1 Grups continus

1.1 Introducció: la Simetria

Comencem per clarificar el significat concret de simetria. Diem que un objecte és simètric si hi ha transformacions que aplicades a l'objecte el deixa inalterat. Per exemple, si rotem un cercle al voltant d'un eix perpendicular que passe pel seu centre, aleshores el cercle roman inalterat, encara que els seus punts s'han mogut. Diem que el cercle presenta una simetria rotacional perfecta al voltant d'aquest eix. Tanmateix, si rotem $\pi/2$ un quadrat al voltant d'un eix perpendicular que passe pel seu centre, tampoc aquest canvia, malgrat que els seus punts si que han canviat de posició. Diem que el quadrat té menys simetria que el cercle. De fet, les rotacions $\pi/2$ del quadrat són un subconjunt discret del conjunt continu de rotacions del cercle. En certa manera podríem, usant nomenclatura de la física fonamental, definir el quadrat com una *reducció o trencadura de simetria* rotacional del cercle, donant lloc a un objecte de menor simetria rotacional (el quadrat). De manera semblant, podem dir que els cristalls trenquen la perfecta simetria translacional de l'espai buit. En aquest cas, les infinites simetries translacionals del cristall són un subconjunt de les infinites simetries translacionals de l'espai buit. Aquests són dos infinits d'ordre diferent. Mentre que en el cristall aquest infinit se pot etiquetar amb nombres enters (és numerable) les simetries de l'espai buit cal etiquetar-les amb nombres reals (és no numerable). Abundant en el llenguatge físic, podem dir, referint-nos al cristall, que la perfecta simetria translacional de les lleis de la física *se trenquen* amb amb potencial cristal·lí, donant lloc a una menor simetria translacional. Aquest concepte que identifica el subconjunt de simetries amb una trencadura de simetria del conjunt més gran és de gran utilitat en física, des d'interpretar las distintes forces fonamentals (gravitacional, electromagnètica, feble i forta) com el resultat d'una reducció o trencadura de simetria associada a una transició de fase que origina els astres de l'univers a partir del magma inicial, fins la interpretació de desdoblament de senyals espectroscòpiques com el resultat d'un potencial pertorbatiu addicional de simetria inferior a la del sistema sense aquest potencial.

La simetria impregna en tal manera la física, que seria complicat fer física ometent tota referència a la simetria. Ara cal tractar d'entendre perquè i com actua la simetria (concretament i millor dit, el conjunt de les transformacions de simetria). La primera propietat rellevant és que aquest conjunt està estructurat. Té allò que s'anomena estructura de *grup*. En efecte, el conjunt G d'aquestes transformacions amb la llei de composició *aplicació successiva* de les transformacions és tancat (i.e., si anomenem $*$ a la llei de composició i g_i,g_j a dues transformacions, aleshores $g_i * g_j \in G$). La llei $*$ és associativa (si g_i,g_j,$g_k \in G$, aleshores $(g_i * g_j) * g_k = g_i * (g_j * g_k)$). G conté un element neutre (existeix la transformació e (*no fer res*) que composada amb qualsevol $g_i \in G$ dóna lloc a ella mateixa: $g_i * e = e * g_i = g_i$). Cada element g_i de G conté el seu invers g_i^{-1}. En efecte, si l'objecte no canvia en transformar els seus punts mitjançat g_i, vol dir que punt inicial i final són indistingibles, si partim de punt final, la transformació dels seus punts tornant-los a la posició inicial que anomenem g_i^{-1} és òbviament una operació de simetria i per tant pertany a G.

Aquesta estructura de grup no és una simple curiositat. Té implicacions molt rellevants, des de les més immediates com ara de saber que una molècula que presenta moment dipolar i un eix de rotació, el moment dipolar d'una molècula ha d'estar sobre aquest eix (si el moment dipolar no està sobre l'eix, la rotació sobre aquest eix canviaria el moment dipolar, cosa que vol dir que no seria una simetria, contra la hipòtesi inicial), fins les més elaborades com ara saber si una integral és zero sense tenir de calcular-la o si una transició espectroscòpica és possible, sense haver de fer l'experiment.

Per poder explotar l'estructura de grup de les simetries d'un objecte cal *passar a fórmules i números* els moviments que fem sobre l'objecte (el sistema) i la llei *aplicació successiva* i aleshores mirant aquestes fórmules i números visualitzar el sistema que se transforma. És com fer una pel·lícula. Per suposat que no és exactament igual veure el film bidimensional que la realitat tridimensional, però és suficient per a la finalitat que perseguim.

