una matriu M' és: $M' = \mathbb{U}M\mathbb{U}^\dagger$, on $\mathbb{U} \in SU(2)$. Considerem que M és la matriu hermítica de traça nul·la

$$M = x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z = \begin{pmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{pmatrix}$$

La transformació unitària no canvia la seua hermiticitat (se tracta d'un canvi de base) ni el valor de la traça (per ser un invariant). Per tant, M' se podrà escriure de manera semblant a M :

$$M' = \begin{pmatrix} z' & x' - iy' \\ x' + iy' & -z' \end{pmatrix}$$

Finalment, com que $\det(M') = \det(\mathbb{U})\det(M)\det(\mathbb{U}^\dagger) = \det(M)$, trobem que també el determinant és un invariant. Per tant, la magnitud,

$$\det(M) = z^2 + x^2 + y^2 = r^2$$

és un invariant sota les operacions de SU(2), just com ho és sota rotacions en $\mathbb{R}^3$. Açò suggereix un homomorfisme SU(2)-SO(3).

Per una altra banda, les matrius unitàries de SU(2) poden ser escrites en la forma $e^{i\vec{r}\vec{\sigma}}$ on $\vec{r} = (x, y, z)$ és un vector de $\mathbb{R}^3$ i $\vec{\sigma}$ és un vector amb les matrius de Pauli de components, matrius que són la representació matricial dels operadors de moment angular d'espín. Per tant, els autovectors del quadrat del moment angular d'espín, $\widehat{S}^2$, formen bases de les representacions de SU(2). Sabem també que els autovectors del quadrat del moment angular orbital, $\widehat{L}^2$, formen bases de les representacions de SO(3). El moment angular orbital està lligat a un nombre quàntic ℓ enter (associat amb ℓ hi ha un nombre senar de funcions amb diferent m_ℓ), mentre que l'espín està lligat a un nombre quàntic s enter (associat amb un nombre senar de funcions amb diferent m_s) o semienter (associat amb un nombre parell de funcions amb diferent m_s). En conseqüència, hi ha una correspondència biunívoca entre les irreps de dimensió senar de SU(2) i totes les irreps de SO(3). Podem establir doncs un homomorfisme entre SU(2) i SO(3). Diem que SU(2) és el grup doble o *covering group* de SO(3).

3 Generadors del grup

Hem vist que el grup U(n) de matrius unitàries (i per tant, els seus subgrups, SU(n), O(n), SO(n),...) poden expressar-se com l'exponencial d'una matriu hermítica, la qual la podem escriure com una combinació lineal d'una base de matrius hermítiques (aquestes matrius unitàries constitueixen la representació matricial de transformacions unitàries escrites com exponencial d'operadors hermítics):

$$\mathbb{U} = \exp[i \sum_n a_n X_n]. \quad (9)$$

amb a_n paràmetres reals que varien contínuament i X_n les matrius hermítiques. Per exemple, hem vist que les matrius de SU(2) són de la forma $\mathbb{U}(x, y, z) = e^{i\vec{r}\vec{\sigma}}$, les de SO(2) sabem que són $\mathbb{M}(\phi) = e^{i\phi\tilde{L}_z}$, etc.

Fixem-nos que si fem igual a zero tots els paràmetres a_n trobem la matriu identitat (el neutre del grup). En efecte:

$$\begin{aligned} \mathbb{U}(a_n) &= e^{i \sum_n a_n X_n} = \mathbb{I} + i \sum_n a_n X_n + \frac{1}{2!} \sum_{m,n} a_m a_n X_m X_n \dots \\ &\rightarrow \mathbb{U}(0) = \mathbb{I} \end{aligned} \quad (10)$$

en el cas de paràmetres infinitesimals tallem la sèrie al terme lineal:

$$\mathbb{U}(da_n) \approx \mathbb{I} + i \sum_n X_n da_n \quad (11)$$

Per tant, $\mathbb{U}(da_n) - \mathbb{U}(0) = d\mathbb{U} = i \sum_n X_n da_n$, de manera que:

$$i X_n = \left(\frac{\partial \mathbb{U}}{\partial a_n} \right)_0$$

Els generadors són les **tangents** al grup sobre l'element neutre.

Cal dir que, a més de la suma i el producte, l'analogia dels generadors amb les components del moment angular permet introduir una tercera operació, la commutació. En el cas de $SU(2)$ i $SO(3)$ tenim $[J_x, J_y] = iJ_z$ i permutacions cícliques. Ometem la demostració de que per a qualsevol subgrup de $GL(n)$,

$$[X_\mu, X_\nu] = \sum c_{\mu\nu\lambda} X_\lambda$$

4 Operadors de Casimir

El conjunt de generadors, amb les tres operacions esmentades, té estructura d'àlgebra (àlgebra de Lie del grup).¹

Hi ha un teorema anomenat de Casimir, la demostració del qual ometem, que diu que per al cas de grups semisimples ($GL(n)$ i els seus subgrups ho són) se poden construir operadors, anomenats de Casimir de la forma:

$$C = \sum_{i,j} g_{ij} X_i X_j$$

és a dir, operadors bilineals dels generadors X_k , que tenen la propietat de commutar amb tots els generadors del grup. Per tant, són invariants (múltiples de la matriu unitat) i els seus autovalors poden ser utilitzats per etiquetar les irreps.

Un grup pot tenir més d'un operador de Casimir i no hi ha una manera general de construir-los tots per a qualsevol grup (Tanmateix, Gelfand[1] proporciona un procediment en el cas dels grups unitaris $U(n)$, del qual parlarem més endavant).

En el cas de $SU(2)$ o $O(3)$, l'operador bilineal de Casimir és $C = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$, és a dir, és el quadrat del moment angular i els seus autovalors etiqueten les irreps d'aquests grups. El nombre d'operadors de Casimir d'un grup és igual al rang de la seua àlgebra que podem definir com el nombre màxim de conjunts de generadors que commuten entre ells.[3] Per exemple, el grup abelià de translacions té tres generadors, $\hat{p}_\nu = -i\partial/\partial x_\nu$ que commuten entre si (les tres components del moment lineal). Per tant, el rang és tres. En el cas de $SO(3)$ cap generador commuta amb cap altre. Per tant, el rang és u. En $O(4)$ el rang és dos, etc.

5 Representacions de $U(n)$

Una matriu $\mathbb{U}$ de $U(n)$ pot ser *també* escrita en la forma:

$$\mathbb{U} = \exp[i \sum_{i,j} \alpha_{ij} e_{ij}] \quad (12)$$

on α_{ij} són nombres complexos amb la condició $\alpha_{ij} = \alpha_{ji}^*$ i e_{ij} és una matriu de zeros excepte un 1 en la posició (i,j). Efectivament, és immediat comprovar que $\sum_{i,j} \alpha_{ij} e_{ij}$ és una matriu hermitica i, per tant, la seua exponencial unitària.

Els generadors e_{ij} que hem definit presenten la relació de commutació:

$$[e_{ij}, e_{kl}] = \delta_{jk} e_{il} - \delta_{il} e_{kj} \quad (13)$$

En el cas $U(2)$ tenim: $e_{11} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $e_{12} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $e_{21} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ i $e_{22} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. Comprovem immediatament que $e_{11} + e_{22} = \mathbb{I} = \hat{N}$,² $e_{11} - e_{22} = \sigma_z$, $e_{12} + e_{21} = \sigma_x$, i $i(e_{21} + e_{12}) = \sigma_y$. Veiem doncs que l'elecció de la base de l'àlgebra és arbitrària.

Els operadors e_{ij} de $U(2)$ actuen sobre la base $\{|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\}$ de la següent manera:

$$\begin{array}{llll} e_{11}|1\rangle = |1\rangle & e_{11}|2\rangle = 0 & e_{22}|1\rangle = 0 & e_{22}|2\rangle = |2\rangle \\ e_{12}|1\rangle = 0 & e_{12}|2\rangle = |1\rangle & e_{21}|1\rangle = |2\rangle & e_{21}|2\rangle = 0 \end{array} \quad (14)$$

¹Grups diferents poden tenir la mateixa àlgebra. Per exemple, $SU(2)$ i $SO(3)$ tenen la mateixa àlgebra[2], l'àlgebra del moment angular.

² $\hat{N}$ és l'operador número de partícules.

Anomenem *weight generators* a les matrius e_{ii} , *rising generators* a e_{ij} amb $i < j$ (*lowering generators* a e_{ij} amb $j < i$).

Per poder identificar les irreps d' $U(n)$ definim un conjunt complet d'invariants (operadors de Casimir):

$$I_k^{(n)} = \sum_{i_1 \dots i_k}^n e_{i_1 i_2} e_{i_2 i_3} \dots e_{i_k i_1} \quad k = 1, 2, \dots, n$$

per exemple: $I_1^{(1)} = \sum_{i=1}^n e_{ii}$.

