ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΚΑΤΕΥΘΥΝΣΗ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟΥ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ

ΡΟΕΣ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗΣ - ΑΝΑΛΥΣΗΣ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του Γεωργίου Π. Νίνη

«Η Θεωρία Ομάδων και η Θεωρία Αναπαραστάσεων στην Κρυσταλλογραφία»

Υπεύθυνη Καθηγήτρια: κ. Λαμπροπούλου Σοφία

Σκοπός της Διπλωματικής Εργασίας

- μελέτη των κρυσταλλικών ομάδων σημείου στο επίπεδο και στον χώρο
- αναπαραστάσεις των παραπάνω ομάδων

Περιεχόμενο της Διπλωματικής Εργασίας

- η συμμετρία στην κρυσταλλογραφία
- προϋποθέσεις για να είναι ένα μοτίβο κρύσταλλος
- απόδειξη της ύπαρξης των ομάδων σημείου στο επίπεδο
- περιγραφή των ομάδων σημείου στον χώρο
- τρόποι τοποθέτησης των ατόμων ή των ιόντων σε ένα πλέγμα
- ανάγωγες αναπαραστάσεις των πινάκων των ομάδων σημείου
- Μεγάλο Θεώρημα Ορθογωνιότητας

Χρησιμότητα της Διπλωματικής Εργασίας

- Η συμμετρία των μορίων ή μοριακή συμμετρία
  - Διερεύνηση συμμετρίας μορίων
  - Ταξινόμηση ανάλογα με την στερεοχημική τους δομή
  - Συσχέτιση μοριακής συμμετρίας με ηλεκτρονική δομή, χημικές και φασματοσκοπικές ιδιότητες

- Εφαρμογές
  - Προβλέπουμε αν ένα μόριο έχει χειρομορφία ή διπολική ροπή
  - Προβλέπουμε ή ερμηνεύουμε τα δεδομένα της δονητικής (IR, Raman) και ηλεκτρονικής φασματοσκοπίας (UV, Vis) μιας ένωσης
  - Κατανοούμε την ηλεκτρονική δομή των μορίων
  - Προβλέπουμε το είδος του υβριδισμού του κεντρικού ατόμου μιας ένωσης στα πλαίσια της θεωρίας δεσμού-σθένους
  - Μελετάμε τον μηχανισμό πολλών χημικών αντιδράσεων

Κρύσταλλοι και Κρυσταλλικά Στερεά

- Κρύσταλλος
  - Ομοιόμορφη χημική σύσταση
  - Επίπεδες έδρες σχηματίζουν επακριβώς προσδιορισμένες γωνίες

- Κρυσταλλικό Στερεό
  - Τα άτομα ή τα ιόντα βρίσκονται σε **<u>επαναλαμβανόμενη περιοδική</u>** διάταξη για μεγάλες ατομικές αποστάσεις
  - Κάθε άτομο ή ιόν είναι δεσμευμένο με τα γειτονικά του

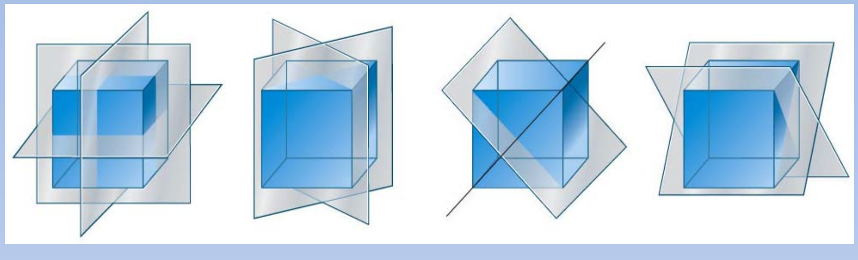
Παραδείγματα Κρυστάλλων

Κρύσταλλος ορυκτού χαλαζία

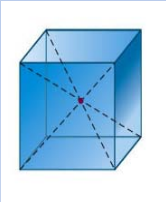
Κρύσταλλος Κερουσίτη

Στοιχεία Συμμετρίας

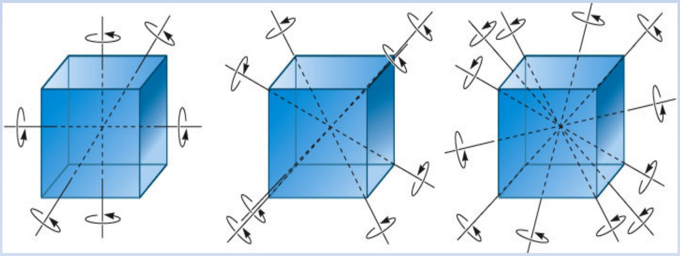
- Επίπεδο συμμετρίας
  - Κατοπτρική ανάκλαση μέσω ενός επιπέδου



- Κέντρο συμμετρίας
  - Αναστροφή ως προς ένα σημείο



- Άξονας Συμμετρίας
  - Στροφή ως προς έναν άξονα



Στοιχεία Συμμετρίας του κύβου

Ο κρυσταλλογραφικός περιορισμός

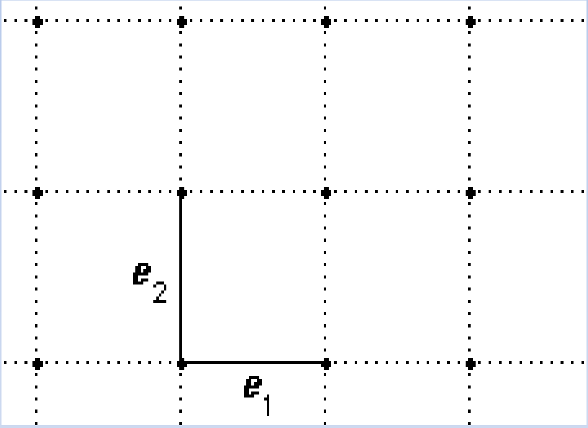
- Η περιοδική επανάληψη ατόμων ή ιόντων είναι μία μορφή συμμετρίας (συμμετρία από μεταφορά ή μεταφορική συμμετρία)