I com ho fem? Doncs identificant el nostre grup amb un grup conegut. Aquesta identificació s'anomena *representació* del grup i si el grup en qüestió és un conjunt de matrius amb la llei de composició el producte matricial, aquesta representació s'anomena *representació lineal o matricial* del grup.

Però com podem garantir que una identificació no ens porte a contradiccions? Doncs imposant que no puga fer-ho, que en llenguatge matemàtic és establir un *homomorfisme*, que no vol dir més que triar identificacions que respectem l'operatòria del grup. És a dir, si anomenem g_i i g_j a dues transformacions qualsevol del grup original i establim amb la correspondència h la relació amb m_i i m_j del grup matricial, $h(g_i) = m_i$, $h(g_j) = m_j$, aleshores si $*$ i $\cdot$ són les operacions de cada grup cal que $h(g_i * g_j) = h(g_i) \cdot h(g_j)$.

Aleshores, donat un grup podem trobar totes les seues representacions essencialment diferents (no equivalents) i amb elles, un càlcul matricial simple permet aplicar i obtenir totes les conseqüències físiques que deriven de la simetria que, gairebé, és tota la física. Per exemple, hi ha conservació del moment lineal si l'espai on es mou el sistema és homogeni, hi ha conservació de moment angular quan hi ha isotropia, etc. Hi ha un teorema, el teorema de Noether, que demostra que tots el principis de conservació, que és una altra forma d'establir l'existència d'invariats en el sistema, deriven de l'existència d'una simetria en l'esmentat sistema. Per exemple, simetria translacional, que equival a homogeneïtat de l'espai, implica invariància del moment lineal, homogeneïtat del temps implica conservació d'energia, etc.

1.2 Grups discrets i grups continus

Quan hem parlat del cercle i el quadrat hem vist una diferència essencial. En el primer cas és un grup *no numerable*, i.e. hi ha més operacions que nombres enters $\mathbb{Z}$. En el segon és un grup *numerable* i.e. té igual o menys operacions que $\mathbb{Z}$. En particular, hi ha un nombre *finit* de transformacions del quadrat i per això diem que se tracta d'un *grup finit*.

L'etiquetatge de les operacions d'un grup *no numerable* no poden fer-se sobre $\mathbb{Z}$, l'index i està en correspondència amb un o més nombres reals $\mathbb{R}$. És a dir, aquest índex depèn d'una o més variables reals contínues. Per tant, hem de fer la identificació de cada element del grup G amb un element o *punt* d'un espai topològic. És a dir, d'un espai que, almenys *localment*, semble un interval de $\mathbb{R}$ (o una *bola* o interval N-dimensional de $\mathbb{R}^N$). A aquests espais topològics que semblen localment $\mathbb{R}^N$ s'anomenen *varietat diferenciables* i el grups continus que se corresponen amb varietats diferenciables, s'anomenen *grups de Lie*.

Podem contemplar els grups de Lie com una varietat suau (és a dir contínua i diferenciable) de punts amb una llei de composició o *producte* que és també suau dins de la varietat, així com ha de ser suau el càlcul d'inverses (dues operacions *veïnes* tindran inverses que podran estar lluny però seran dues noves operacions *veïnes*).

Entre els grup de Lie, son especialment importants els que són *compactes*. La superfície S^2 d'una esfera és un subespai compacte de $\mathbb{R}^3$, mentre que el plànol $\mathbb{R}^2$ no ho és. Compacitat significa que l'espai està enllaçat o tancat. Els anomenat grups clàssics de Lie són *compactes*, cosa que té com a conseqüència que totes les seues representacions són finito-dimensionals i són relativament fàcils de construir i de treballar amb elles. La compacitat en grups matricials vindrà relacionada en l'existència de límits (qualsevol successió de matrius té el límit dins del grup) i finitud del determinants de les matrius. Però aquests detalls se veuràn en tot cas, quan estudiem els grups clàssics.

