Reducción de la representación del grupo de rotaciones inducida en los observables de un sistema de N espines $1/2$.

G.A. Raggio

FaMAF, Univ. Nac. de Córdoba; Córdoba, Argentina

raggio@famaf.unc.edu.ar

Seminario FaMAF-GTMC, 10/05/11

Motivación (I)

En la tesis reciente de Claudio J. Bonin –*Estudio de Cuasi - invariantes dipolares en cristales líquidos termotrópicos por coherencias cuánticas múltiples en resonancia magnética nuclear* [Tesis de doctorado en Física presentada a FaMAf en marzo de 2011]– se analizan espectros de RMN de protones (intramoleculares) de cristales liquidos (en fase nemática). El desarrollo del Hamiltoniano (dipolar) relevante que involucra entre 8 y 10 protones, en operadores tensoriales esféricos irreducibles juega un papel importante permitiendo clasificar e identificar las llamadas coherencias y formular estados especiales llamados cuasi-invariantes que se comportan como estados de cuasi-equilibrio térmico. En un modelo teórico para 4 protones Bonin presenta y utiliza una base de operadores tensoriales esféricos irreducibles que consta de: 14 escalares, 28 operadores vectoriales (o de rango 1), 20 operadores de rango 2, 7 de rango 3 y uno de rango 4.

Motivación (fin)

Son en total:

$$14 \times 1 + 28 \times 3 + 20 \times 5 + 7 \times 7 + 1 \times 9 = 256 = (2^4)^2 = 2^8$$

operadores que forman una base ortogonal del espacio de las observables de 4 espines $1/2$ acoplados.
¿Podemos "entender" estos números haciendo simplemente teoría del grupo de rotaciones? ¿Cuan arbitraria es la elección de esta base? ¿Que pasa en el caso de idénticos espines 1 (o si lo necesita $71/2$)? Estas son algunas de las preguntas que me surgieron al leer la tesis y que contesto en lo que sigue.
Por algún extraño motivo este ejercico elemental de la teoría de representaciones del grupo de rotaciones no parece haber encontrado su lugar en la bibliografía canónica de la RMN. Tampoco de la mecánica cuántica. En última instancia, el ejercicio conduce a un algoritmo (proceso automático) que construye una base de operadores tensoriales esféricos irreducibles. Este algoritmo es el que uso Bonin ¡sin hacer teoría de grupos!

Representaciones unitarias proyectivas

Grupo G y mapa de G en los unitarios de un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ (llamado espacio de representación), $g \mapsto U(g)$. Se habla de representación vectorial o representación a secas si

$$U(g)U(h) = U(gh) \ , \quad g, h \in G \ .$$

La representación se dice proyectiva si hay mapa σ de $G \times G$ en los complejos de módulo 1 tal que

$$U(g)U(h) = \sigma(g,h)U(gh) \ , \quad g, h \in G \ .$$

En mecánica cuántica interesan los rayos o subespacios unidimensionales en $\mathcal{H}$ ya que estos están en correspondencia con los estados puros. Entonces, para $\psi \in \mathcal{H}$ con $\|\psi\| = 1$, $U(g)U(h)\psi$ y $U(gh)\psi$ representan el mismo estado.

Reducibilidad

La representación unitaria proyectiva $\{U(g) : \; g \in G\}$ actuando en $\mathcal{H}$ se dice reducible si hay un subespacio $\mathcal{V} \subset \mathcal{H}$ no trivial ($\{0\} \neq \mathcal{V} \neq \mathcal{H}$) e invariante $U(g)\mathcal{V} \subset \mathcal{V}$ para todo g, o sea: para todo g se tiene $U(g)\psi \in \mathcal{V}$ si $\psi \in \mathcal{V}$. En caso contrario –los subespacios invariantes son solo los triviales– la representación es irreducible.

Para cierta clase de grupos (i.e., compactos & de Lie) toda representación unitaria proyectiva es completamente reducible. Hay subespacios invariantes $\mathcal{V}_n \subset \mathcal{H}$, dos-a-dos ortogonales, tales que

$$\mathcal{H} = \bigoplus \mathcal{V}_n \, ,$$

y la restricción de $U(g)$ a cada $\mathcal{V}_n$ es irreducible (el índice y la suma directa pueden ser continuos).