És fàcil comprovar en qualsevol cas particular que $I_k^{(n)}$ és un invariant, i.e., que $[I_k^{(n)}, e_{ij}] = 0$, $\forall i, j = 1, 2, \dots, n$. Per exemple, en $U(2)$ tenim:

$$\begin{aligned} I_1^{(2)} &= e_{11} + e_{22} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{I} \\ I_2^{(2)} &= e_{11}e_{11} + e_{12}e_{21} + e_{21}e_{12} + e_{22}e_{22} = 2\mathbb{I} = \frac{1}{2}(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) \end{aligned} \quad (15)$$

Els dos invariants són múltiples de la matriu unitat i, per tant, la seua commutació amb els e_{ij} és immediata.

L'irrep fonamental de $U(2)$ té els pesos (autovalors dels invariants) $\{I_2^{(2)} = 2, I_1^{(1)} = 1\}$ que poden ser usats per etiquetar aquesta irrep bidimensional. Cadascun dels dos elements de la base presenta diferent autovalor de $I_1^{(1)} = e_{11} = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \sigma_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$. Els autovalors són els elements de la diagonal: 1,0. Per tant, les ternes (2,1,1),(2,1,0) etiqueten completament les funcions.

L'àlgebra de $SU(n)$ són elements amb traça igual a zero, per això cal definir una nova base de generadors:

$$e'_{ij} = e_{ij} + \delta_{ij} \frac{I_1^{(n)}}{n}.$$

En el cas $SU(2)$ tenim:

$$\begin{aligned} e'_{11} &= e_{11} - \frac{1}{2}\mathbb{I} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = J_z & e'_{12} &= e_{12} \\ e'_{22} &= e_{22} - \frac{1}{2}\mathbb{I} = -J_z & e'_{21} &= e_{21} \end{aligned} \quad (16)$$

Aleshores, amb els nous generadors i les mateixes fórmules calculem els invariants de $SU(2)$: $I_1^{(2)} = e'_{11} + e'_{22} = 0$, $I_2^{(2)} = \frac{3}{2}\mathbb{I}$, $I_1^{(1)} = J_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

Gelfand i Tsetlin (GT) van trobar una *alternativa simple i equivalent* per etiquetar els autovectors dels invariants (amb etiquetes diferents dels autovalors, però relacionades amb ells matemàticament[1]). D'acord amb l'esquema GT, una irrep de $U(n)$ ve etiquetada per un conjunt de n enters m_{in} tal que $m_{1n} \leq m_{2n} \leq \dots m_{nn}$. Tanmateix, la base de funcions s'etiqueten amb $n(n-1)/2$ enters addicionals que donen compliment a la condició de veïnatge $m_{i,j} \geq m_{i-1,j} \geq m_{i,j+1}$.

Equivalentment, se pot etiquetar l'irrep amb els tableaux de Young amb m_{kn} caixes en la k -èssima fila ($k = 1, 2, \dots, n$). El nombre de caixes iguala el nombre de partícules presents en les funcions de l'irrep: $\sum_i^n m_{in} = N$.

La representació irreductible fonamental de $U(2)$ i $SU(2)$, la base de la qual són el parell de funcions $\{|1\rangle = \alpha, |2\rangle = \beta\}$ de l'espín d'una partícula, se representa mitjançant un tableau de Young, que en aquest cas és una caixa $\square$ o també mitjançant el vector $[m] = [1, 0]$. La base de l'irrep l'etiquetem construint els tableaux de Weyl a partir del de Young, i.e. afegint, en aquest cas, els vectors a les caixes de totes les maneres possibles: $\{\square, \boxplus\}$. En general, un tableau de Weyl és un tableau de Young amb índexs no decreixents en les files i creixents en les columnes.

De manera paral·lela, podem trobar l'etiquetatge GT d'aquesta base, a partir del vector $[m]$, aplicant les relacions de veïnat $m_{i,j} \geq m_{i-1,j} \geq m_{i,j+1}$:

$$\begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & 1 & \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & 0 & \end{pmatrix}.$$

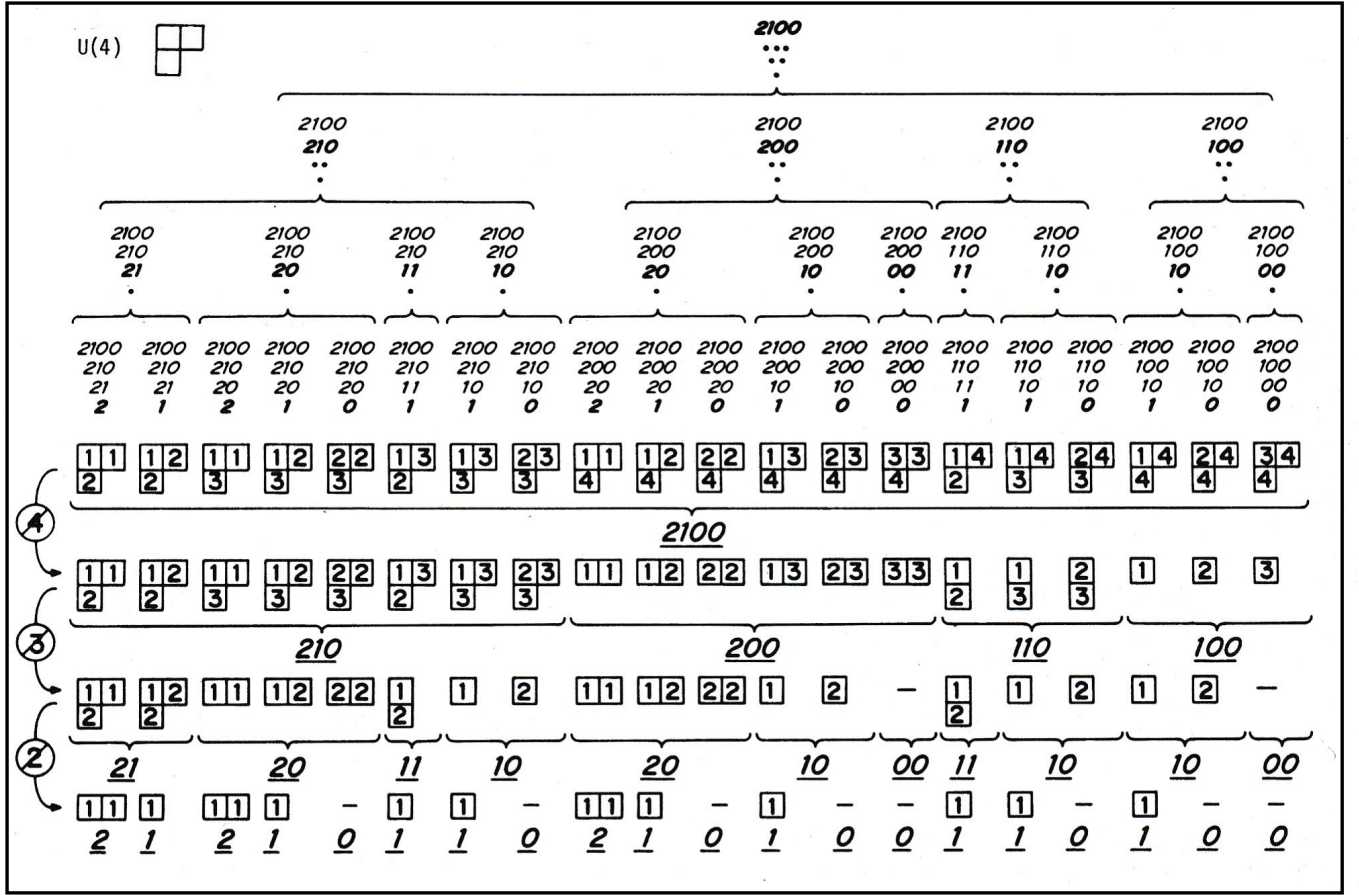


Figure 1: Generació de la base canònica $[210^2]$ de $U(4)$ i relació entre els esquemes d'etiquetatge basats en tableaux de Gelfand-Tsetlin GT i Weyl.[4]

A la figura 1, part superior s'exemplifica la generació ordenada de la base de l'irrep $[m] = [2100]$ de $U(4)$ fent ús de les relacions de veïnatge $m_{i,j} \geq m_{i-1,j} \geq m_{i,j+1}$. A la part inferior trobem els corresponents tableaux de Weyl relacionats. Per veure aquesta relació considerem l'exemple de l'element,

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ & 2 & 0 & 0 \\ & 2 & 0 & 0 \\ & & 1 & \end{pmatrix}, \quad (17)$$

La primera fila $(2 \ 1 \ 0 \ 0)$ d'aquest element defineix el tableaux de Young: $[2, 1, 0^2] = [2, 1] = \begin{smallmatrix} \square & \square \\ \square & \end{smallmatrix}$ de $U(4)$. La segon fila, $(2 \ 0 \ 0)$, que correspon als invariants d' $U(3)$, té un patró $[2] = \begin{smallmatrix} \square & \square \end{smallmatrix}$, cosa que indica que l'etiqueta '4' ocupava la caixa eliminada de la segon fila del tableaux de Young. La tercera fila, $(2 \ 0)$, que correspon a $U(2)$, manté el patró, cosa que vol dir que no hi ha etiqueta '3'. Finalment, la quarta fila, (1) , que correspon a $U(1)$, té el patró $[1] = \square$, cosa que indica que hi havia un '2' en la caixa que hem eliminat en el pas $U(2) \rightarrow U(1)$. Finalment, en la caixa que queda, que correspon a $U(1)$, afegim la base '1'. Hem trobat doncs el tableaux de Weyl $\begin{smallmatrix} \square & 2 \\ \square & \end{smallmatrix}$ que indica la taula.