1.2.1 Un exemple senzill

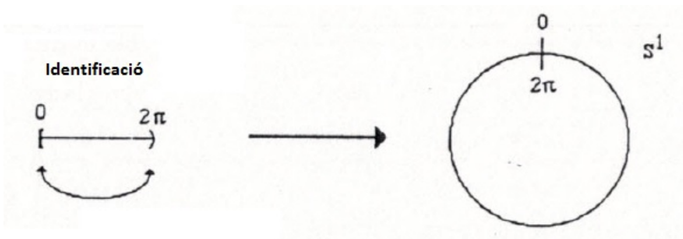
Considerem de nou el grup SO2 de rotacions d'angle θ al voltant d'un eix perpendicular a un cercle que passe pel seu centre, que etiquetem R_θ. De seguida observem que, de manera natural, hem etiquetat els elements d'aquest conjunt amb un paràmetre continu real θ. Tanmateix, atès que una rotació d'angle $\theta + 2\pi$ fa cap al mateix lloc que una rotació d'angle θ, hem de considerar aquestes dues rotacions com equivalents o, en altres paraules, hi ha prou amb l'interval $[0, 2\pi) \in \mathbb{R}$ per etiquetar tots els elements d'SO2.

Una vegada resolt el tema de les etiquetes, procedim a passar aquestes rotacions a formules i números, és a dir, procedim a representar aquest grup. Una identificació natural de R_θ és la matriu 2×2 que efectua la rotació dels eixos coordinats en $\mathbb{R}^2$, $\mathbb{M}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$.

Fet açò, la primera cosa que cal comprovar és si aquesta representació, $h(R_\theta) = \mathbb{M}(\theta)$, respecta l'operatòria del grup. És a dir, si és un *homomorfisme*: $h(g_i * g_j) = h(g_i) \cdot h(g_j)$. Hem de comprovar que, de la mateixa manera que $R_{\theta_1} * R_{\theta_2} = R_{\theta_1+\theta_2}$, també $\mathbb{M}(\theta_1) \cdot \mathbb{M}(\theta_2) = \mathbb{M}(\theta_1 + \theta_2)$. En efecte:

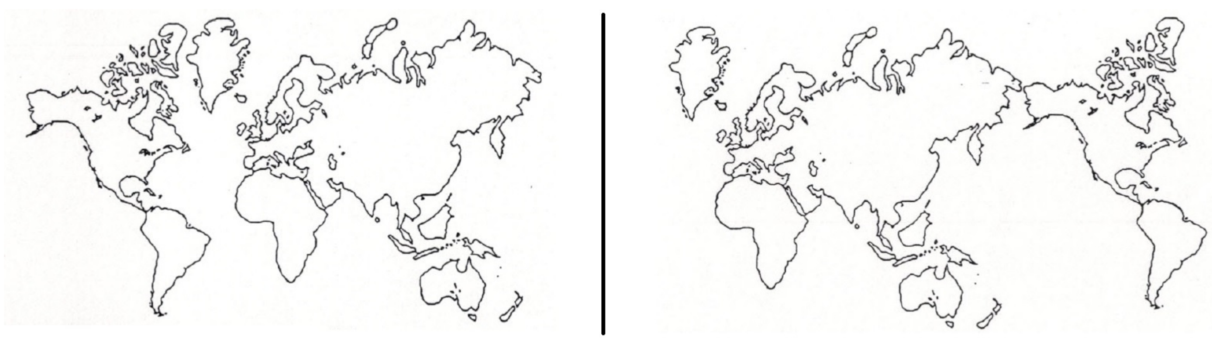
$$
\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \cos\theta_1 & \sin\theta_1 \\ -\sin\theta_1 & \cos\theta_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos\theta_2 & \sin\theta_2 \\ -\sin\theta_2 & \cos\theta_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos\theta_1\cos\theta_2 - \sin\theta_1\sin\theta_2 & \cos\theta_1\sin\theta_2 + \sin\theta_1\cos\theta_2 \\ -\sin\theta_1\cos\theta_2 - \cos\theta_1\sin\theta_2 & -\sin\theta_1\sin\theta_2 + \cos\theta_1\cos\theta_2 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos(\theta_1+\theta_2) & \sin(\theta_1+\theta_2) \\ -\sin(\theta_1+\theta_2) & \cos(\theta_1+\theta_2) \end{pmatrix} \qquad (1)
\end{aligned}
$$

Tornem sobre les etiquetes. Hem dit que $\theta \in [0, 2\pi) \subset \mathbb{R}$, però mentre que $\theta = 0$ i $\theta = 2\pi$ són dos punts diferents en $\mathbb{R}$, les rotacions associades són la mateixa rotació. És a dir, fem una identificació dels extrems de l'interval. Com mostra la figura, convertim l'interval obert $[0, 2\pi)$ en una circumferència S^1:



Cal adonar-se d'un detall: la variable o etiqueta θ està definida en l'interval $[0, 2\pi)$ de $\mathbb{R}$, mentre que és la circumferència S^1 qui representa les rotacions d'SO2 i les seues relacions de veïnat. Així, mentre que les etiquetes 0 i $(2\pi - \delta)$, amb δ un infinitèsim, no són veïnes en $\mathbb{R}$, si que ho són les rotacions que elles etiqueten (les quals presenten les relacions de proximitat i veïnatge de la circumferència S^1).

