Bases Ortonormales de operadores tensoriales esfericos irreducibles, II.

Trabajo Especial de Licenciatura en Física, FAMAF-UNC

G.A. Raggio y L. Cagliero

1. Contexto y Objetivo:

Se propone la problemática de la construcción de una base (ortonormal) del espacio de las observables (operadores lineales actuando de un espacio de Hilbert) de un sistema de N spins de igual magnitud s ($s = 0, 1/2, 1, 3/2, \cdots$) cuyos elementos sean operadores tensoriales esféricos irreducibles (OTESI) con respecto a la acción unitaria del grupo de rotaciones. No es dificil convencerse de que una base de OTESI's nunca es unívoca.
El problema surge explicitamente en la tesis doctoral de C.J. Bonin [Bo] que construye una base con esta propiedad para 4 spins 1/2 (concretamente los cuatro protones magneticamente "activos" en la RMN de un cristal líquido molecular). Un primer paso –la descomposición en irreducibles de la representación unitaria de $SO(3)$ pertinente– se dió en un seminario [Ra]; que luego se elabora en una tesis de licenciatura, [Sz], que constituye un primer paso del presente plan de trabajo. Las enormes multiplicidades de las representaciones irreducibles que aparecen, no ayudan para restringir la libertad que hay en la construcción de una base de OTESI's. Ya en el seminario mencionado se observó que la representación de $SO(3)$ pertinente conmuta con la representación (también unitaria) natural del grupo de permutaciones (o grupo simétrico de orden N) $\mathcal{S}_N$. El objetivo básico de este nuevo plan de trabajo es el análisis de estas dos representaciones y, a partir de la descomposición en irreducibles de, por ejemplo, la representación de $SO(3) \times \mathcal{S}_N$, la busqueda de condiciones suplementarias a imponer a los OTESI's que se quieren construir para restringir significativamente la no-unicidad.

2. Formulación explícita

2.1. ¿OTESI?. Dado un espacio de Hilbert complejo $\mathcal{K}$ de dimensión finita y un trio de operadores $\mathbf{J} = (J_1, J_2, J_3)$ autoadjuntos J_j que satisfacen

$$[J_1, J_2] = iJ_3 \ , \quad \text{y permutaciones cíclicas de los índices} \ ,$$

sea

$$U_g := \exp\{-i\alpha\mathbf{e} \cdot \mathbf{J}\}$$

la representación unitaria de $SU(2)$ asociada via la parametrización de $SU(2)$ por un ángulo (α) y una dirección $(\mathbf{e})$[1]. Sea, para $g \in SU(2)$,

$$\rho_g(A) := U_g^* A U_g \ , \quad A \in \mathrm{End}(\mathcal{K}) \ ,$$

que define una representación de $SU(2)$ y, además[2] de $SO(3)$ que resulta unitaria si se dota a $\mathrm{End}(\mathcal{K})$ del producto escalar $(A, B) \mapsto tr(A^* B)$.

Sea j un semientero no-negativo arbitrario; escribamos $\mathbb{I}_j$ para el conjunto de $2j+1$ índices $\{-j+k : \ k = 0, 1, \cdots, 2j\}$. Dado un conjunto de $2j+1$ operadores $\mathbf{T}^{[j]} = \{T_m^{[j]} : \ m \in \mathbb{I}_j\}$ definidos en $\mathcal{K}$ las siguientes condiciones son equivalentes:

1. (Wigner)

$$\rho_g(T_m^{[j]}) = \sum_{m \in \mathbb{I}_j} (D^{[j]}(g))_{m',m} T_{m'}^{[j]} \ ,$$

para todo $g \in SU(2)$ y $m \in \mathbb{I}_j$; donde $(D^{[j]}(g))_{m',m}$ son los elementos de matriz de la representación unitaria irreducible $g \mapsto D^{[j]}(g)$ de $SU(2)$ de dimensión $2j+1$ respecto de la base ortonormal canónica $\{\psi_m^{[j]} : \ m \in \mathbb{I}_j\}$.

2. (Racah)

$$[J_3, T_m^{[j]}] = m T_m^{[j]} \quad , \quad [J_1 \pm i J_2, T_m^{[j]}] = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \ T_{m \pm 1}^{[j]}$$

para $m \in \mathbb{I}_j$;

y definen lo que se llama un operador tensorial esférico irreducible (respecto de $\mathbf{J}$) de rango j, lo que se abreviará como OTESI en lo que sigue.