- Αποτέλεσμα της μεταφορικής συμμετρίας είναι ο κρυσταλλογραφικός περιορισμός

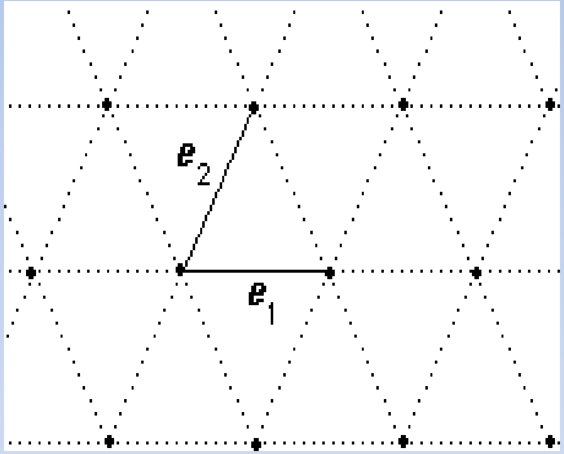
Οι κρύσταλλοι δεν διαθέτουν άξονες συμμετρίας 5^{ης} και παραπάνω από 6^{ης} τάξης

Πλέγμα

- Πλέγμα *L* σε ένα διανυσματικό χώρο *V* είναι το σύνολο των ακέραιων γραμμικών συνδυασμών κάποιας βάσης του *V*



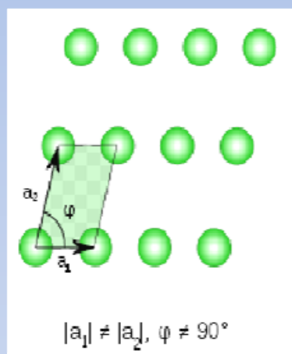
Επίπεδο τετραγωνικό πλέγμα



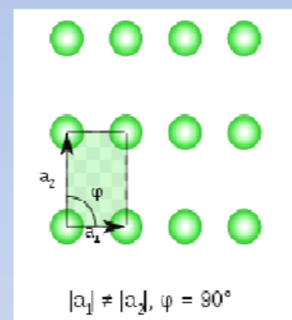
Επίπεδο εξαγωνικό πλέγμα

Επίπεδα Πλέγματα Bravais

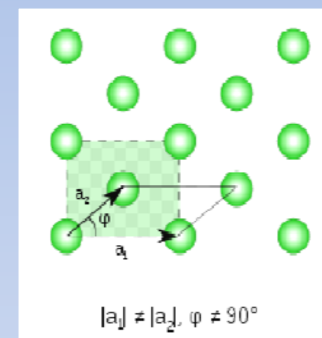
- <u>Τα 5 επίπεδα πλέγματα Bravais</u>



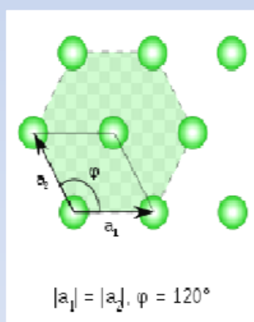
Πλάγιο



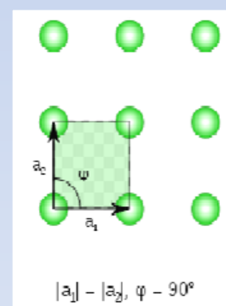
Θεμελιώδες ορθογώνιο



Κεντρωμένο ορθογώνιο



Εξαγωνικό



Τετραγωνικό

Μαθηματικό Μέρος

Μερικοί χρήσιμοι ορισμοί

Γραμμική ισομετρία:

Έστω $(X, \|\cdot\|_X)$, $(Y, \|\cdot\|_Y)$ χώροι με νόρμα.

Οι X, Y λέγονται ισομετρικοί αν υπάρχει $\tau : X \longrightarrow Y$ γραμμικός 1-1 και επί τελεστής, τέτοιος ώστε $\|\tau(x)\|_Y = \|x\|_X$ για κάθε $x \in X$.

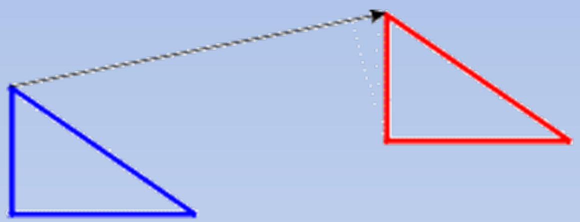
Στην περίπτωση αυτή ο τελεστής τ λέγεται *γραμμική ισομετρία ή ισομετρία*.

Μαθηματικό Μέρος

Μεταφορά:

Έστω $b \in \mathbb{R}^n$. Ορίζουμε ως μεταφορά (translation) τ_b την ισομετρία:

$$\tau_b(x) = x + b,\ \forall x \in \mathbb{R}^n$$



Αφινική ανάκλαση ή ανάκλαση:

Έστω $x_0, a \in \mathbb{R}^n$. Ορίζουμε ως ανάκλαση ή αφινική ανάκλαση (affine reflection) στο υπερεπίπεδο που περνά από το x_0 και είναι κάθετο στο a την ισομετρία:

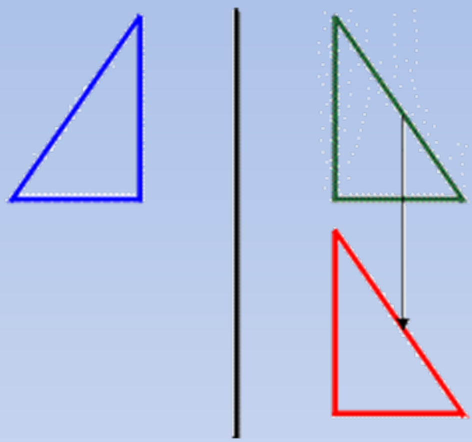
$$f_{a,x_0} = x - 2\langle x - x_0 | a \rangle a\ \forall x \in \mathbb{R}^n$$

Μαθηματικό Μέρος

Ολισθαίνουσα ανάκλαση:

Έστω τ_α μεταφορά (translation), για κάποιο $\alpha \in \mathbb{R}^n$, παράλληλο στο υπερεπίπεδο μιας ανάκλασης σ (affine reflection). Ορίζουμε ως ολισθαίνουσα ανάκλαση (glide reflection) την ισομετρία:

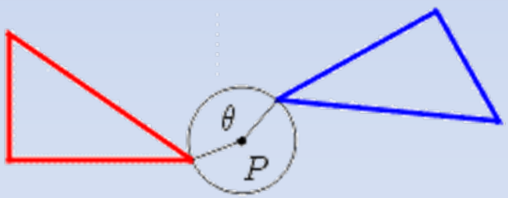
$$g_{a,\sigma} = \tau_\alpha \sigma$$



Αφινική στροφή ή στροφή:

Έστω $P \in \mathbb{R}^n$, τ_{x_0} μεταφορά (translation) και R στροφή (rotation). Ορίζουμε ως στροφή ή αφινική στροφή (affine rotation) με κέντρο x_0 την ισομετρία:

$$r_\theta = \tau_P R \tau_{-P}$$



Δύο σημαντικά Θεωρήματα

Θεώρημα:

Έστω $\tau\colon \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ μια γραμμική απεικόνιση.