De manera semblant, ara partirem d'un tableaux de Weyl i trobarem el corresponent element GT. Per exemple, considerem $\begin{smallmatrix} \square & 2 \\ \square & \end{smallmatrix}$ d' $U(4)$. La primera fila de l'etiqueta GT és el patró $[2, 1]$ del diagrama de Weyl, completat amb zeros fins a 4 índexs (per tractar-se d' $U(4)$): $(2 \ 1 \ 0 \ 0)$. Si ara eliminem el vector '4' ens queda un tableau $\begin{smallmatrix} \square & \end{smallmatrix}$ en $U(3)$. Per tant, la segon fila serà $(1 \ 0 \ 0)$. Ara toca eliminar el '3'. Com no hi ha '3' ens quedem com estàvem $\begin{smallmatrix} \square & \end{smallmatrix}$ però en $U(2)$, la tercera fila és doncs $(1 \ 0)$. En eliminar '2' no queda cap caixa per a $U(1)$, pel que la quarta fila és (0) i l'element GT complet queda:

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ & 1 & 0 & 0 \\ & 1 & 0 & 0 \\ & & 0 & \end{pmatrix}, \quad (18)$$

5.1 Càlcul de la dimensió de les irreps d'U(n) i SU(n)

Exemplificarem el mètode calculant la dimensió d'una irrep, per exemple $[2^3]$ de $U(6)$, que en la notació GT escrivim $[222000]$ i que té un tableaux de Young associat $\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array}$. Aleshores, emplenem la caixa superior esquerra amb un '6' (per tractar-se del grup $U(6)$), i ara ens movem a dretes fent créixer el dígit d'unitat en unitat, i cap avall fent-lo decreïxer, de manera que obtenim $Num = \begin{array}{|c|c|c|} \hline 6 & 7 & \\ \hline 5 & 6 & \\ \hline 4 & 5 & \\ \hline \end{array}$.

Independentment, en un altre tableaux idèntic, calculem els "hams" (hook), que consisteix a associar a cada quadre del diagrama un número igual al nombre de caixes de la seva dreta més les que té davall, més un. En aquest cas, obtenim $Den = \begin{array}{|c|c|c|} \hline 4 & 3 & \\ \hline 3 & 2 & \\ \hline 2 & 1 & \\ \hline \end{array}$.

La dimensió de l'irrep és la ratio de les dues magnituds:³ $D = \frac{Num}{Den}$.

Anàlogament, calculem la dimensió de $[3^2, 2, 1^3]$ de $U(7)$. Tenim:

$$Num = \begin{array}{|c|c|c|} \hline 7 & 8 & 9 \\ \hline 6 & 7 & 8 \\ \hline 5 & 6 & \\ \hline 4 & & \\ \hline 3 & & \\ \hline 2 & & \\ \hline \end{array} \quad Den = \begin{array}{|c|c|c|} \hline 8 & 4 & 2 \\ \hline 7 & 3 & 1 \\ \hline 5 & 1 & \\ \hline 3 & & \\ \hline 2 & & \\ \hline 1 & & \\ \hline \end{array} \quad (19)$$

$$\rightarrow D = \frac{7 \cdot 8 \cdot 9 \cdot 6 \cdot 7 \cdot 8 \cdot 5 \cdot 6 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2}{8 \cdot 4 \cdot 2 \cdot 7 \cdot 3 \cdot 1 \cdot 5 \cdot 1 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1} = 7 \cdot 9 \cdot 8 \cdot 6 = 3024 \quad (20)$$

5.2 Reducció de simetria $U(n) \rightarrow U(n-1)$

La primera fila de la Figura (1) ens dóna la clau de com efectuar aquesta reducció fent ús dels tableaux GT: Allí partim de l'irrep (2100) de $U(4)$, les relacions de veïnat $m_{i,j} \geq m_{i-1,j} \geq m_{i,j+1}$ permeten definir totes les segones files: (210) (200) (110) (100) que corresponen a irreps de $U(3)$. Per tant podem escriure:

$$(2100) = (210) \oplus (200) \oplus (110) \oplus (100)$$

En termes del tableaux de Young :

$$\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \rightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array}$$

En termes de les dimensions: $[20] = [8] \oplus [6] \oplus [3] \oplus [3]$.

5.3 Descomposició del producte de representacions en $U(n)$

En termes de tableaux de Young segueix les mateixes regles que el grup simètric (veure secció 7.12 de [5]). Considerem el producte $\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|} \hline a & a \\ \hline b & \\ \hline \end{array}$. Escrivim el primer tableau buit i en el segon especifiquem etiquetes (a en la primera fila, b en la segon, c en la tercera etc.)

$$\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|} \hline a & a \\ \hline b & \\ \hline \end{array}$$

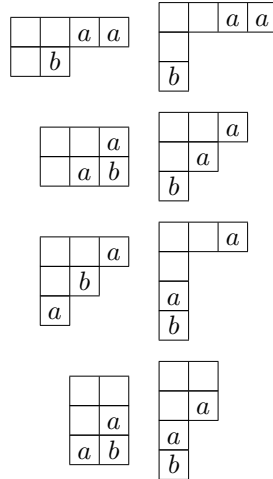
Aleshores completem el primer diagrama afegint les etiquetes a de totes les maneres possibles, evitant dues en la mateixa columna:⁴

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & & a & a \\ \hline & & & \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & & \\ \hline & & a \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & & \\ \hline & & a \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & a \\ \hline & a \\ \hline \end{array}$$

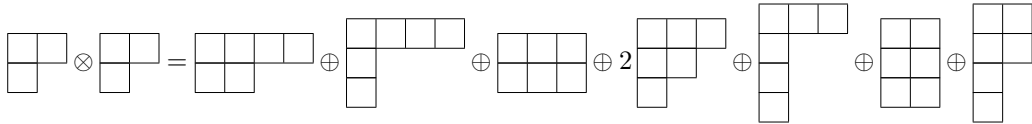
³Les irreps del grup simètric S_n de permutacions de n elements s'etiqueten també amb diagrames de Young, però en aquest cas, la dimensió és $D = \frac{n!}{Den}$, veure e.g. apèndix 4 de [7].

⁴Recordem que en el grup simètric, les columnes impliquen antisimetria i les files simetria. La part antisimètrica de $a \times a$ és $a \times a - a \times a = 0$.

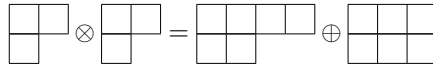
ara afegim el símbol b , evitant ficar b en la primera fila.⁵ A partir del primer patró anterior, del segon etc., anem obtenint:



Amb tot açò tenim:



És interessant notar que no he especificat el grup $U(n)$. Imaginem que se tracta de $U(2)$. En tal cas, no poden haver tableaux de més de dues files. Per tant, cal eliminar tots els de tres o més files, de manera que queda:



Comprovem les dimensions: $[2] \otimes [2] = [3] \oplus [1]$.

Cas de ser $U(n)$ amb $n \geq 4$ entren tots els tableaux. Comprovem les dimensions en el cas $U(4)$:

$$[20] \otimes [20] = [126] \oplus [70] \oplus [50] \oplus [128] \oplus [10] \oplus [10] \oplus [6].$$

6 $SU(2)$, funcions d'espín i *branching diagram*

Les funcions polielectròniques d'espín són potències tensorials d'una base de $n = 2$ funcions: $\{\alpha, \beta\}$. Aquest conjunt $\{\alpha, \beta\}$ és base de la representació fonamental ($\square$) de $SU(2)$. Si tenim, e.g., un nombre N electrons, la corresponent N -èssima potència tensorial general una base de dimensió 2^N . Per exemple, $N = 2$ dóna lloc a un espai de dimensió $D = 2^2 = 4$: $\square \otimes \square = \square \oplus \square$ ($[2] \otimes [2] = [3] \oplus [1]$). Si anomenem $\alpha = |1\rangle$, $\beta = |2\rangle$, la base producte cartesià queda $\{\alpha\alpha, \alpha\beta, \beta\alpha, \beta\beta\} \equiv \{|11\rangle, |12\rangle, |21\rangle, |22\rangle\}$. La base adaptada a $SU(2)$ és el triplet ($\square$) i el singlet ($\square$):

$$\begin{aligned} &|11\rangle \\ &|12\rangle + |21\rangle \quad \square \\ &|22\rangle \\ &|12\rangle - |21\rangle \quad \square \end{aligned} \tag{21}$$