Representación de Heisenberg (Observables), I

Dada una representación unitaria proyectiva de G en el espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ podemos "levantarla" (o inducir) una representación que actua sobre (el espacio vectorial de) los operadores lineales de $\mathcal{H}$ (escritos $\mathcal{L}(\mathcal{H})$; las observables de la mecánica cuántica):

$$\Pi(g)A = U(g)AU(g)^* \ , \quad A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \ .$$

$\rightsquigarrow$ Obtenemos siempre una representación vectorial genuina ya que

$$\Pi(g)\Pi(h)A = U(g)U(h)AU(h)^*U(g)^* = \sigma(g,h)U(gh)A(U(g)U(h))^*$$

$$= \sigma(g,h)U(gh)A(\sigma(g,h)U(gh))^*$$

$$= |\sigma(g,h)|^2 U(gh)AU(gh)^* = \Pi(gh)A \ .$$

Representación de Heisenberg (Observables), fin

$\rightsquigarrow$ Si el espacio de Hilbert tiene dimensión finita, $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ tiene un producto escalar natural

$$\langle A, B\rangle := tr(A^* B) ,$$

y la representación Π resulta unitaria:

$$\langle \Pi(g)A, \Pi(g)B\rangle = tr((U(g)AU(g)^*)^*, U(g)BU(g)^*)$$

$$= tr(U(g)A^* U(g)^* U(g)BU(g)^*)$$

$$= tr(U(g)A^* BU(g)^*) = tr(U(g)^* U(g)A^* B) = \langle A, B\rangle .$$

$\rightsquigarrow$ Ya que los múltiplos de E, $\mathbb{C}\cdot E := \{zE : \ z \in \mathbb{C}\}$ constituyen un subespacio notrivial invariante, Π es siempre reducible.

Rotaciones $SO(3)$

El grupo de rotaciones del espacio euclideo tridimensional que dejan todas un punto fijo $\equiv SO(3) \equiv$ matrices reales 3×3 ortogonales de determinante 1.

Representaciones proyectivas irreducibles: $\pi^{[j]}$, con $j = \mathbb{N}/2$, que actuan en $\mathcal{H}^{[j]} \cong \mathbb{C}^{2j+1}$. Si $j \in \mathbb{N}$ entonces $\pi^{[j]}$ es equivalente a una representación vectorial. Si $j \in \mathbb{N} + \frac{1}{2}$ entonces $\pi^{[j]}$ es genuinamente proyectiva.

$\pi^{[j]}$ surge exponenciando un momento angular elemental $\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$ donde J_α actua en $\mathcal{H}^{[j]}$ cumpliendo con $[J_\alpha, J_\beta] = iJ_\gamma$ siendo (α, β, γ) una permutación cíclica de (x, y, z) y (condición de irreducibilidad) $J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = j(j+1)E$, siendo E la identidad en $\mathcal{H}^{[j]}$.

$SO(3)$ es un grupo de Lie compacto doblemente conexo cuyo grupo de cubrimiento simplemente conexo es $SU(2)$.

El problema de Bonin

Considere N espines $1/2$. O sea el producto tensorial de N copias de $\pi^{[1/2]}$:

$$\underbrace{\pi^{[1/2]} \otimes \pi^{[1/2]} \otimes \cdots \otimes \pi^{[1/2]}}_{N \text{ veces}} \text{ actuando en } \mathcal{H}_N := \bigotimes_{n=1}^{N} \mathbb{C}^2 \, .$$

Serie de Clebsch-Gordan: Si N es par esto es una representación vectorial equivalente a $\bigoplus_{k=0}^{N/2} \pi^{[k]}$; si N es impar, la representación es genuinamente proyectiva e equivalente a $\bigoplus_{k=0}^{(N-1)/2} \pi^{[k+(1/2)]}$.

La representación –denotada por Π_N– inducida en las correspondientes observables $\mathcal{L}(\mathcal{H}_N)$ es:

$\Pi_N = \underbrace{\Pi_1 \otimes \Pi_1 \otimes \cdots \otimes \Pi_1}_{N \text{ veces}}$, pues $\mathcal{L}(\mathcal{H}_N) = \otimes_{k=1}^{N} \mathcal{L}(\mathcal{H}_1)$. En ambos casos es vectorial. Por lo tanto:

$$\Pi_N = \bigoplus_{\ell \in \mathbb{L} \subset \mathbb{N}} n(\ell, N) \pi^{[\ell]} \, .$$

Encuentre las irreducibles que aparecen, o sea $\mathbb{L}$, y sus multiplicidades $n(\cdot, N)$.

Reducción de Π_N (I)

LEMA 1: $\Pi_1 = \pi^{[1]} \oplus \pi^{[0]}$.

LEMA 2: $\pi^{[k]} \otimes \pi^{[1]} = \pi^{[k+1]} \oplus \pi^{[k]} \oplus \pi^{[k-1]}$ para $k = 1, 2, \cdots$.