Τα ακόλουθα είναι ισοδύναμα:

(a) Η απεικόνιση τ είναι ισομετρία.

(b) Η απεικόνιση τ διατηρεί το εσωτερικό γινόμενο.

(c) Για κάποια ορθοκανονική βάση $\{f_i, \dots, f_n\}$ του $\mathbb{R}^n$, το σύνολο $\{\tau(f_i), \dots, \tau(f_n)\}$ είναι ορθοκανονικό.

(d) Για κάθε ορθοκανονική βάση $\{f_i, \dots, f_n\}$ του $\mathbb{R}^n$, σύνολο $\{\tau(f_i), \dots, \tau(f_n)\}$ είναι ορθοκανονικό.

(e) Ο πίνακας της γραμμικής απεικόνισης τ, σε σχέση με κάποια ορθοκανονική βάση, είναι ορθογώνιος.

(f) Ο πίνακας της γραμμικής απεικόνισης τ, σε σχέση με κάθε ορθοκανονική βάση, είναι ορθογώνιος.

Θεώρημα:

Κάθε ισομετρία στον $\mathbb{R}^2$ είναι μεταφορά, ολισθαίνουσα ανάκλαση, αφινική ανάκλαση ή αφινική στροφή.

Η μαθηματική μοντελοποίηση

Ημιευθύ γινόμενο:

Έστω οι ομάδες G και H, και έστω ένας ομομορφισμός $\alpha: H \to Aut(G)$.

Ορίζουμε το ημιευθύ γινόμενο ως εξής:

$$G \ltimes_a H = \{(g,h): g \in G, h \in H\}$$

Το ημιευθύ γινόμενο $G \ltimes_a H$ είναι ομάδα με πράξη

$$(g,h)(g',h') = (g\alpha(h)g', hh')$$

Βασικό πεδίο:

Έστω V πραγματικός διανυσματικός χώρος. Βασικό πεδίο *(fundamental region)* για ένα πλέγμα L είναι μία κλειστή περιοχή D του V τέτοια ώστε:

(i) $\bigcup_{x \in L} x + D = V$

(ii) Για $x \neq y$ στο πλέγμα L, η τομή $(x + D) \cap (y + D)$ περιέχεται στο σύνορο του $(x + D)$

Η μαθηματική μοντελοποίηση

Επίπεδος κρύσταλλος:

Ένας επίπεδος κρύσταλλος αποτελείται από κάποιο γεωμετρικό σχήμα της βασικής περιοχής του πλέγματος (βάση), μαζί με όλες τις μεταφορές της βάσης κατά οποιοδήποτε στοιχείο του πλέγματος.

Παραδοχή: L είναι η ομάδα μεταφορών του κρυστάλλου

Πόρισμα:

Έστω V πραγματικός διανυσματικός χώρος.

Η ομάδα συμμετριών G ενός κρυστάλλου είναι υποομάδα των ισομετριών $Isom(V)$ του διανυσματικού χώρου V.

Η ομάδα των ισομετριών $Isom(V)$ είναι το ημιευθύ γινόμενο της ομάδας των μεταφορών του V και της ομάδας $O(V)$.

Ο σύνδεσμος L είναι τομή της ομάδας συμμετριών G με την ομάδα των μεταφορών του V και είναι κανονική υποομάδα της G

Η ομάδα πηλίκο είναι ισομορφική με την εικόνα της G, συνεπώς λαμβάνουμε:

$$Isom(V)/V \cong O(V)$$

Η μαθηματική μοντελοποίηση

<u>Ομάδα συμμετρίας σημείου:</u>

Ομάδα συμμετρίας σημείου ή ομάδα σημείου (point group) G^0 ενός κρυστάλλου είναι η ομάδα G / L

<u>Πρόταση:</u>

Κάθε μη τετριμμένη στροφή στην ομάδα G^0 είναι τάξης 2, 3, 4 ή 6

<u>Πρόταση:</u>

Έστω L ένα δισδιάστατο πλέγμα. Έστω επίσης α ένα διάνυσμα στο L με το ελάχιστο δυνατό μήκος ($\alpha \neq 0$) και έστω b ένα διάνυσμα με το ελάχιστο δυνατό μήκος τέτοιο ώστε $b \neq 0$ και $b \notin L\backslash\mathbb{R}a$. Τότε το σύνολο $\{\alpha, b\}$ είναι μία βάση του L. Επίσης το L είναι ο ακέραιος γραμμικός συνδυασμός των $\{\alpha, b\}$

Κατηγοριοποίηση των ομάδων επιπέδου

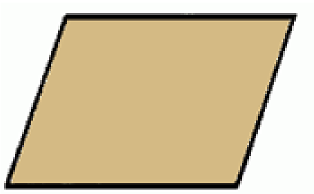
Θεώρημα:

Υπάρχουν 17 διαφορετικές ομάδες επιπέδου (plane groups) οι οποίες παράγονται γεωμετρικά από τις ομάδες σημείων $\mathbb{Z}_n$ και D_n για $n = 1,2,3,4,6$

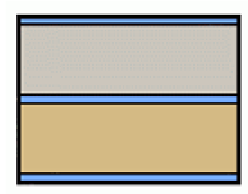
Ομάδα Σημείου	Ομάδες Επιπέδου
$\mathbb{Z}_1$	1
D_1	3
$\mathbb{Z}_2$	1
D_2	4
$\mathbb{Z}_3$	1
D_3	2
$\mathbb{Z}_4$	1
D_4	2
$\mathbb{Z}_6$	1
D_6	1