Per al cas $N = 3$:

$$(\square \otimes \square) \otimes \square = (\square \oplus \square) \otimes \square = \square \oplus 2 \square \oplus \square$$

⁵En general, el procediment per descartar un tableau incorrecte consisteix a llegir les etiquetes afegides per files, de dreta a esquerra i de dalt a baix. Per exemple, $\begin{smallmatrix} \square & \square & a & a \\ \square & b & & \end{smallmatrix}$ se llegeix aab . Aleshores ha de succeir que $n_a \geq n_b \geq n_c \geq \dots$. Per exemple, el tableau $\begin{smallmatrix} \square & a & a & b \\ \square & & & \end{smallmatrix}$ se llegeix baa , que no dóna compliment a la condició anterior i se descarta. De manera semblant descartem $\begin{smallmatrix} \square & \square & b \\ \square & a & \end{smallmatrix}$ etc.

$$([2] \otimes [2]) \otimes [2] = ([3] \oplus [1]) \otimes [2] = [4] \oplus 2[2] \oplus [1]$$

Hi ha una contradicció aparent en les dimensions: a l'esquerra la dimensió és $2^3 = 8$ a la dreta és $4 + 2 \times 2 + 1 = 9$. El motiu és que $\square$ no té realització física (no hi ha una funció totalment antisimètrica realitzable amb únicament dues funcions de base). En altres paraules, $SU(2)$ no pot tenir irreps amb més de dues files. Aleshores, hem d'eliminar $\square \equiv [1]$ del producte: $[2]^3 = [4] + 2[2]$.

En química quàntica, les funcions d'espín s'etiqueten en funció del seu *path* o camí en el *branching diagram*. En la figura (2) mostrem tots el possibles camins (5 en aquest cas) per a arribar al doblet $S = 1/2$ amb $N = 5$ electrons. És a dir, tenim $N = 5$ electrons, cadascú ocupant un orbital diferent, per tant $n = 5$ i el grup unitari orbital és $U(5)$. Els electrons poden tenir dos funcions d'espín (α, β), per tant, el grup unitari d'espín és $SU(2)$ o $U(2)$. El diagrama ens indica que tenim 5 doblets, és a dir, hi ha 5 funcions diferents en $U(5)$, cadascuna associada a dos espins diferents (doblet) d' $U(2)$. Tanmateix, podem considerar que hi ha 2 funcions diferents d' $U(2)$ associades amb 5 funcions espacials diferents d' $U(5)$ (quintuplet). Les irreps d' $U(2)$ i $U(5)$ són duals una de l'altra.

En efecte, si considerem el grup $U(2)$ o $SU(2)$, la cinquena potència $\square^{\otimes 5}$ sols pot contenir irreps de dues files. Per tant, amb 5 quadres $\square$ sols podem formar les irreps $\square\square\square\square$, $\square\square\square$ i $\square\square$. En particular, podem comprovar que $\square^{\otimes 5} = \square\square\square\square \oplus 4\square\square\square \oplus 5\square\square$ (en dimensions: $[32] = [6] + 4[4] + 5[2]$). Per tant, el doblet de $SU(2)$ és $[2] \equiv \square$. En conseqüència, el quintuplet de $U(5)$ serà el dual $\square$. Ara be, en $U(5)$, $\square$ té una dimensió de 75. De les 75 funcions, però, únicament cinc (quintuplet) no tenen orbitals repetits.⁶

Example 1: Different representations of the 5 spin states for $N = 5$ and $S = \frac{1}{2}$.

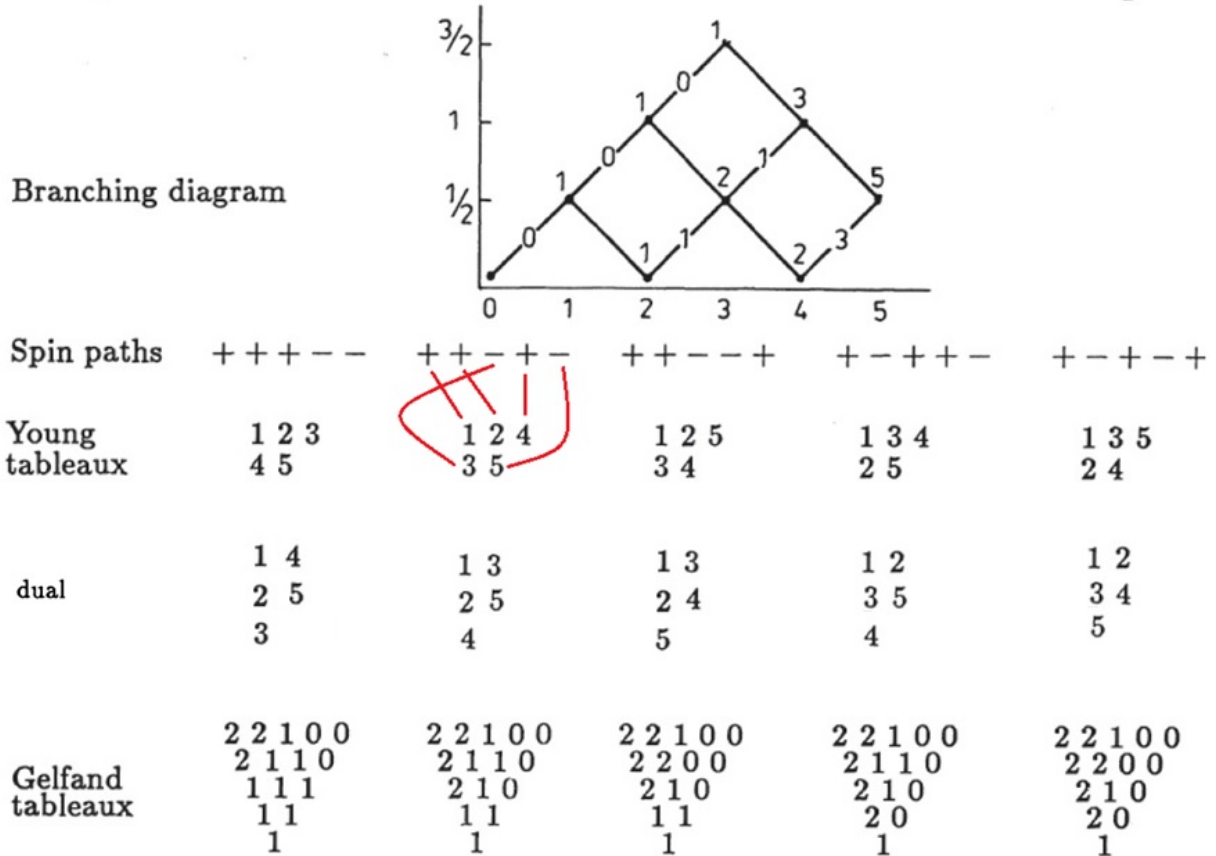


Figure 2: Diferent etiquetatge de les funcions d'espín amb $S = \frac{1}{2}$ corresponent a $N = 5$ partícules.[6]

⁶Funcions sense orbitals repetits serien e.g. $\begin{smallmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 \end{smallmatrix}$, $\begin{smallmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \\ 5 \end{smallmatrix}$, etc. Funcions amb orbitals repetits serien e.g. $\begin{smallmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \\ 3 \end{smallmatrix}$, $\begin{smallmatrix} 2 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 \end{smallmatrix}$, etc.

Considerem, per exemple, el camí $(+++--)$ del *branching diagram*, que vol dir que partir de l'origen cal pujar tres vegades seguides i baixar-ne dos. Aquest camí també podem etiquetar-lo amb les coordenades (N_i, S_i) de cadascun dels seus nodes (vegeu Figura (2)): $\{(1, \frac{1}{2}), (2, 1), (3, \frac{3}{2}), (4, 1), (5, \frac{1}{2})\}$, i pot ficar-se també en correspondència amb els tableaux de Weyl i GT de d'U(5) i U(2). Pujar inicialment tres vegades seguides significa que les tres primeres funcions són α (situen 1,2,3 en les tres caixes de la primera fila en el diagrama de Weyl). Baixar-ne dos, significa que la quarta i cinquena són β (situen 4,5 en les dues caixes de la segon fila del diagrama de Weyl): $\begin{smallmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 \end{smallmatrix}$. Per calcular el seu dual, canviem files per columnes: $\begin{smallmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 5 \\ 3 \end{smallmatrix}$. Aquesta és l'etiqueta de la funció orbital d'U(5) associada a $(+++--)$.

Equivalentment, la seua etiqueta GT és: $\begin{pmatrix} 2 & & 2 & & 1 & & 0 & & 0 \\ & 2 & & 1 & & 1 & & 1 & & 0 \\ & & 1 & & 1 & & 1 & & 1 & \\ & & & 1 & & 1 & & 1 & & \\ & & & & 1 & & 1 & & 1 & \end{pmatrix}$.