El siguiente resultado elemental observado en el seminario mencionado

---

[1] Esta es la parametrización familiar y usual en mecánica cuántica dada explicitamente por:

$$SU(2) = \{\cos(\alpha/2) - i \sin(\alpha/2) \mathbf{e} \cdot \sigma : \ \alpha \in [0, 2\pi] \, , \ \mathbf{e} \in \mathbb{R}^3 \, , \ \mathbf{e} \cdot \mathbf{e} = 1\} \ ,$$

o bien

$$SU(2) = \{\exp\{-i\alpha(\mathbf{e} \cdot \sigma)/2\} : \ \alpha \in [0, 2\pi] \, , \ \mathbf{e} \in \mathbb{R}^3 \, , \ \mathbf{e} \cdot \mathbf{e} = 1\}$$

donde $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ son las matrices de Pauli dadas por

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \ , \ \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \ , \ \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \ .$$

[2] $SU(2)$ es el grupo de cubrimiento (doble) de $SO(3)$. $g \mapsto U_g$ resulta en general una representación proyectiva de $SO(3)$; pero los factores proyectivos desaparecen en ρ_g.

no ha recibido la atención necesaria.

Proposición:

1. Si la familia $\mathbf{T}^{[j]} \subset \mathrm{End}(\mathcal{K})$ de $2j+1$ operadores es un OTESI de rango j entonces el subespacio $<< \mathbf{T}^{[j]} >>$ de $\mathrm{End}(\mathcal{K})$ tiene dimensión $2j+1$, es invariante bajo la acción de ρ_g, $g \in SU(2)$, y es irreducible. Además, si $\mathbf{S}^{[j]} \subset \mathrm{End}(\mathcal{K})$ es otro OTESI del mismo rango y se verifica que $<< \mathbf{T}^{[j]} >>=<< \mathbf{S}^{[j]} >>$ entonces hay $z \in \mathbb{C}$ con $S_m^{[j]} = zT_m^{[j]}$, $m \in \{-j, \cdots, j\}$.
2. Si la restricción de ρ al subespacio $\mathcal{V}$ de $\mathrm{End}(\mathcal{K})$ es irreducible (necesariamente la dimensión de $\mathcal{V}$ es finita) entonces existe un OTESI $\mathbf{T}^{[j]} \subset \mathrm{End}(\mathcal{K})$ de rango $j = (dim(\mathcal{V}) - 1)/2$ tal que $\mathcal{V} =<< \mathbf{T}^{[j]} >>$.
3. Todo OTESI $\mathbf{T}^{[j]} \subset \mathrm{End}(\mathcal{K})$ es una base ortogonal de $<< \mathbf{T}^{[j]} >>$ y $\|T_m^{[j]}\|^2 = tr((T_m^{[j]})^* T_m^{[j]})$ es independiente de m.

Un corolario simple es: *No existen OTESIs de rango j no-entero, i.e.* $j \in \mathbb{N}$; pues las representaciones irreducibles de $SO(3)$ son de dimensión impar.

En resumen: Un OTESI es una base ortogonal –privilegiada por sus propiedades de transformación (que la hacen unívoca)– de un subespacio invariante irreducible de la acción de una representación unitaria de $SU(2)$ en (el álgebra de) los operadores sobre un espacio de Hilbert.

2.2. N spins de magnitud s. Para el matemático, un spin de magnitud s es una representación (unitaria) irreducible $\pi^{(s)}$ de $SU(2)$; esta actua en un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ de dimensión $2s+1$ y es unívoca hasta una transformación unitaria. Consideramos N de estos spins de igual magnitud; el espacio de Hilbert para este sistema es

$$\mathcal{H}_N := (\mathcal{H})^{\otimes N} ;$$

el producto tensorial de $\mathcal{H}$ consigo mismo N veces. Obtenemos inmediatamente una representación unitaria Π_N de $SU(2)$ actuando en $\mathcal{H}_N$ con

$$\Pi_N := \underbrace{\pi^{(s)} \otimes \pi^{(s)} \otimes \cdots \otimes \pi^{(s)}}_{N \text{ veces}} .$$