Ταξινόμηση των ομάδων επιπέδου

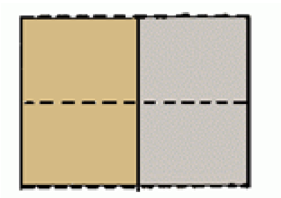
Κατηγοριοποίηση των ομάδων επιπέδου



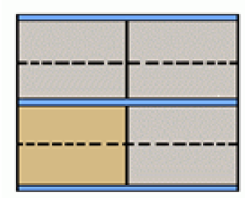
Ομάδα Σημείου p1



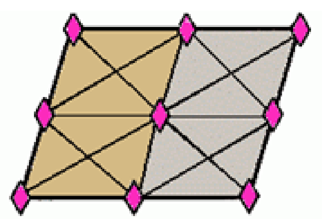
Ομάδα Σημείου pm



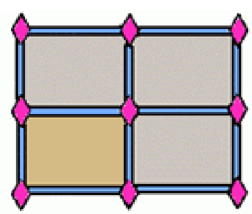
Ομάδα Σημείου pg



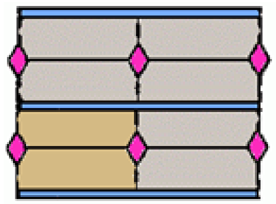
Ομάδα Σημείου cm



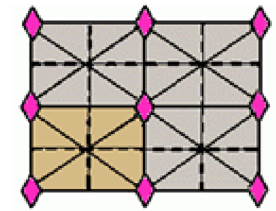
Ομάδα Σημείου p2



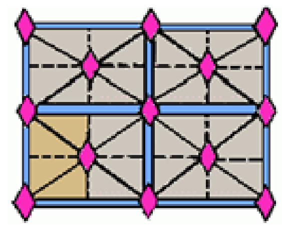
Ομάδα Σημείου pmm



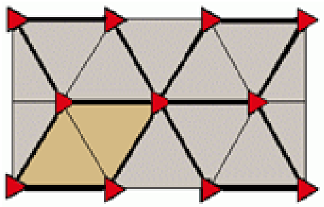
Ομάδα Σημείου pmg



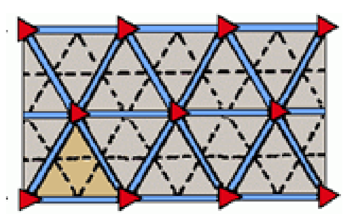
Ομάδα Σημείου pgg



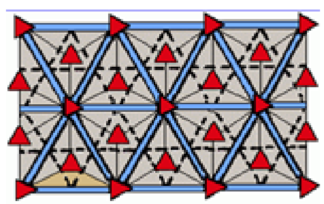
Ομάδα Σημείου cmm



Ομάδα Σημείου p3

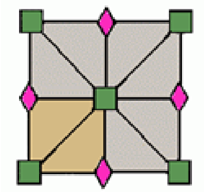


Ομάδα Σημείου p3m1

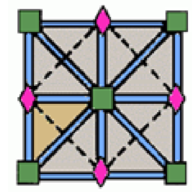


Ομάδα Σημείου p31m

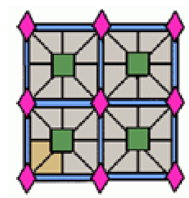
Κατηγοριοποίηση των ομάδων επιπέδου



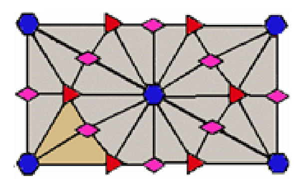
Ομάδα Σημείου p4



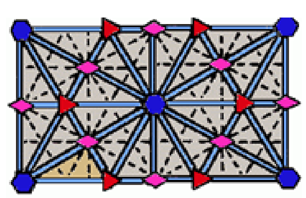
Ομάδα Σημείου p4m



Ομάδα Σημείου p4g



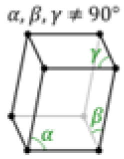
Ομάδα Σημείου p6



Ομάδα Σημείου p6m

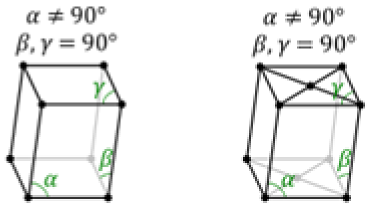
Τα 14 Χωροπλέγματα Bravais

Τρικλινές κρυσταλλικό σύστημα



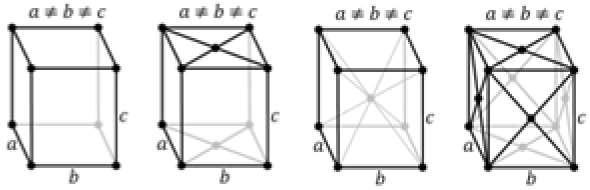
Θεμελιώδες πλέγμα

Μονοκλινές κρυσταλλικό σύστημα



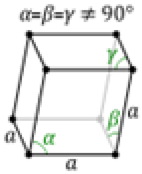
Από αριστερά προς τα δεξιά, το θεμελιώδες το πλευροκεντρωμένο πλέγμα αντίστοιχα

Ορθορομβικό κρυσταλλικό σύστημα



Από αριστερά προς τα δεξιά, το θεμελιώδες, το πλευροκεντρωμένο, το χωροκεντρωμένο και το εδροκεντρωμένο πλέγμα

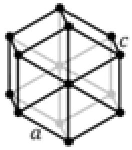
Τριγωνικό ή Ρομβοεδρικό κρυσταλλικό σύστημα



Θεμελιώδες πλέγμα

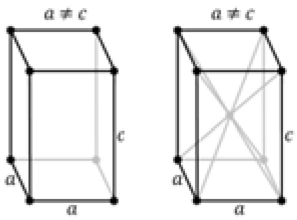
Τα 14 Χωροπλέγματα Bravais

Εξαγωνικό κρυσταλλικό σύστημα



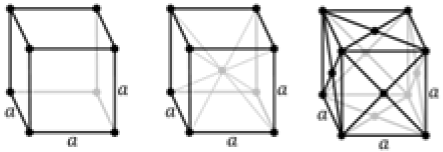
Ρομβοεδρικό πλέγμα

Τετραγωνικό κρυσταλλικό σύστημα



Από αριστερά προς τα δεξιά το θεμελιώδες και το χωροκεντρωμένο πλέγμα

Κυβικό κρυσταλλικό σύστημα

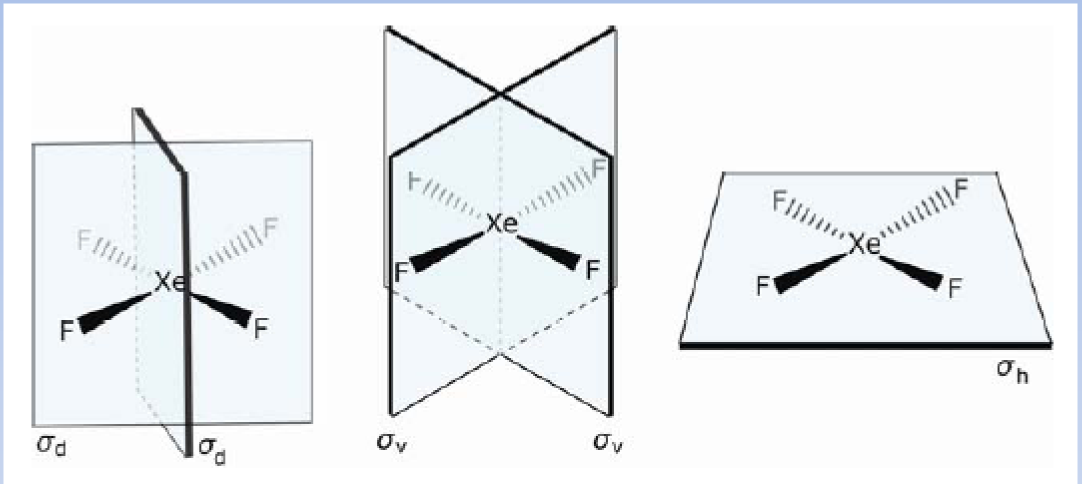


Από αριστερά προς τα δεξιά το θεμελιώδες, το χωροκεντρωμένο και το εδροκεντρωμένο πλέγμα