A la figura (2) hi ha les solucions per a la primera component (o la segona) de cadascun dels cinc doblets que podem formar amb cinc electrons amb simple ocupació de cada orbital.⁷

L'obtenció de funcions adaptades d'espín fent ús del grup simètric S_N de permutacions pot trobar-se en el cap. 7.6 dels apunts.[7] i més extensament al llibre de Pauncz.[8] Wormer va demostrar que les bases adaptades a la cadena $S_N \supset S_{N-1} \supset \dots \supset S_2 \supset S_1$ (bases de Yamanouchi-Kotani) estan simultàniament adaptades a la cadena $U_n \supset U_{n-1} \supset \dots \supset U_2 \supset U_1$ (bases GT). Atenció! la recíproca no és certa (veure e.g. Cap. 8.9 de Pauncz[9]).

7 U(n) i la part espacial de les funcions d'ona

L'Hamiltonià d'un sistema N -electrònic, escrit en termes de les integrals mono i bielectròniques, calculades sobre una base de $2n$ espín-orbitals l'escriuim[10]:

$$\hat{H} = \sum_{i_1, i_2}^{2n} \langle i_1 | \hat{h} | i_2 \rangle \hat{a}_{i_1}^\dagger a_{i_2} + \frac{1}{2} \sum_{i_1, i_2, i_3, i_4}^{2n} \langle i_1 i_2 | \hat{V} | i_3 i_4 \rangle a_{i_1}^\dagger a_{i_2}^\dagger a_{i_4} a_{i_3} \quad (22)$$

on $\hat{h}$ és la part monoelectrònica i $\hat{V}$ la part Coulòmbica (bielectrònica) de l'Hamiltonià. Els operadors $\hat{a}_{i_1}^\dagger, \hat{a}_{i_1}$ són els creadors i anihiladors de partícules de la segon quantificació.

Si definim l'operador $e_{i_1, i_2} = a_{i_1}^\dagger a_{i_2}$, tenint en compté les propietats de commutació de creadors i anihiladors, és immediat trobar que:

$$[e_{i_1, i_2}, e_{i_3, i_4}] = e_{i_1, i_4} \delta_{i_2, i_3} - e_{i_3, i_2} \delta_{i_1, i_4}$$

per tant, aquests operadors són generadors de U(2n).

Si calculem les traces parcials (integrem espín o integrem espai) podem definir nous operadors,

$$\mathbb{E}_{I_1, I_2} = \sum_{\sigma} e_{I_1 \sigma, I_2 \sigma}$$

$$E_{\sigma_1, \sigma_2} = \sum_I e_{I \sigma_1, I \sigma_2}$$

Podem comprovar que aquests operadors tenen relacions semblants de commutació:

$$[\mathbb{E}_{I_1, I_2}, \mathbb{E}_{I_3, I_4}] = \mathbb{E}_{I_1, I_4} \delta_{I_2, I_3} - \mathbb{E}_{I_3, I_2} \delta_{I_1, I_4}$$

$$[E_{\sigma_1, \sigma_2}, E_{\sigma_3, \sigma_4}] = E_{\sigma_1, \sigma_4} \delta_{\sigma_2, \sigma_3} - E_{\sigma_3, \sigma_2} \delta_{\sigma_1, \sigma_4}$$

per tant, són generadors de U(n) i U(2) o SU(2), respectivament.

Com l'Hamiltonià no conté variables d'espín podem integrar l'espín i expressar-lo en termes de generadors del grup unitari U(n):

$$\hat{H} = \sum_{I_1, I_2}^n \langle I_1 | \hat{h} | I_2 \rangle \mathbb{E}_{I_1, I_2} + \frac{1}{2} \sum_{I_1, I_2, I_3, I_4}^n \langle I_1 I_2 | \hat{V} | I_3 I_4 \rangle (\mathbb{E}_{I_1, I_2} \mathbb{E}_{I_3, I_4} - \delta_{I_2, I_3} \mathbb{E}_{I_1, I_4}) \quad (23)$$

⁷Òbviament, la cosa és diferent si tenim doble ocupació d'alguns orbitals, atès que únicament la part de capa oberta se correspon amb el *branching diagram*.

Les funcions productes orbitals $|\Phi_{i_1, i_2, \dots, i_N}\rangle = |\phi_{i_1} \phi_{i_2} \dots \phi_{i_N}\rangle = |n_1 n_2 \dots n_n\rangle$ amb $n_i = 1$ si $\phi_i \in |\Phi\rangle$ o $n_i = 0$ si $\phi_i \notin |\Phi\rangle$, expandeixen l'espai n^N -dimensional de funcions N -electròniques. Ara be, com l'Hamiltonià (23) és invariant sota $U(n)$, aquest espai es pot descompondre com suma directa del espais generats per les bases de les irreps d' $U(n)$. Addicionalment, el principi de Pauli obliga a que la funció completa (espai $\times$ espín) siga totalment antisimètrica en $U(2n)$. Com la funció està factoritzada en part espacial, $U(n)$, i part d'espín, $SU(2)$, caldrà que les presentacions d' $U(n)$ i $SU(2)$ siguen duals, i.e. associades amb diagrames de Young duals (e.g., $\square\square$ vs. $\begin{smallmatrix} \square \\ \square \end{smallmatrix}$). Aquest requeriment restringeix severament el nombre d'irreps d' $U(n)$ que intervenen: com les irreps de $SU(2)$ corresponents a funcions d'espín han de tenir màxim dues files, les duals de $U(n)$ hauran de tenir màxim dues columnes. A més, la diferència entre el nombre de caixes de les dues files ha de ser igual al doble de l'espín ($2S$) del sistema (e.g. $\square$ correspon a $S = \frac{1}{2}$).

Per a una multiplicitat donada, la dimensió de l'espai que pot ser generat a partir de n orbitals en un sistema N -electrònic és la de la irrep de $U(n)$. Aquesta dinensió la podem calcular, com hem indicat en seccions anteriors, com la ratio entre el tableau de Weyl i els dels 'hams' o, equivalentment, utilitzant la fórmula de Paldus:⁸

$$D(a, b, c) = \frac{b+1}{n+1} \binom{n+1}{a} \binom{n+1}{c} \quad (24)$$

amb $a = \frac{1}{2}N - S$, $b = 2S$, $c = n - \frac{1}{2}N - S$.

El problema de construir la representació matricial de l'Hamiltonià en una base GT es redueix doncs al càlcul, en aquesta base, dels elements de matriu dels generadors del grup i dels productes de dos generadors. El valor d'aquests elements de matriu són universals. És a dir, completament independents dels orbitals, el quals determinen el valor de les integrals mono i bi-electròniques. S'han desenvolupat diversos procediments per al càlcul d'aquest elements de matriu. Pot ser, la implementació més coneguda del formalisme de grup unitari en el càlcul d'iteració de configuracions, siga l'anomenada GUGA (Graphical Unitary Group Approach), que fa un ús extensiu de la representació gràfica dels estats GT a l'hora d'organitzar la base CI (que pot ser truncada, minvant addicionalment així l'esforç computacional) i a l'hora de realitzar el càlcul del esmentats elements de matriu que, conjuntament amb les integrals mono i bi-electròniques, permeten la construcció de la representació matricial del Hamiltonià, la diagonalització del qual ens proporciona les energies i les funcions d'ona.[11]

8 Bases tensorials d' $U(n)$

L'obtenció de les bases de les irreps d'un grup finit a partir de vectors (funcions) no adaptats a la simetria és relativament simple si fem ús dels operadors de projecció (veure e.g. secció 6.1 de Planelles[7]). Ara bé, si el nombre d'operacions del grup és infinit, com passa en el cas de $GL(n)$, $U(n)$, etc., no podem usar aquest procediment. Sabem tanmateix que els grups finits tenen bases polinòmiques (és a dir, tensorials). Podem obtenir bases adaptades a les diferents irreps dels grups de transformacions lineals $GL(n)$, $U(n)$, $SU(n)$ seguint, amb una certa analogia amb l'obtenció de bases tensorials dels grups finits, el següent procediment: en primer lloc triem una base ortonormal de l'espai vectorial on actuen les transformacions del grup (aquestes transformacions –elements del grup– no són altra cosa que tots els possibles canvis de base. En el cas $U(n)$ són els canvis de base que no canvien la norma dels vectors i en el d' $SU(n)$ els que, a més, no introdueixen fases complexes). Aquesta base és irreductible, atès que segur que hi haurà canvis de base, canvien o no la norma del vector, introdueixin o no una fase complexa, que mesclen tots els vectors de la base. Trobem així que l'irrep fonamental⁹ de $GL(n)$ és també irreductible en $U(n)$ i $SU(n)$. El procediment que seguirem per obtenir bases tensorials de les irreps d' $U(n)$ evidenciaran inductivament que les irreps de $GL(n)$ són també irreps en $U(n)$ i $SU(n)$. Una demostració deductiva d'aquesta propietat dels grups $GL(n)$, $U(n)$, $SU(n)$ la podeu trobar en la secció 4 del cap.10 de Hamermesh.[5]

A partir d'aquesta base formarem les diverses potencies tensorials i, una volta formades, aprofitarem la commutació dels operadors que efectuen les transformacions de la base tensorial, via $U(n)$, i els que permuten els índexs dels tensors, via S_N , per trobar bases simultàniament adaptades als dos grups. Farem ús del grup finit per trobar l'expressió concreta d'aquests elements de la base. Però en lloc d'abordar una cas general, mostrarem el procediment en casos de dificultat creixent. Comencem amb el cas més simple de les transformacions de base d'un espai vectorial bidimensional. Considerem doncs dos vectors ortonormals (per exemple, dos orbitals $\{1, 2\}$ o $\{\alpha, \beta\}$). Estem doncs considerant la

⁸Únicament aplicable a sistemes N -electrònics.