Considerando las "observables" de este sistema de spins o sea: los operadores lineales actuando en $\mathcal{H}_N$ denotados con $\mathrm{End}(\mathcal{H}_N)$; y tomando cualquier $g \in SU(2)$, definamos para cualquier $A \in \mathrm{End}(\mathcal{H}_N)$

$$U_g(A) := (\Pi_N)_g^* A (\Pi_N)_g = (\pi_g^{(s)} \otimes \pi_g^{(s)} \otimes \cdots \pi_g^{(s)})^* A (\pi_g^{(s)} \otimes \pi_g^{(s)} \otimes \cdots \pi_g^{(s)}) .$$

Esto nos da una representación de $SU(2)$ y además de $SO(3)$ actuando en $\mathrm{End}(\mathcal{H}_N)$ que, si munimos a este espacio vectorial con el producto escalar $\langle A, B\rangle = tr(A^*B)$, es una representación unitaria. Denotemos a esta representación unitaria con ρ_N. ρ_N es reducible (e.g. los multiplos del operador identidad constituyen un subespacio invariante no trivial). La descomposición en irreducibles

$$\rho_N = \bigoplus_{\ell\in\mathbb{L}_N} n(\ell, N)\pi^{(\ell)}$$

fue calculada explicitamente en el seminario y la tesis de licenciatura mencionados. El resultado es: $\mathbb{L}_N = \{0, 1, \cdots, 2sN\}$, o sea aparecen todas las representaciones unitarias irreducibles de dimensiónes $1, 3, 5, \cdots, 4sN + 1$ con multiplicidades $n(\ell, N)$ para las cuales se obtienen fórmulas recursivas explícitas.

Descomponiendo $\mathrm{End}(\mathcal{H}_N)$ en suma directa de subespacios irreducibles podemos elegir en cada uno de los $2sN + 1$ subespacios de dimensión $(2\ell + 1)n(\ell, N)$ un conjunto de $n(\ell, N)$ OTESIs, cada uno de orden ℓ, que es automáticamente una base ortonormal del subespacio en cuestión. Si bien, como se ve en el apartado 2.1, el subespacio de dimensión $2\ell+1$ generado por un OTESI de orden ℓ determina a este OTESI completamente salvo multiplicación por una constante, tenemos, cuando $n(\ell, N) > 1$[3], una enorme[4] libertad en la elección de los $n(\ell, N)$ OTESIs. Si queremos entonces especificar un algoritmo que construye una base de OTESIs es bueno imponer condiciones que restringen esta libertad.

2.3. La acción del grupo de permutaciones sobre las observables de N spins de magnitud s. Si bien, en las aplicaciones, los N spins de igual magnitud no son idénticos[5] podemos considerar la acción natural del grupo simétrico $\mathcal{S}_N$ de orden N (y grado $N!$) sobre $\mathrm{End}(\mathcal{H}_N)$ definida como extensión lineal de

$$V_\sigma(A_1 \otimes A_2 \otimes \cdots \otimes A_N) = A_{\sigma(1)} \otimes A_{\sigma(2)} \otimes \cdots A_{\sigma(N)} ,$$

$A_1, \cdots, A_N \in \mathrm{End}(\mathcal{H})$, donde $\sigma \in \mathcal{S}_N$. Es inmediato verificar que: a) $\sigma \mapsto V_\sigma$ es una representación unitaria y es por supuesto reducible[6]; y b) $V_\sigma U_g = U_g V_\sigma$ para todo $\sigma \in \mathcal{S}_N$ y todo $g \in SO(3)$ (resp. $SU(2)$).

[3] Lo que siempre es el caso salvo cuando $\ell = 2sN$.

[4] Veanse las tablas de multiplicidades del seminario y tesis de licenciatura citados.

[5] Por ejemplo en el caso de protones en una molécula que tienen distinto chemical-shift.

[6] Los operadores de la forma $A\otimes A\otimes\cdots\otimes A$ constituyen un subespacio invariante no trivial.