Στοιχεία και Διεργασίες Συμμετρίας στον χώρο

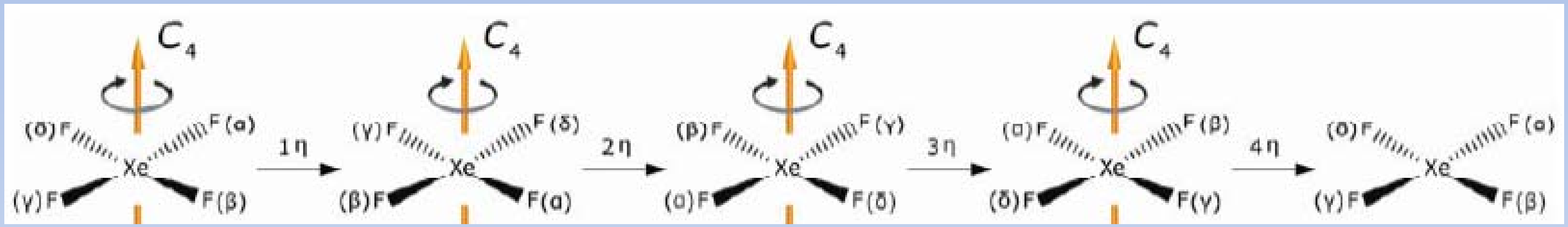
ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΣΥΜΜΕΤΡΙΑΣ	**ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ ΣΥΜΜΕΤΡΙΑΣ**
Επίπεδο συμμετρίας (σ)	Ανάκλαση σε επίπεδο ($\hat{\sigma}$)
Άξονας περιστροφής τάξης n (C_n)	Περιστροφές ($\hat{C}_n^m$)
Άξονας περιστροφικής ανάκλασης (S_n)	Περιστροφικές ανακλάσεις ($\hat{S}_n^m$)
Κέντρο συμμετρίας (I)	Αναστροφή ως προς κέντρο συμμετρίας ($\hat{I}$)

Επίπεδα συμμετρίας



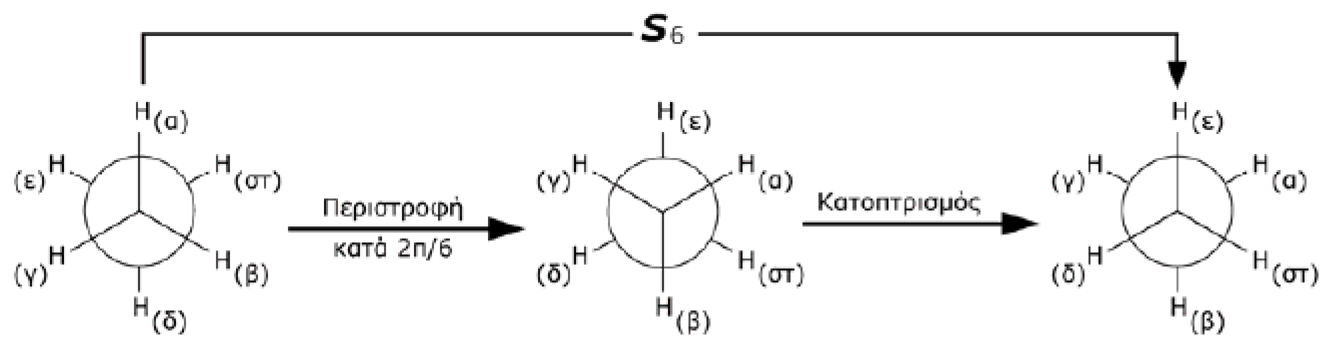
Επίπεδα κατοπτρισμού στο μόριο XeF_4

Άξονες περιστροφής



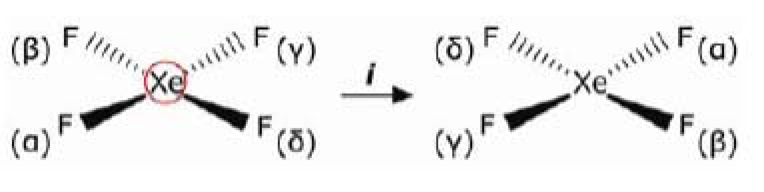
Διαδοχική εφαρμογή της διεργασίας C_4 στο μόριο του XeF_4

Άξονες περιστροφικής ανάκλασης



Διεργασία στροφοκατοπτρισμού S_6 στην προβολή Newman της διαβαθμισμένης διαμόρφωσης του αιθανίου

Κέντρο συμμετρίας

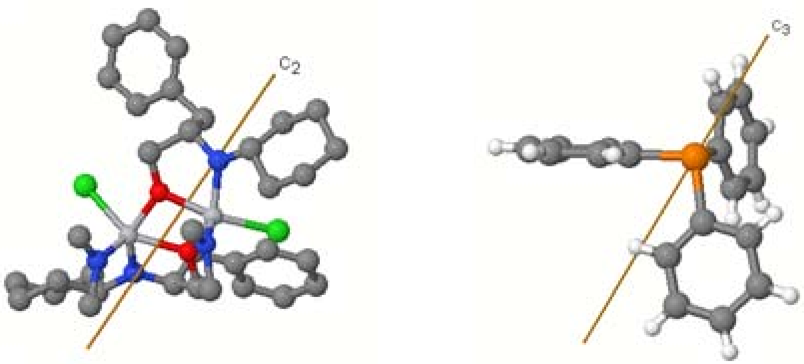


Διεργασία αναστροφής στο μόριο XeF_4

Περιγραφή ομάδων σημείου στον χώρο

Οι ομάδες στροφής $\boldsymbol{C_n}$

Οι ομάδες $\boldsymbol{C_n}$ αποτελούνται από στροφές $\hat{C}_n^m$, γύρω από έναν άξονα C_n, τάξης n