⁹És habitual referir-se a aquesta irrep com la representació fonamental i referir-se a l'irrep unidimensional totalment simètrica que tenen tots els grups com la representació trivial.

representació fonamental $\square \equiv (1, 0)$ del grup $U(2)$. La base la podem etiquetar $\{\square, \square\}$ o amb els tableaux de Weyl $\left\{\begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & 1 & \\ & & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & 0 & \\ & & 0 \end{pmatrix}\right\}$.

Calculem la segona potencia tensorial: $\square \otimes \square = \square \oplus \square$ o, en termes de dimensions, $[2] \otimes [2] = [3] \oplus [1]$. La base de $\square \otimes \square$ és $\{\alpha\alpha, \alpha\beta, \beta\alpha, \beta\beta\}$ que també podem escriure $\{11, 12, 21, 22\}$.

Les bases de les irreps: En el cas $\square$ tenim $\{\square, \square, \square\}$ o amb l'etiquetatge GT $\left\{\begin{pmatrix} 2 & & 0 \\ & 2 & \\ & & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 & & 0 \\ & 1 & \\ & & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 & & 0 \\ & 0 & \\ & & 0 \end{pmatrix}\right\}$. En el cas $\square$ la base és unidimensional: $\square \equiv \left\{\begin{pmatrix} 1 & & 1 \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix}\right\}$. Com tots els operadors d' $U(2)$ commuten amb tots els del grup simètric o grup de permutacions de dos índexs S_2 , podem trobar bases simultànies d'irreps dels dos grups. És a dir, les irreps d' $U(2)$ estaran també adaptades a S_2 i vice-versa. Com S_2 és un grup finit, podem usar els projectors, $P_{\square} = e + (12)$, $P_{\square} = e - (12)$, on e és el neutre i (12) la transposició del primer i segon índex, per adaptar la base. Apliquem doncs aquests operadors a la base $\{11, 12, 21, 22\}$. Obtenim:

$$\begin{aligned} \square \square &\rightarrow \{11, (12 + 21), 22\} \equiv \{\alpha\alpha, \alpha\beta + \beta\alpha, \beta\beta\} \\ \square &\rightarrow \{(12 - 21)\} \equiv \{\alpha\beta - \beta\alpha\} \end{aligned}$$

La tercera potencia tensorial: $\square \otimes \square \otimes \square = (\square \oplus \square) \otimes \square = \square \square \oplus (2)\square$.¹⁰ En termes de dimensions, $[2] \otimes [2] \otimes [2] = [4] \oplus (2)[2]$. Com considerem la tercera potencia tensorial d' $U(2)$, els tensors tindran 3 índexs i caldrà fer ús de S_3 .

Les bases de les irreps: En el cas $\square \square$ tenim $\{\square\square, \square\square, \square\square, \square\square\}$ que les podem obtenir aplicant el projector $P_{\square\square} = e + (12) + (13) + (23) + (123) + (132)$ sobre la base $\{111, 112, 121, 211, 221, 212, 122, 222\}$ de $\square \otimes \square \otimes \square$. En el cas $\square$ d' $U(2)$ tenim dues bases, a la vegada que la irrep $\square$ d' S_3 és bidimensional. Per tant, disposem de dos operadors de projecció:

$$\begin{aligned} P_{\square_1} &= e + (12) - \frac{1}{2}(13) - \frac{1}{2}(23) - \frac{1}{2}(123) - \frac{1}{2}(132) \\ P_{\square_2} &= 0 + 0 - \frac{\sqrt{3}}{2}(13) + \frac{\sqrt{3}}{2}(23) + \frac{\sqrt{3}}{2}(123) - \frac{\sqrt{3}}{2}(132) \end{aligned}$$

on els coeficients que multipliquen les operacions del grup són els elements de matriu M_{11} i M_{12} de la representació matricial de les diferents operacions d' S_3 en la representació irreductible $\square$ (podeu trobar aquestes matrius en la Taula 7.3 de Hamermesh[5]).¹¹

Els resultats que obtenim són: $\square \square \rightarrow \{\square\square, \square\square, \square\square, \square\square\} = \{111, (112 + 121 + 211), (122 + 212 + 221), 222\} = \{\alpha\alpha\alpha, (\alpha\alpha\beta + \alpha\beta\alpha + \beta\alpha\alpha), (\beta\beta\alpha + \beta\alpha\beta + \alpha\beta\beta), \beta\beta\beta\}$.

$\square \rightarrow \{\square, \square\}_1 \oplus \{\square, \square\}_2$. Amb $P_{\square_1}, P_{\square_2}$ sobre la base de $\square \otimes \square \otimes \square$ obtenim:

$$\begin{aligned} \square_1 &\rightarrow \{(2)112 - 121 - 211, (2)221 - 212 - 122\} = \{2\alpha\alpha\beta - \alpha\beta\alpha - \beta\alpha\alpha, 2\beta\beta\alpha - \beta\alpha\beta - \alpha\beta\beta\} \\ \square_2 &\rightarrow \{121 - 211, 212 - 122\} = \{\alpha\beta\alpha - \beta\alpha\alpha, \beta\alpha\beta - \alpha\beta\beta\} \end{aligned}$$

La quarta potencia tensorial: $\square \otimes \square \otimes \square \otimes \square = (\square \square \oplus (2)\square) \otimes \square = \square \square \square \oplus (3)\square \square + (2)\square$. En termes de dimensions, $[2] \otimes [2] \otimes [2] \otimes [2] = [5] \oplus (3)[3] \oplus (2)[1]$. Com considerem la quarta potencia tensorial d' $U(2)$, els tensors tindran 4 índexs i caldrà fer ús de S_4 . La base de $\square \square \square$ és el quintuplet $\{\alpha\alpha\alpha\alpha, (\alpha\alpha\alpha\beta + \alpha\alpha\beta\alpha + \dots), \dots, \beta\beta\beta\beta\}$, hi ha tres bases adaptades a S_4 per a $\square \square$ que son els tres triplets de quatre espíns i dues bases per a $\square$ que tenen la mateixa forma que els dos singulets de quatre espíns.

Considerem ara el cas de les bases tensorials d' $U(3)$. Agafem tres orbitals ortogonals que són base de la representació fonamental $\square$ d' $U(3)$ (alternativament la podem etiquetar $(1, 0, 0)$ en notació GT).

¹⁰Adonem-nos que en la descomposició del producte no apareix $\square$ perquè en $U(2)$ no poden haver tableaux amb més de dues files. Tanmateix, fem notar que $\square$ apareix dues vegades.

¹¹Aquestes matrius, contenen 4 elements, però sols hi ha dos operadors ortogonals. Podem construir operadors amb els altres dos elements de matriu, M_{21} i M_{22} . El resultat però serà o bé idèntic a algun dels dos primers o bé projectarà zero.

Els elements la base són $\{\square, \square, \square\}$ o $\left(\begin{smallmatrix} 1 & & 0 & & 0 \\ & 1 & & & \\ & & 1 & & 0 \\ & & & 0 & \\ & & & & 0 \end{smallmatrix}\right), \left(\begin{smallmatrix} 1 & & 0 & & 0 \\ & 1 & & & \\ & & 0 & & \\ & & & 0 & \\ & & & & 0 \end{smallmatrix}\right), \left(\begin{smallmatrix} 1 & & 0 & & 0 \\ & & 0 & & \\ & & & 0 & \\ & & & & 0 \end{smallmatrix}\right)$.

La segon potència $\square \otimes \square = \square \oplus \square$ o, en termes de dimensions, $[3] \otimes [3] = [6] \oplus [3]$. La base de $\square \otimes \square$ serà $\{11, 22, 33, 12, 21, 13, 31, 23, 32\}$. Podem usar els projectors de S_2 , $P_{\square} = e + (12)$, $P_{\square} = e - (12)$ per a construir les bases de $\square$ i $\square$. En el cas $\square$ trobem les 6 funcions $\{11, 22, 33, (12 + 21), (13 + 31), (23 + 32)\}$, mentre que per a $\square$ trobem les tres funcions $\{(12 - 21), (13 - 31), (23 - 32)\}$.