TEOREMA 1: $\mathbb{L} = \{0, 1, 2, \cdots, N\}$ y $n(k, N)$ es la solución del siguiente sistema recursivo:

$$n(N, N) = 1 \text{ para todo } N \;;$$

$$\text{(Inicialización)} \;\; n(0, 1) = n(1, 1) = 1 \;;$$

$$n(0, N+1) = n(0, N) + n(1, N) \;;$$

$$n(k, N{+}1) = 2n(k, N) + n(k{-}1, N) + n(k{+}1, N) \;, \quad k = 1, 2, \cdots, N \;.$$

Reducción de Π_N (II)

$N \setminus k$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	2	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0
3	5	9	5	1	0	0	0	0	0	0	0
4	14	28	20	7	1	0	0	0	0	0	0
5	42	80	75	35	9	1	0	0	0	0	0
6	122	277	265	154	54	11	1	0	0	0	0
7	399	941	961	627	273	77	13	1	0	0	0
8	1340	3242	3490	2488	1250	440	104	15	1	0	0
9	4582	11314	12710	9716	5428	2234	663	135	17	1	0
10	15896	39920	46450	37570	22806	10559	3695	950	170	19	1

$N = 2$

$$\text{en } \mathcal{H}^{[1/2]} \otimes \mathcal{H}^{[1/2]} \quad \pi^{[1/2]} \otimes \pi^{[1/2]}$$

$$\downarrow$$

$$\text{en } \mathcal{L}(\mathcal{H}^{[1/2]}) \otimes \mathcal{L}(\mathcal{H}^{[1/2]}) \quad (\pi^{[1]} \oplus \pi^{[o]}) \otimes (\pi^{[1]} \oplus \pi^{[o]})$$

$$= [\pi^{[1]} \otimes \pi^{[1]}] \oplus [\pi^{[1]} \otimes \pi^{[o]}] \oplus [\pi^{[o]} \otimes \pi^{[1]}] \oplus [\pi^{[o]} \otimes \pi^{[o]}]$$

$$[\pi^{[1]} \otimes \pi^{[1]}] \leftrightsquigarrow I_\alpha^{[1]} \otimes I_\beta^{[1]}$$

$$[\pi^{[1]} \otimes \pi^{[o]}] \leftrightsquigarrow I_\alpha^{[1]} \otimes E \quad , \quad [\pi^{[o]} \otimes \pi^{[1]}] \leftrightsquigarrow E \otimes I_\alpha^{[1]}$$

$$[\pi^{[o]} \otimes \pi^{[o]}] \leftrightsquigarrow E \otimes E \; .$$

$$\Longrightarrow [\pi^{[2]} \oplus \pi^{[1]} \oplus \pi^{[o]}] \oplus \pi^{[1]} \oplus \pi^{[1]} \oplus \pi^{[o]}$$

Reducción de Π_N (III): el caso de espin 1

$$\mathbb{L}_1(N) = \{0, 1, 2, \cdots, 2N\} \; ; \quad n(2N, N) = 1 \quad ;$$

$$(\text{Inicialización}) n(0,1) = n(1,1) = n(2,1) = 1 \; ;$$

$$n(k, N+1) = n(k-2, N) + 2n(k-1, N) + 3n(k, N)$$

$$+2n(k+1, N) + n(k+2, N) \; , \quad k = 2, \cdots, 2N+1 \; ,$$

$$n(1, N+1) = n(0, N) + 3n(1, N) + 2n(2, N) + n(3, N) \; ,$$

$$n(0, N+1) = n(0, N) + n(1, N) + n(2, N) \; .$$

$N \setminus k$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0
2	3	6	6	3	1	0	0	0	0	0	0
3	15	36	40	29	15	5	1	0	0	0	0
4	91	232	280	238	154	76	28	7	1	0	0
5	603	1585	2025	1890	1398	837	405	155	45	9	1

Reducción de Π_N (fin): el caso de espin s

$\mathbb{L}_s(N) = \{0, 1, 2 \cdots, 2sN\}$ &
$n(0,1) = n(1,1) = \cdots = n(2s,1) = 1$ & $n(2sN, N) = 1$ &
relación de recurrencia con $4s+1$ antecesores:

$$n(k, N+1) = \phi_k \left(\underbrace{n(k-2s, N), \cdots, n(k+2s, N)}_{4s+1} \right)$$

¡DIVIERTASE!

Para no olvidar: Π_N siempre conmuta con la representación del grupo de la permutaciones de N objetos $\mathcal{S}_N$.