(a) (b)

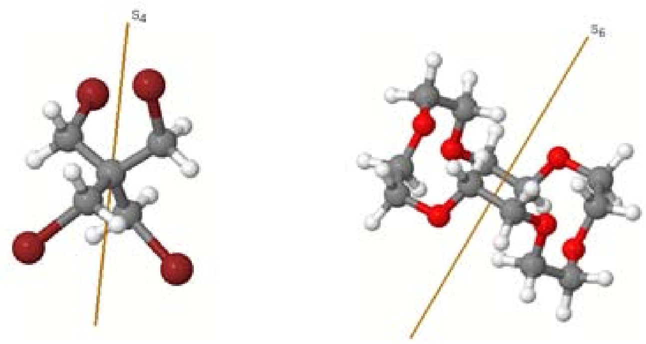
Μόρια συμμετρίας $\boldsymbol{C_2}$ και $\boldsymbol{C_3}$ αντίστοιχα:

(a) διμερές τιτάνιο, (b) τριφαινυλοφωσφίνη

Περιγραφή ομάδων σημείου στον χώρο

Οι ομάδες στροφοκατοπτρισμού S_{2n}

Οι ομάδες S_{2n} αποτελούνται από όλες τις περιστροφικές ανακλάσεις άρτιας τάξης. Η ομάδα S_{2n} δεν περιέχει περιστροφικές ανακλάσεις περιττής τάξης, αφού η αντίστοιχη διεργασία δεν είναι ένα νέο στοιχείο συμμετρίας.



(α) (b)

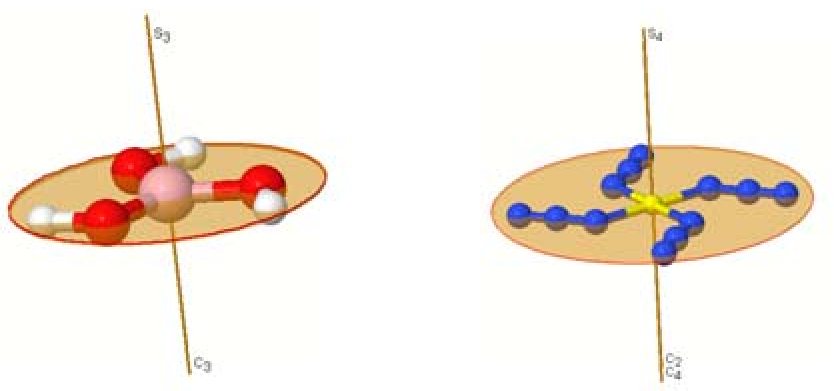
Μόρια συμμετρίας S_4 και S_6 αντίστοιχα:

(a) 1,2 διχλωρο - 1,2 διβρωμο, (b) 18-crown-6

Περιγραφή ομάδων σημείου στον χώρο

Οι ομάδες C_{nh}

Οι ομάδες $\mathrm{C_{nh}}$ αποτελούνται από άξονες συμμετρίας C_n και ένα επίπεδο συμμετρίας σ_h κάθετο στον άξονα. Αναλυτικότερα, αποτελούνται από $2n$ διεργασίες: n στροφές και n περιστροφικές ανακλάσεις. Αν το n είναι άρτιος, η ομάδα $\mathrm{C_{nh}}$ περιέχει κέντρο συμμετρίας.



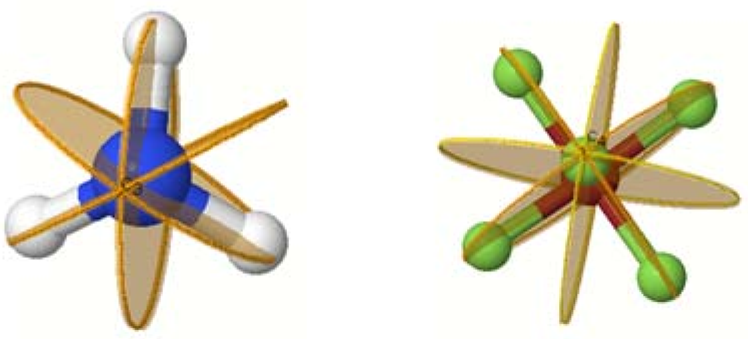
Μόρια συμμετρίας $\boldsymbol{C_{3h}}$ και $\boldsymbol{C_{4h}}$ αντίστοιχα:

(a) βορικό οξύ, (b) tetraazidocooper(II)

Περιγραφή ομάδων σημείου στον χώρο

Οι ομάδες C_{nv}

Οι ομάδες C_{nv} αποτελούνται από έναν άξονα C_n και ένα επίπεδο ανάκλασης σ_v. Ο άξονας C_n και το επίπεδο σ_v δημιουργούν επιπλέον στοιχεία συμμετρίας, τα οποία είναι $n-1$ επίπεδα παράλληλα με τον άξονα και διχοτομούνται σε γωνία π/n. Αναλυτικότερα, οι ομάδες $\mathrm{C_{nv}}$ αποτελούνται από $2n$ διεργασίες: n στροφές $\hat{C}_n^m$ και n ανακλάσεις $\hat{\sigma}_v$



(a) *(b)*

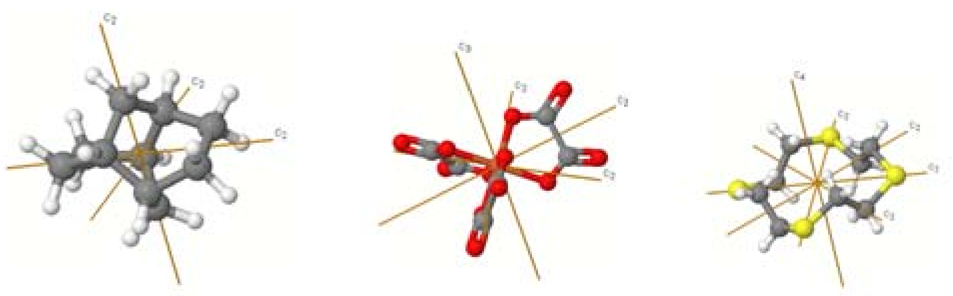
Μόρια συμμετρίας $\boldsymbol{C_{3v}}$ και $\boldsymbol{C_{4v}}$ αντίστοιχα:

(a) αμμωνία, (b) πενταβρωμιούχος φωσφόρος.