Localment, S^1 sembla un interval de $\mathbb{R}$, però globalment no. No obstant això, de manera local, les relacions de proximitat de S^1 i qualsevol interval de $\mathbb{R}$ se corresponen. En efecte, considerem per exemple els intervals oberts $(-\pi, \pi)$ i $(0, 2\pi)$ de $\mathbb{R}$. La correspondència $\theta \to \mathbb{M}(\theta)$ conserva les relacions de veïnatge en cada interval per separat. Podem dir, doncs que *localment* S^1 (o SO2) presenta les mateixes relacions de veïnat que els intervals de $\mathbb{R}$ amb els que hem establert correspondència. Per tant, localment podem usar $\mathbb{R}$ com un mapa de SO2. Però per poder transitar per tot SO2 ens fa falta més d'un mapa. És semblant al que passa amb la geografia. A l'esquerra de la figura 2 mostra un conegut mapa del mon i a la dreta un altre mapa semblant, però centrat en l'oceà pacífic.



Sabem que, seguint el corresponent paral·el, Alaska i Sibèria estan separades per una curta distància (l'estret de Bering). Aquest fet queda perfectament reflectit en el mapa de la dreta. Tanmateix, també és possible, seguint el mateix paral·el, fer un llarg camí entre Alaska i Sibèria, com be queda reflectit en el mapa de l'esquerra. Totes dues descripcions donades per un i altre mapa no són contradictòries. L'altra cosa que s'evidencia és que cal més d'un mapa per poder tenir la descripció completa de les relacions de veïnat del mon. La mateixa cosa passa amb les rotacions de SO2 i els *mapes* o intervals de la recta real $\mathbb{R}$: no hi ha manera de projectar una petita circumferència sobre tota la recta real (el pol nord no té imatge). Ens fan falta almenys dues projeccions (dos mapes), encara que *localment* la descripció és perfecta: un interval de S^1 i un interval de $\mathbb{R}$ no són idèntics però se corresponen perfectament, de manera contínua i sense cap brusquedat. És la dir, la correspondència és contínua i diferenciable.

De la mateixa manera que a partir d'un conjunt funcions $f(x)$ diferenciables, efectuant la derivada $f'(x)$, podem generar altres funcions que poden formar part o no d'aquest conjunt, a partir de la varietat diferenciable SO2 podem generar altres matrius que, de fet, no pertanyen a aquest grup de matrius. De manera semblant al fet que la derivada d'una funció la identifiquem amb la seua tangent, les matrius generades per derivació diem que formen part de *l'espai tangent* a la varietat.

Formalment podem escriure que:

$$\frac{d\,\mathbb{M}(\theta)}{d\theta} = \lim_{\delta\to 0} \frac{\mathbb{M}(\theta+\delta)-\mathbb{M}(\theta)}{\delta} = -\begin{pmatrix} \sin\theta & -\cos\theta \\ \cos\theta & \sin\theta \end{pmatrix} \tag{2}$$

En particular, la tangent $\mathbb{X}$ sobre la identitat $(\theta \to 0)$ resulta:

$$\mathbb{X} = (\frac{d\,\mathbb{M}(\theta)}{d\theta})_0 = \frac{\mathbb{M}(d\theta)-\mathbb{M}(0)}{d\theta} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{3}$$

Comprovem, efectuant la multiplicació de matrius, que: $\frac{d\,\mathbb{M}(\theta)}{d\theta} = \mathbb{X}\cdot\mathbb{M}(\theta)$, i.e., $\frac{d\,\mathbb{M}(\theta)}{\mathbb{M}} = \mathbb{X}\,d\theta$. La solució d'aquesta equació diferencial és immediata: $\mathbb{M}(\theta) = \exp[\theta\,\mathbb{X}]$. Per aquest motiu, al tangent $\mathbb{X}$ s'anomena generador infinitesimal del grup SO2, atès que representa un desplaçament infinitesimal respecte de la identitat del grup i, mitjançant l'aplicació exponencial, pot generar totes les operacions de SO2.