La tercera potència $\square \otimes \square \otimes \square = (\square \oplus \square) \otimes \square = \square \oplus (2) \oplus \square$ o, en terme de dimensions $[3] \otimes [3] \otimes [3] = [10] \oplus (2)[8] \oplus [1]$.

L'operador $P_{\square}$ de S_3 actuant sobre la base $\{111, 112, 121, 211, 113, \dots, 333\}$ de $\square \otimes \square \otimes \square$ permet trobar els deu elements de la base de la irrep $\square$ de $U(3)$ $\{\square = 111, \square = (112 + 121 + 211), \dots, \square = 333\}$. Anàlogament, els projectors $P_{\square_1}, P_{\square_2}$, permeten trobar les dues bases, de vuit elements cadascuna, de les dues irreps $\square$ d' $U(3)$. Finalment, el projector $P_{\square} = e - (12) - (13) - (23) + (123) + (132)$ permet trobar la base unidimensional $(123 - 213 - 321 - 132 + 231 + 312)$ de l'irrep $\square$ d' $U(3)$.

La quarta potència:¹² $\square \otimes \square \otimes \square \otimes \square = \square \oplus (3) \oplus (3) \oplus (2)$.

En termes de dimensions: $[3] \otimes [3] \otimes [3] \otimes [3] = [15] \oplus (3)[15] \oplus (3)[3] \oplus (2)[6]$.

Per obtenir les bases adaptades aplicariem el projectors de S_4 a la base de 81 dimensions, $\{1111, 1112, \dots, 3333\}$, de la representació reducible $\square \otimes \square \otimes \square \otimes \square$ d' $U(3)$, de manera semblant a com hem fet abans. Per a una presentació formal, general no inductiva de les bases de les irreps de $GL(n), U(n), SU(n)$ podeu acudir al cap. 10 de Hamermesh.[5]

Un darrer apunt abans de tancar la secció. Les funcions N -electròniques d'Hamiltonians independents de l'espín, construïdes amb una base $U(n)$ de n orbitals i una base $SU(2)$ $\{\alpha, \beta\}$ de dos funcions d'espín amb les quals construïm $2n$ espín-orbitals, que són base de l'irrep fonamental d' $U(2n)$, han de ser antisimètriques (principi de Pauli) i per tant base de l'irrep totalment antisimètrica $[1^N]$ d' $U(2n)$.¹³ Podem factoritzar les funcions antisimètriques de N -electrons com producte d'una funció orbital multiplicada per una funció d'espín, és a dir, podem considerar funcions adaptades a la cadena $U(2n) \supset U(n) \otimes SU(2)$. Per tant, caldrà que les representacions d' $U(n)$ i $SU(2)$ siguin duals, i.e. associades amb diagrames de Young conjugats o duals (e.g., $\square$ vs. $\square$). Aquest requeriment restringeix severament el nombre d'irreps d' $U(n)$ que intervenen: com les irreps de $SU(2)$ corresponents a funcions d'espín han de tenir màxim dues files, les duals de $U(n)$ hauran de tenir màxim dues columnes. A més, la diferència entre el nombre de caixes de les dues files ha de ser igual al doble de l'espín (2S) del sistema (e.g. $\square$ correspon a $S = \frac{1}{2}$). Cadascuna de les funcions de les irreps que intervenen, l'orbital i la d'espín, poden ser determinades pel procediment descrit en aquesta secció.

9 Degeneració accidental de l'oscil·lador harmònic isotròpic tridimensional

L'oscil·lador harmònic isotròpic tridimensional ve descrit per l'Hamiltonià

$$\hat{H} = \sum_{i=x,y,z} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q_i^2} + \frac{m\omega^2}{2} q_i^2 \right) = \sum_{i=x,y,z} -\frac{1}{2} \nabla_{\xi_i}^2 + \frac{1}{2} \xi_i^2 = \hat{T}_{\xi} + \frac{1}{2} \xi^2 \quad (25)$$

on $\xi_i = q_i/a$ amb $a = (\frac{\hbar}{m\omega})^{1/2}$ i $\xi^2 = \sum_{i=x,y,z} \xi_i^2$.

L'operador d'energia cinètica $\hat{T}_{\xi} = -\frac{1}{2} \nabla_{\xi}^2$ és invariant sota les operacions del grup de rotacions en tres dimensions, $O(3)$, com també ho és l'operador d'energia potencial $\frac{1}{2} \xi^2$. Per tant, les funcions d'ona tenen la simetria de l'esfera i formen bases de les irreps de $O(3)$. És d'esperar, doncs, que les dimensions de les irreps d' $O(3)$ (1,3,5,7,9,...) determinen la degeneració dels nivells d'energia. Per determinar les energies d'aquest oscil·lador harmònic hi ha prou en adonar-se que l'Hamiltonià (25) es pot escriure com la suma de tres oscil·ladors harmònics unidimensionals i que podem escriure

¹²Fixem-nos que la quarta potència de $U(3)$ no conté l'irrep $\square$, perquè $U(3)$ no pot tenir irreps de més de tres files.

¹³ $[1^N]$ és una forma alternativa de representar el tableaux de Young de N caixes apilades en una única columna.

aquests oscil·ladors 1D en termes d'operadors de creació/anihilació:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=x,y,z} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q_i^2} + \frac{m\omega^2}{2} q_i^2 \right) = \sum_{i=x,y,z} \hat{\mathcal{H}}_i = \sum_{i=x,y,z} \left(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right) \quad (26)$$

Per tant, les energies són $E = \frac{3}{2} + v_x + v_y + v_z$ amb $v_i = 0, 1, 2, 3, \dots$ i la degeneració resulta: 1, 3, 6, 10, 15 ..., que *no* se correspon amb la degeneració del grup de l'esfera.¹⁴ És un comportament que recorda el de l'àtom d'hidrogen. En el cas de l'àtom d'hidrogen, a més del moment angular, també el vector de Runge-Lenz és invariant, de manera que la simetria de l'Hamiltonià és $O(4)$ i no únicament $O(3)$. En el cas de l'oscil·lador harmònic isotròpic tridimensional, si mirem l'equació (26), trobem que l'Hamiltonià està escrit en termes d'uns operadors $e_{ii} = a_i^\dagger a_i$ que se comporten com els *weight generators* d' $U(3)$. Per tant, el grup de simetria o de degeneració d'aquest oscil·lador harmònic isotròpic tridimensional és el supergrup $U(3)$ del grup $O(3)$ de l'esfera, i les degeneracions es corresponen amb les de les irreps d' $U(3)$.¹⁵ A més a més, cal tenir el compte que l'oscil·lador harmònic isotròpic tridimensional pot ser contemplat com la suma de tres oscil·ladors harmònics unidimensionals indistingibles (per això el grup és $U(n)$ amb $n = 3$) i que aquests oscil·ladors són bosons, per això la funció d'ona del sistema format pels tres bosons ha de ser totalment simètrica respecte de la permutació de les coordenades d'aquests, cosa que ens restringeix a les irreps totalment simètriques d' $U(3)$: la representació trivial $\bullet$ de dimensió unitat, la representació fonamental, $\square$, de dimensió tres, i les potències tensorials simètriques: $\square\square$, $\square\square\square$, $\square\square\square\square$... de dimensions 6, 10, 15 ..., cosa que està d'acord amb la degeneració trobada amb la fórmula $E = \frac{3}{2} + v_x + v_y + v_z$.

10 SU(3) i les partícules nuclears

En 1930 sols se coneixien dos barions: el protó i el neutró. Tots dos conformen l'estructura nuclear i tenen una massa molt semblant (i.e. una energia, $E = mc^2$, semblant) $\frac{m_n - m_p}{m_p} = 0.0014$. Heisenberg, per facilitar l'estudi de l'estructura nuclear, va imaginar que, sota la interacció forta, protó i neutró eren dos estats degenerats d'una mateixa partícula i que la petita diferència de massa derivava d'un Hamiltonià feble de perturbació depenent de la càrrega. Per analogia amb els estats α i β d'espín, va imaginar que protó i neutró eren dos estats¹⁶ amb diferent component z d'una magnitud nova que anomenà isospín, la qual no té cap relació amb l'espín, però les dues components d'isospín obeeixen les mateixes relacions matemàtiques que els estats α i β d'espín.

En absència de forces depenent de la càrrega (força electrodebil) l'isospín es conserva (protó i neutró tenen la mateixa massa) i tenim una doble degeneració.

De manera anàloga al que passa amb l'espín en absència de perturbacions, l'Hamiltonià nuclear (que ens és desconegut) ha de ser invariant sota el grup de simetria generat per les matrius d'isospín, que són també les matrius 2×2 de Pauli, generadores del grup $SU(2)$.