Περιγραφή ομάδων σημείου στον χώρο

Οι διεδρικές ομάδες D_n

Οι ομάδες D_n περιλαμβάνουν ως στοιχεία συμμετρίας έναν κατακόρυφο άξονα C_n και n το πλήθος C_2 άξονες οι οποίοι τέμνονται ανά δύο σε γωνία π/n. Οι διεδρικές ομάδες δεν έχουν επίπεδα συμμετρίας



(α) (b) (c)

Μόρια συμμετρίας D_2, D_3, D_4 αντίστοιχα:

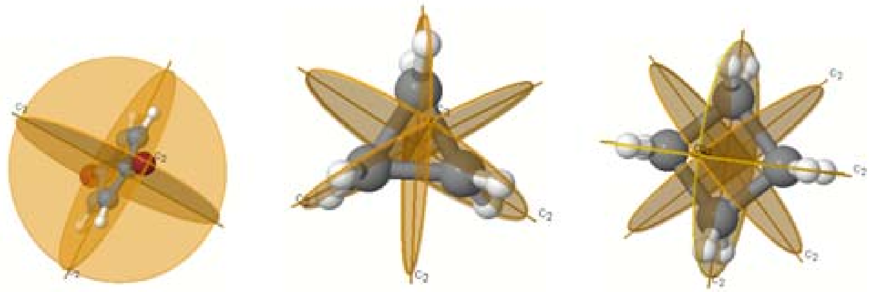
(a) twistane, (b) tris(oxalato)iron(III), (c) tetrathiacyclododecane

Περιγραφή ομάδων σημείου στον χώρο

Οι ομάδες D_{nh}

Οι ομάδες D_{nh} προκύπτουν από τις ομάδες D_n, προσθέτοντας ένα οριζόντιο επίπεδο ανάκλασης σ_h στο σύστημα των αξόνων των ομάδων D_n. Ο άξονας C_n και το επίπεδο που περιέχει n το πλήθος $C_2{}'$ άξονες κάθετους σ'αυτό, δημιουργεί n επιπλέον κάθετα επίπεδα σ_v, που περνούν από τους άξονες C_n και $C_2{}'$. Οι ομάδες που προκύπτουν (D_{nh}) περιλαμβάνουν $4n$ το πλήθος διεργασίες:

$2n$ διεργασίες της D_n, n ανακλάσεις σ_h και n περιστροφικές ανακλάσεις $\hat{C}_n^m \hat{\sigma}_h$



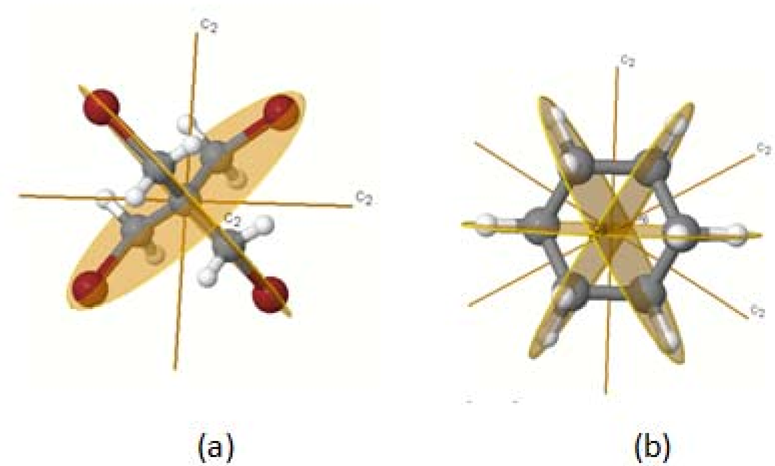
(a) (b) (c)

Μόρια συμμετρίας D_{2h}, D_{3h}, D_{4h} αντίστοιχα: (a) p-διβρωμο-βενζόλιο, (b) κυκλοπροπάνιο, (c) κυκλοβουτάνιο

Περιγραφή ομάδων σημείου στον χώρο

Οι ομάδες D_{nd}

Οι ομάδες D_{nd} προκύπτουν από τις ομάδες D_n, προσθέτοντας n διαγώνια επίπεδα ανάκλασης στο σύστημα των αξόνων C_2', καθένα από τα οποία διχοτομεί την γωνία που σχηματίζουν ανά δύο οι άξονες C_2'. Το αποτέλεσμα είναι η δημιουργία $4n$ το πλήθος διεργασιών: $2n$ στροφές λόγω των ομάδων D_n, n ανακλάσεις λόγω των διαγωνίων επιπέδων και n μετασχηματισμοί της μορφής $\hat{C}_2'\hat{\sigma}_d$



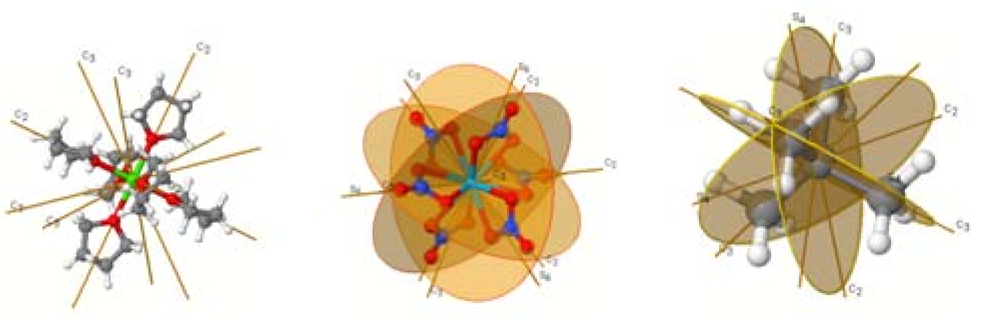
Μόρια συμμετρίας D_{2d}, D_{3d} αντίστοιχα:

(a) τετράβρωμο νεοπεντάνιο, (b) κυκλοεξάνιο.