Deshojando la margarita: Operadores tensoriales irreducibles (I)

Dada una representación unitaria $\{U(g): \ g \in SO(3)\}$ en un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$, un *operador tensorial esférico irreducible (OTESI)* de rango j ($j \in \mathbb{N}/2$) es un conjunto de $2j+1$ operadores $\mathbf{T}^{[j]} = \{T_m^{[j]} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}): \ m = -j, -j+1, \cdots, j\}$, tal que

$$U(g)\, T_m^{[j]}\, U(g)^* = \sum_{\ell=-j}^{j} D^{[j]}(g)_{m,\ell}\, T_\ell^{[j]} \ ,$$

donde $D^{[j]}(g)_{n,m}$ son los elementos de la matriz asociada con $U^{[j]}(g)$ en la base $\{\psi_k: \ k = -j, -j+1, \cdots, j-1, j\}$ de $\mathbb{C}^{2j+1}$ que diagonaliza al operador $I_3^{[j]}$. O sea, $I_3^{[j]}\psi_k = k\psi_k$.

Equivalentemente (Racah), si $\mathbf{J}$ es el momento angular asociado a $U(g)$,

$$[J_3, T_m^{[j]}] = m T_m^{[j]} \ ; \ \ [J_\pm, T_m^{[j]}] = \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\ T_{m\pm 1}^{[j]} \ .$$

Si quiere masitas conteste:

¿Hay OTESI's semienteros?

Deshojando la margarita: Operadores tensoriales irreducibles (II)

TEOREMA 2: Sea $\{U(g) : \ g \in SO(3)\}$ una representación unitaria en un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ de dimensión finita y con representación inducida Π sobre $\mathcal{L}(\mathcal{H})$.

1. Si $\mathbf{T}^{[j]}$ es un OTESI de rango j entonces $\mathcal{V} = lin\{\mathbf{T}^{[j]}\}$ es invariante para Π y la restricción de Π a $\mathcal{V}$ es irreducible y equivalente a $\pi^{[j]}$. Además, si $\mathbf{S}^{[j]}$ es otro OTESI tal que $\mathcal{V} = lin\{\mathbf{S}^{[j]}\}$ entonces hay un escalar c tal que $\mathbf{S}^{[j]} = c\mathbf{T}^{[j]}$.
2. Si $\mathcal{W} \subset \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es un subespacio invariante para Π tal que $\Pi|\mathcal{W}$ es irreducible (y de rango ℓ) entonces hay un OTESI $\mathbf{T}^{[\ell]}$ tal que $\mathcal{W} = lin\{\mathbf{T}^{[\ell]}\}$.
3. Cualquier OTESI $\mathbf{T}^{[j]}$ es una base ortogonal de $lin\{\mathbf{T}^{[j]}\}$.

Deshojando la margarita: Operadores tensoriales irreducibles (III)

Clave:

$$\mathcal{J}_\alpha(A) := [J_\alpha, A] \ , \ \ A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \ ,$$

es autoadjunto para $\alpha = 1, 2, 3$.

COROLARIO: Sea $\mathcal{V} \subset \mathcal{L}(\mathcal{H}_N)$ un subespacio invariante para Π_N tal que $\Pi_N|_{\mathcal{V}} \cong \pi^{[\ell]}$. Módulo multiplicación por una constante existe un único OTESI $\mathbf{T}^{[\ell]} \subset \mathcal{V}$ y este es automáticamente una base ortogonal de $\mathcal{V}$. Además, si $S \in \mathcal{V}$ satisface $[J_3, S] = mS$ para algún $m \in \{-\ell, -\ell+1, \cdots, \ell\}$, entonces hay un escalar z tal que $(J_+)^p S = z T^{[\ell]}_{p+m}$ y $(J_-)^q S = z T^{[\ell]}_{m-q}$ para $p = 0, 1, \cdots, \ell - m$ y $q = 0, 1, 2, \cdots, \ell + m$.

Deshojando la margarita (IV)

El OTESI de rango máximo N es único: $\mathbf{T}^{[N]}$

1. Elija un S tal que $[J_3, S] = (N-1)S$ & $tr(ST^{[N]}_{N-1}) = 0$. Genere un $\mathbf{T}^{[N-1]}$ con el Corolario. Elija un S_1 tal que $tr(S_1^* T^{[N]}_{N-1}) = tr(S_1^* T^{[N-1]}_{N-1}) = 0$ y $[J_3, S_1] = (N-1)S_1$. Genere otro $\mathbf{T}^{[N-1]}$ con el Corolario. Repita $n(N-1, N)$ veces
.
2. Elija un S ortogonal a $T^{[p]}_{N-2}$ para $p = N, N-1$ que cumpla $[J_3, S] = (N-2)S$. Repita $n(N-2, N)$ veces.
3. Repita el punto anterior hasta deshojar $N-3$, $N-4$, $\cdots$, 1.
4. Le quedan $n(0, N)$ operadores escalares uno de los cuales puede elegirse como E.