Pels voltants de 1960 se troben més partícules, en particular hi ha un octet de barions amb massa molt semblant:

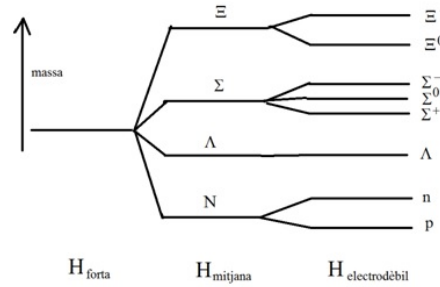
Partícula	Massa (MeV)
Ξ^-	1321.30
Ξ^0	1314.90
Σ^-	1197.41
Σ^0	1192.54
Σ^+	1189.47
Λ	1115.50
n	939.550
p	938.256

¹⁴La degeneració 1 es correspon amb l'estat (0,0,0). La degeneració 3 amb els estats (0,0,1), (0,1,0), (1,0,0). La degeneració 6 amb els estats (0,0,2), (0,2,0), (2,0,0), (1,1,0), (1,0,1), (0,1,1), etc.

¹⁵Si descartem el terme constant $1/2$ queda l'Hamiltonià $\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=x,y,z} a_i^\dagger a_i$. L'adjunta U^+ de la transformació $U(3 \times 3)$ que transforma a_i en $U a_i$, transforma $a_i^\dagger$ en $a_i^\dagger U^+$. Per tant, si volem que $\hat{\mathcal{H}}$ siga invariant, i.e., $\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=x,y,z} a_i^\dagger U^+ U a_i = \sum_{i=x,y,z} a_i^\dagger a_i$ cal que $U^+ U$ siga la matriu unitat 3×3 . Per tant, $U(3 \times 3)$ ha de ser unitària.

¹⁶Un motiu addicional que ajuda a pensar d'aquesta forma, és a dir, que el neutró és un estat excitat del protó, és el fet de tenir el neutró més energia (més massa) que el protó i ser el neutró inestable fora del nucli amb una vida mitjana de 881.5 s, sofrint l'anomenat decaïment β en el que desapareix un neutró donant lloc a un protó més un electró i un neutrino (de manera semblant a com un hidrogen en un estat excitat $2p$ decau espontàniament en un hidrogen a l'estat fonamental $1s$ més un fotó).

A més, si mirem la taula, les partícules semblen agrupades en multiplets: un doblet $\{\Xi^-, \Xi^0\}$, un triplet $\{\Sigma^-, \Sigma^0, \Sigma^+\}$, un singlet $\{\Lambda\}$ i el conegut doblet $\{p, n\}$:



Aquest fet va fer pensar que l'Hamiltonià dels barions tenia tres termes, un d'interacció forta que donava lloc a una degeneració de vuit estats (octuplets), una segon interacció que eliminava part de la degeneració però que encara conservava l'isospín, i una interacció electrodèbil que trencava tota la degeneració. Per tant, a més de l'isospín hi havia un altre invariant que van anomenar hipercàrrega i que també commutava amb la interacció forta. Per tant, el grup de simetria que justificava l'octuplet havia de ser supergrup de $SU(2)$ i havia de tenir dos operadors de Casimir (un per cada invariant). El grup més senzill que dóna compliment a aquest requisits és $SU(3)$. Finalment, havia de succeir que tingués almenys una irrep vuit vegades degenerada. La més senzilla de les irreps octo-dimensionals de $SU(3)$ és la [210], que en termes de tableaux de Young la representem $\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array}$.

Vegem com podem construir aquesta representació a partir de la representació fonamental del grup $\square$:

$$(\square \otimes \square) \otimes \square = (\square \oplus \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array}) \otimes \square = \square \oplus 2 \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array}$$

Reescrivim el producte anterior amb la notació de dimensions:

$$([3] \otimes [3]) \otimes [3] = ([6] \oplus [3]) \otimes [3] = [10] \oplus 2[8] \oplus [1]$$

Triem doncs l'octuplet $\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \equiv (210)$ de $SU(3)$ i, en aplicar la interacció mitjana, tenim que reduir la simetria a $SU(2)$. La base Gelfand-Tsetlin en $SU(3)$ és:

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ & 2 & 1 \\ & & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ & 2 & 1 \\ & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ & 2 & 0 \\ & & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ & 2 & 0 \\ & & 1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ & 2 & 0 \\ & & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 \\ & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 \\ & & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ & 1 & 0 \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

que subdueix en $SU(2)$ un triplet (20), dos doblets (21),(11) i un singlet (10):

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ & 1 \end{pmatrix}}_{\text{doblet}} \underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ & 0 \end{pmatrix}}_{\text{triplet}} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ & 1 \end{pmatrix}}_{\text{doblet}} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ & 1 \end{pmatrix}}_{\text{singlet}}$$

En termes de les dimensions: $[8] = [2] \oplus [3] \oplus [1] \oplus [2]$.

En termes de tableaux de Young:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \rightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \\ \hline \end{array}$$

$$\frac{\begin{array}{|c|c|} \hline 3 & 4 \\ \hline 2 \end{array}}{\begin{array}{|c|} \hline 3 & 1 \\ \hline 1 \end{array}} = 8 \quad \frac{\begin{array}{|c|c|} \hline 2 & 3 \\ \hline 1 \end{array}}{\begin{array}{|c|} \hline 3 & 1 \\ \hline 1 \end{array}} = 2 \quad \frac{\begin{array}{|c|c|} \hline 2 & 3 \\ \hline 2 & 1 \end{array}}{\begin{array}{|c|} \hline 2 & 1 \\ \hline 1 \end{array}} = 3 \quad \frac{\begin{array}{|c|} \hline 2 \\ \hline 2 & 1 \\ \hline 1 \end{array}}{\begin{array}{|c|} \hline 2 & 1 \\ \hline 1 \end{array}} = 1 \quad \frac{\begin{array}{|c|} \hline 2 \\ \hline 1 \end{array}}{\begin{array}{|c|} \hline 1 \end{array}} = 2$$

Aquest raonaments estan en consonància amb el model Standard de física de partícules que, en particular, descriu els barions com formats per tres quarks.¹⁷

¹⁷Per això invoquem $SU(3)$.

11 Apèndix 1: Un aclariment (molt probablement innecessari)

René Magritte, pintor surrealista belga (1898-1967), té un famós quadre que mostra una pipa. Just sota la pipa, Magritte va pintar *Ceci n'est pas une pipe* (Això no és una pipa). La seva afirmació es refereix al fet que l'obra en si no és una pipa, sinó simplement la imatge d'una pipa.

La famosa pipa, me l'han retret tantes vegades! Però es pot omplir la meua pipa? oi que no?, només és una representació. Per tant, si hagués escrit sota el quadre: "Això és una pipa", hauria mentit![12]



Figure 3: La pipa de René Magritte

De la mateixa manera, $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$ no és la transformació lineal sinó una de les seues representacions matricials. Fixem-nos que la transformació estaria representada per una altra matriu si triem altres bases dels espais $\mathbb{R}^2$ i $\mathbb{R}^3$, o si triem altres espais. En realitat, la transformació no és una matriu. Tampoc és la seua realització coordinada. La transformació lineal és una entitat abstracta, un operador, que admet aquestes (i altres) realitzacions i representacions.

References

- [1] J. Louck, *Recent Progress Towards a Theory of Tensor Operators in the Unitary Groups*, *Am. J. Phys.* 38 (1970) 3.
- [2] D.B. Lichtenberg, Chap. 5 in *Unitary Symmetry and Elementary Particles*, Academic Press, New York 1978.
- [3] W. Greine and B. Müller, Chap 3 in *Quantum Mechanics, Symmetries*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1989.
- [4] J. Paldus, *Unitary Group Approach to Many-electron Correlation Problem* Chap. 1 in *The Unitary Group*, Lecture Notes in Chemistry 22, Springer-Verlag, New York 1981.
- [5] M. Hamermesh, Chap. 8-9 in *Group Theory and its Application to Physical Problems*, Dover, New York 1962.
- [6] W. Duch, Chap. 1.6 in *GRMS or Graphical Representation of Model Spaces*, Lectures Notes in Chemistry 42, Springer-Verlag, Berlin 1986.
- [7] J. Planelles, *Teoria de Grups de Simetria*, Publicacions de la Universitat Jaume I, 1996.
- [8] R. Pauncz, *Spin Eigenfunctions, Construction and Use*, Plenum Press, New York 1979.
- [9] R. Pauncz, Chap. 8 in *The Symmetric Group in Quantum Chemistry*, CRC Press, Boca Raton 1995.
- [10] S. Wilson, Chap. 3 in *Electron Correlation in Molecules*, Clarendon Press, Oxford 1984.
- [11] I. Shavitt, *The Graphical Unitary Group Approach and its Applications to Direct Configuration Interaction Calculations*. Chap. 2 in *The Unitary Group*, Lecture Notes in Chemistry 22, Springer-Verlag, New York 1981.
- [12] https://ca.wikipedia.org/wiki/La_traïció_de_les_imatges