Alternativament, escrivim $\mathbb{M}(d\theta) = \mathbb{M}(0) + d\theta\,\mathbb{X} = \mathbb{I} + d\theta\,\mathbb{X}$. Des de la definició $e = (1+N^{-1})^N$ amb $N\to\infty$, si escrivim $\theta = N\,d\theta$ i atès que $\mathbb{M}(\theta) = \mathbb{M}(d\theta)^N$ amb $N\to\infty$, podem escriure que:

$$\mathbb{M}(\theta) = \left[\left(\mathbb{I} + (d\theta\,\mathbb{X})^{-1}\right)^{(d\theta\,\mathbb{X})^{-1}}\right]^{N d\theta\,\mathbb{X}} = \exp[N d\theta\,\mathbb{X}] = \exp[\theta\,\mathbb{X}].$$

El tangent $\mathbb{X}$ està relacionat amb l'operador de moment angular. En efecte, de la mateixa manera que l'operador $e^{a\,\frac{d}{dx}}$ genera una translació de la funció $f(x)$: $e^{a\,\frac{d}{dx}} f(x) = e^{a\,\frac{df(x)}{dx}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!}\frac{d^n f(x)}{dx^n} = f(x+a)$, l'operador $e^{\theta_0\,\frac{d}{d\theta}}$ genera una rotació en les funcions $f(r,\theta)$. En efecte, $e^{\theta_0\,\frac{d}{d\theta}} f(r,\theta) = e^{\theta_0\,\frac{df(r,\theta)}{d\theta}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\theta_0^n}{n!}\frac{d^n f(r,\theta)}{d\theta^n} = f(r,\theta+\theta_0)$. En particular, $e^{\theta\,\frac{d}{d\theta}} f(r,0) = f(r,\theta)$

Aquest operador se pot reescriure en termes del moment angular $L_z = -i\,\frac{d}{d\theta}$, en la forma $e^{-i\,\theta\,L_z}$. Si tenim en compte la definició de rotació d'una funció: $\mathbb{O}_R f(\vec{r}) = f(R^{-1}\vec{r})$, podem trobar la representació matricial $\mathbb{L}_z$ sobre funcions d'$\mathbb{R}^2$.

La correspondència biunívoca entre els punts (x,y) de $\mathbb{R}^2$ amb i els punts $r\,e^{i\,\theta} = r\,(\cos\theta + i\,\sin\theta) = x + i\,y$ del plànol complex $\mathbb{C}$, permet relacionar el generador hermític $L_z = -i\,d/d\theta$ de rotacions de funcions sobre $\mathbb{C}$ i el generador també hermític $L_z = -i\,(x\,d/dy - y\,d/dx)$ de rotacions de funcions sobre $\mathbb{R}^2$ –o amb el generador antisimètric $(x\,d/dy - y\,d/dx)$ de rotacions de funcions sobre $\mathbb{R}^2$–. I allò que diem per als operadors ho podem estendre a les seues representacions matricials. Mostrem la connexió en un exemple: Una rotació d'angle θ sobre el punt (x,y) de $\mathbb{R}^2$ el trasllada a un altre punt (x',y') de $\mathbb{R}^2$, amb $x' = x\,\cos\theta + y\,\sin\theta$, $y' = -x\,\sin\theta + y\,\cos\theta$. Tanmateix, la rotació d'angle θ, $e^{-i\,\theta}$, sobre el punt $x + i\,y$ del plànol complex $\mathbb{C}$, el trasllada a un altre punt de $\mathbb{C}$ $e^{-i\,\theta}(x+i\,y) = (\cos\theta - i\,\sin\theta)(x+i\,y) = (x\,\cos\theta + y\,\sin\theta) + i\,(-x\,\sin\theta + y\,\cos\theta) = x' + i\,y'$. Veiem doncs que mentre que la rotació d'angle θ en $\mathbb{R}^2$ estableix la correspondència $(x,y)\to(x',y')$ en $\mathbb{C}$ estableix la correspondència $x + i\,y \to x' + i\,y'$.

No hi ha cap diferencia essencial entre el generador $\mathbb{L}_z$ i el generador $\mathbb{X}$, encara que $\mathbb{L}_z$ és una matriu hermítica mentre que $\mathbb{X}$ és antisimètrica. En particular, totes dues presentant traça zero. En aplicacions físiques es prefereix fer ús de $\mathbb{L}_z$ com generador de rotacions i, de la mateixa manera, fer ús del moment lineal $p_x = -i\frac{d}{dx}$ i l'aplicació exponencial $e^{-i\,a\,p_x}$ com el generador de translacions sobre l'eix x, però aquesta tria no és cap cosa essencial, més enllà de donar una intuïció a les transformacions implicades.