Deshojando la margarita (V)

Mucho mejor es apelar a la tabla universal de "coeficientes de Clebsch-Gordan" para momentos angulares enteros. Entonces la base ortogonal de OTESI's que buscamos es:

$$\sum_{j=1}^{N}\sum_{\ell_j=0}^{1}\sum_{m_j=-\ell_j}^{\ell_j} C(\ell_1, m_1; \ell_2, m_2; \cdots ; \ell_N, m_N || \ell, m_1 + m_2 + \cdots + m_N)$$

$$I_{m_1}^{[\ell_1]} \otimes I_{m_2}^{[\ell_2]} \otimes \cdots \otimes I_{m_N}^{[\ell_N]} \ ;$$

donde:

$$I_o^{[o]} = E \ ,; \ \ I_{\pm}^{[1]} = (J_x^{[1/2]} \pm i J_y^{[1/2]})/\sqrt{2} \ , \ \ I_0^{[1]} = J_z^{[1/2]} \ .$$

$N = 2$

$$\text{en } \mathcal{H}^{[1/2]} \otimes \mathcal{H}^{[1/2]} \qquad \pi^{[1/2]} \otimes \pi^{[1/2]}$$

$$\downarrow$$

$$\text{en } \mathcal{L}(\mathcal{H}^{[1/2]}) \otimes \mathcal{L}(\mathcal{H}^{[1/2]}) \quad (\pi^{[1]} \oplus \pi^{[o]}) \otimes (\pi^{[1]} \oplus \pi^{[o]})$$

$$= [\pi^{[1]} \otimes \pi^{[1]}] \oplus [\pi^{[1]} \otimes \pi^{[o]}] \oplus [\pi^{[o]} \otimes \pi^{[1]}] \oplus [\pi^{[o]} \otimes \pi^{[o]}]$$

$$[\pi^{[1]} \otimes \pi^{[1]}] \leftrightsquigarrow I_\alpha^{[1]} \otimes I_\beta^{[1]}$$

$$[\pi^{[1]} \otimes \pi^{[o]}] \leftrightsquigarrow I_\alpha^{[1]} \otimes E \quad , \quad [\pi^{[o]} \otimes \pi^{[1]}] \leftrightsquigarrow E \otimes I_\alpha^{[1]}$$

$$[\pi^{[o]} \otimes \pi^{[o]}] \leftrightsquigarrow E \otimes E \ .$$

$$\Longrightarrow [\pi^{[2]} \oplus \pi^{[1]} \oplus \pi^{[o]}] \oplus \pi^{[1]} \oplus \pi^{[1]} \oplus \pi^{[o]}$$

$$T^{[2]}_{2} = J_+ \otimes J_+ \ , \quad T^{[2]}_{-2} = J_- \otimes J_-$$

$$T^{[1]}_{1} = \frac{J_+ \otimes J_o + J_o \otimes J_+}{\sqrt{2}} \ , \quad T^{[2]}_{-1} = \frac{J_- \otimes J_o + J_o \otimes J_-}{\sqrt{2}}$$

$$T^{[2]}_{0} = \frac{J_+ \otimes J_- + J_- \otimes J_+ + 2J_o \otimes J_o}{\sqrt{6}}$$

$$T^{[1]}_{1} = \frac{J_+ \otimes J_o - J_o \otimes J_+}{\sqrt{2}} \ , \quad T^{[1]}_{-1} = \frac{J_o \otimes J_- - J_- \otimes J_o}{\sqrt{2}}$$

$$T^{[1]}_{0} = \frac{J_+ \otimes J_- - J_- \otimes J_+}{\sqrt{2}}$$

$$T^{[0]}_{0} = \frac{J_+ \otimes J_- + J_- \otimes J_+ - J_o \otimes J_o}{\sqrt{3}}$$

$$^{<10>}T^{[1]}_{\alpha} = J_\alpha \otimes E \ , \quad ^{<01>}T^{[1]}_{\alpha} = E \otimes J_\alpha \ , \quad ^{<00>}T^{[0]}_{0} = E \otimes E \ .$$