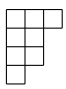
El alto grado de desarrollo de la teoría de representaciones de $\mathcal{S}_N$ y de $SU(2)$ (resp. $SO(3)$) junto a resultados generales sobre la representaciones del producto directo de dos grupos permiten sospechar que se podrá explicitar la descomposición de la representación $(g,\sigma) \mapsto U_g V_\sigma$ de $SO(3) \times \mathcal{S}_N$ y que esto nos brinde condiciones subsidiarias que impuestas a los OTESI nos permitan reducir significativamente la no-unicidad.

2.4. Elementos relevantes de la teoría de representaciones. En términos generales se conocen los ingredientes necesarios para encarar este problema, los cuales describimos a continuación.

1. Si G es un grupo de Lie compacto entonces toda representación de dimensión finita es unitaria y se descompone como suma directa de irreducibles. Si G_1 y G_2 son grupos de Lie compactos (en particular finitos) entonces $G_1 \times G_2$ es compacto y todas las representaciones irreducibles $G_1 \times G_2$ son exactamente el conjunto de productos tensoriales de una irreducible de G_1 por una de G_2 (ver por ejemplo [FH]).
2. En general, llamamos *partición* a una sucesión finita de números enteros no negativos $a = a_1 \geq a_2 \geq a_3 \geq \cdots \geq 0$. Si r es el útimo a_j no nulo, decimos que r es la *profundidad* de a. Si $\sum_j a_j = k$, decimos que a es una partición de k. En resumen, denotamos con
$$\mathcal{P}_r = \{a_1 \geq a_2 \geq \cdots \geq a_r > 0 : a_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}\}$$
las particiones de profundidad r, y con
$$\mathcal{P}_r(k) = \{a_1 \geq a_2 \geq \cdots \geq a_r > 0 : a_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \text{ y } \textstyle\sum_j a_j = k\}$$
las particiones de k de profundidad r. También denotamos

$\mathcal{P}_{\leq r} = \cup_{j=1}^r \mathcal{P}_r$	las particiones de profundidad a lo sumo r,
$\mathcal{P}(k) = \cup_{r \geq 1} \mathcal{P}_r(k)$	las particiones de k.
$\mathcal{P}_{\leq r}(k) = \cup_{j=1}^r \mathcal{P}_r(k)$	las particiones de k de profundidad a lo sumo r.

En general, las particiones se ilustran con su diagrama de Young:


$a = 3 \geq 2 \geq 2 \geq 1.$

3. Las representaciones irreducibles de $\mathcal{S}_N$ están parametrizadas por los diagramas de Young de tamaño N, es decir por $\mathcal{P}(N)$, las particiones de N. Denotamos por τ_Y la representación irreducible de $\mathcal{S}_N$ correspondiente a $Y \in \mathcal{P}(N)$.

4. Las representaciones irreducibles del grupo compacto $U(n)$ están en correspondencia con las representaciones irreducibles de dimensión finita de $\mathfrak{u}(n)$ o de $\mathfrak{gl}(n,\mathbb{C})$ en las que la identidad actúa diagonalizablemente. Éstas a su vez están parametrizadas por el conjunto de pesos dominantes de $U(n)$ o $\mathfrak{gl}(n,\mathbb{C})$ (esto es el Teorema del Peso Máximo).

   Si $\mathfrak{h}$ es el conjunto de matrices diagonales de $\mathfrak{gl}(n,\mathbb{C})$, y $\epsilon_j \in \mathfrak{h}^*$ es la funcional de $\mathfrak{h}$ que lee la coordenada j de una matriz diagonal, entonces los pesos dominantes de $\mathfrak{gl}(n,\mathbb{C})$ son las funcionales de $\mathfrak{h}$ de la forma

$$\{\lambda = a_1\epsilon_1 + a_2\epsilon_1 + \cdots + a_n\epsilon_n : a_1 \geq a_2 \geq \cdots \geq a_n \geq 0 \text{ y } a_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}\}.$$

   Es decir que los pesos dominantes de $\mathfrak{gl}(n,\mathbb{C})$ están parametizados por $\mathcal{P}_{\leq n}$, las particiones de profundidad a lo sumo n (éste es un conjunto infinito). Denotamos por π_Y la representación irreducible de $U(n)$ correspondiente a $Y \in \mathcal{P}_{\leq n}$.

5. Combinando (1), (3) y (4) sabemos que las representaciones irreducibles de $U(n)\times\mathcal{S}_N$ son producto tensorial de representaciones irreducibles de $U(n)$ por representaciones irreducibles de $\mathcal{S}_N$. En otras palabras, las representaciones irreducibles $U(n)\times\mathcal{S}_N$ son de la forma

$$\pi_{Y_1} \otimes \tau_{Y_2}$$

   donde (Y_1, Y_2) es un par ordenado de particiones (o diagramas de Young) con $Y_1 \in \mathcal{P}(N)$, $Y_2 \in \mathcal{P}_{\leq n}$.

   Una clase especial de representaciones de $U(n)\times\mathcal{S}_N$ son las correspondientes a la 'diagonal' (Y, Y) con $Y \in \mathcal{P}_{\leq n}(N)$.

6. **Dualidad de Schur.** Sea $\mathbb{C}^n$ la representación canónica de $U(n)$ (aunque es anecdótico en lo que sigue, esta representación corresponde al peso dominante ϵ_1). Entonces $U(n)\times\mathcal{S}_N$ actúa en $(\mathbb{C}^n)^{\otimes N}$ y su descomposición en irreducibles es:

$$(\mathbb{C}^n)^{\otimes N} = \bigoplus_{Y\in\mathcal{P}_{\leq n}(N)} \pi_Y \otimes \tau_Y$$

   El resultado es famoso, entre otreas cosas, por el hecho de que esta descomposición es libre de multiplicidad y aparecen solo representaciones de la 'diagonal' (ver por ejemplo [GW]).

7. Sea H_n la representación irreducible de dimensión n del grupo de Lie $SU(2)$. Ésta es exactamente la restrición a $SU(2) \subset U(n)$ de la representación canónica $\mathbb{C}^n$ de $U(n)$. La inclusión de $SU(2) \subset U(n)$ es justamente la dada por la acción de $SU(2)$ en $H_n = \mathbb{C}^n$. Esta inclusión tiene la propiedad excepcional de que la acción

irreducible de $U(n)$ en $\mathbb{C}^n$ permanece irreducible al restringir a $SU(2)$. Esto es, insistimos, excepcional: la representación irreducible π_Y de $U(n)$ es, en general, altamente reducible cuando restringimos a $SU(2) \subset U(n)$. Las multiplicidades de la descomposición

$$\pi_Y|_{SU(2)} = \sum_{j=1}^{\infty} m_{Y,j} H_j$$

se obtienen de la fórmula conocida como Hook-length and content formula (ver [St, Ch. 7]).

8. Combinando (6) y (7) obtenemos que la descomposición de $H_n^{\otimes N}$ como representación de $U(2) \times \mathcal{S}_N$ es

$$\begin{aligned} H_n^{\otimes N} &= \bigoplus_{Y \in \mathcal{P}_{\leq n}(N)} \pi_Y|_{SU(2)} \otimes \tau_Y \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} \bigoplus_{Y \in \mathcal{P}_{\leq n}(N)} m_{Y,j} \; H_j \otimes \tau_Y. \end{aligned}$$

Referencias

[Bo] Bonin, C.J., *Estudio de Cuasi-invariantes Dipolares en Cristales Líquidos Termotrópicos por Coherencias Cuánticas Múltiples en Resonancia Magnética Nuclear.* Tesis doctoral, Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba, 2011.

[FH] Fulton, W., Harris, J., *Representation Theory: A first course* Graduate Texts in Mathematics 129, Springer-Verlag.

[GW] Goodman, R., Wallach, N., *Representation and Invariants of the Classical Groups*, Cambridge University Press, 1998.

[Ra] Raggio, G.A.,*Reducción de la representación del grupo de rotaciones inducida en los observables de un sistema de N espines 1/2*; Seminario del Grupo de Teoría de la Materia Condensada, FaMAF, disponible en http://www.famaf.unc.edu.ar/ gtmc/node/84, 31 de Mayo de 2011.

[St] Stanley, R., *Enumerative Combinatorics, vol 2.*, Cambridge University Press, 1999.

[Sz] Sznajderhaus, N., *Multiplicidades de Operadores Tensoriales Esféricos Irreducibles en la Reducción de un Sistema de N espines de Valor s*, Tesis de Licenciatura en Ciencias Físicas, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales Universidad de Buenos Aires, Diciembre 2012.