Περιγραφή ομάδων σημείου στον χώρο

Οι κυβικές ομάδες $(\boldsymbol{T}, \boldsymbol{T_d}, \boldsymbol{T_h}, \boldsymbol{O}, \boldsymbol{O_h})$

Οι κυβικές ομάδες περιλαμβάνουν κάποιες ή όλες τις διεργασίες συμμετρίας ενός κύβου. Οι ομάδες T, T_d, T_h καλούνται τετραεδρικές, ενώ οι ομάδες O, O_h οκταεδρικές



(α) (b) (c)

Μόρια συμμετρίας T, T_h *και* T_d *αντίστοιχα:*

(a) $[Ca(THF)_6]^{2+}$, *(b)* $Th(NO_3)_6^{2-}$, *(c) νεοπεντάνιο*

Κρυσταλλογραφικές Ομάδες Σημείων

I Τρικλινές	II Μονοκλινές	III Ρομβικό	IV Τριγωνικό	V Τετραγωνικό	VI Εξαγωνικό	VII Κυβικό
C_1, C_i	C_{2h}, C_2, C_s	C_{2v}, D_2, D_{2h}	D_{3h}, D_6, C_{3v}, C_3, S_6	D_{4h}, D_4, C_{4v}, C_{4h}, C_4, S_4, D_{2d}	D_{6h}, D_6, C_{6v}, C_{6h}, C_{3h}, C_{3v}	O_h, O, T_h, T_d, T

Στοιχεία Θεωρίας Αναπαραστάσεων
Αναπαραστάσεις Διεργασιών Συμμετρίας

Ταυτοτική διεργασία

$$\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\y\\z\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x\\y\\z\end{bmatrix}$$

Αναστροφή ως προς κέντρο συμμετρίας

$$\begin{bmatrix}-1 & 0 & 0\\0 & -1 & 0\\0 & 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\y\\z\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-x\\-y\\-z\end{bmatrix}$$

Ανάκλαση σε επίπεδο

$$\sigma(xy):\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\y\\z\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x\\y\\z\end{bmatrix}$$

$$\sigma(yz):\begin{bmatrix}-1 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\y\\z\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-x\\y\\z\end{bmatrix}$$

$$\sigma(zx):\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\0 & -1 & 0\\0 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\y\\z\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x\\-y\\z\end{bmatrix}$$

Περιστροφή γύρω από άξονα συμμετρίας

$$\begin{bmatrix}cos\varphi & sin\varphi & 0\\-sin\varphi & cos\varphi & 0\\0 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\y_1\\z_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_2\\y_2\\z_2\end{bmatrix}$$

Περιστροφική ανάκλαση γύρω από άξονα

$$\begin{bmatrix}cos\varphi & sin\varphi & 0\\-sin\varphi & cos\varphi & 0\\0 & 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\y_1\\z_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_2\\y_2\\z_2\end{bmatrix}$$

Στοιχεία Θεωρίας Αναπαραστάσεων
Αναπαραστάσεις Ομάδων Σημείου

Αναπαράσταση μίας ομάδας σημείου είναι ένα σύνολο πινάκων, καθένας από τους οποίους αντιστοιχεί σε μία συγκεκριμένη διεργασία συμμετρίας

Παράδειγμα: Θεωρούμε την ομάδα σημείου C_{2v} με διεργασίες

$$\{E, C_2, \sigma_v, \sigma_v'\}$$

Μία αναπαράσταση της C_{2v} είναι:

$$E: \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad C_2: \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_v: \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \sigma_v': \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Στοιχεία Θεωρίας Αναπαραστάσεων
Αναπαραστάσεις Ομάδων Σημείου

Οι αναπαραστάσεις μίας ομάδας μπορεί να είναι και περισσότερες από μία, όπως για παράδειγμα στην ομάδα που μελετάμε υπάρχουν 4 της μορφής $1, -1$:

$$
\begin{array}{cccc}
E & C_2 & \sigma_v & \sigma_v' \\
\end{array}
$$

$$
\begin{bmatrix}
1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & -1 & 1 & -1 \\
1 & -1 & -1 & 1 \\
1 & 1 & -1 & -1
\end{bmatrix}
$$

Στοιχεία Θεωρίας Αναπαραστάσεων

Αναπαραστάσεις Ομάδων Σημείου

Έστω ότι ένας πίνακας $\mathcal{A}$ μετασχηματίζεται σε έναν $\mathcal{A}'$, μέσω ενός πίνακα $\mathcal{M}$. Τότε ο πίνακας $\mathcal{A}'$ παίρνει την μορφή block διαγώνιου πίνακα:

$$\mathcal{A}' = \mathcal{M}^{-1}\mathcal{A}\mathcal{M} = \begin{bmatrix} \mathcal{A}_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{A}_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathcal{A}_n \end{bmatrix}$$

<u>Διάσταση αναπαράστασης:</u>

Έστω μία αναπαράσταση $\mathcal{A}$ μίας ομάδας σημείου. Καλούμε διάσταση της αναπαράστασης $\mathcal{A}$ την τάξη των τετραγωνικών πινάκων από τους οποίους αποτελείται.

<u>Ανάγωγη αναπαράσταση:</u>

Μία αναπαράσταση $\mathcal{A}$ για την οποία δεν υπάρχει πίνακας μετασχηματισμού $\mathcal{M}$, ονομάζεται ανάγωγη (irreducible)

Στοιχεία Θεωρίας Αναπαραστάσεων
Το «Μεγάλο Θεώρημα Ορθογωνιότητας»

Μεγάλο Θεώρημα Ορθογωνιότητας:

Έστω μία ομάδα A τάξης h και l_i η διάσταση της $i-οστής$ αναπαράστασης της ομάδας A, R η πράξη μεταξύ των πινάκων αναπαράστασης της A και Γ_i η ανάγωγη αναπαράσταση της $i-οστής$ αναπαράστασης. Ισχύει:

$$\sum_R [\Gamma_i(R)_{mn}][\Gamma_j(R)_{m'n'}]^* = \frac{h}{\sqrt{l_i l_j}} \delta_{ij}\delta_{mm'}\delta_{nn'}$$

όπου $\Gamma_i(R)_{mn}$ είναι το στοιχείο του πίνακα της ανάγωγης αναπαράστασης Γ_i, που βρίσκεται στην m γραμμή και n στήλη.

Στοιχεία Θεωρίας Αναπαραστάσεων
Το «Μεγάλο Θεώρημα Ορθογωνιότητας»

Ισοδύναμα γράφουμε:

$$\sum_R \Gamma_i(R)_{mn} \Gamma_j(R)_{mn} = 0, \alpha\nu\ i \neq j \qquad (1)$$

$$\sum_R \Gamma_i(R)_{mn} \Gamma_i(R)_{m'n'} = 0, \alpha\nu\ m \neq m' \kappa\alpha\iota\ n \neq n' \qquad (2)$$

$$\sum_R \Gamma_i(R)_{mn} \Gamma_i(R)_{mn} = \frac{h}{l_i} \qquad (3)$$

Η εξίσωση (1) σημαίνει ότι δύο διανύσματα από πίνακες διαφορετικών αναπαραστάσεων είναι ορθογώνια

Η εξίσωση (2) σημαίνει ότι δύο διανύσματα από την ίδια αναπαράσταση, αλλά από διαφορετικούς πίνακες είναι ορθογώνια

Η εξίσωση (3) σημαίνει το τετράγωνο του μήκους οποιουδήποτε διανύσματος ισούται με $\frac{h}{l_i}$

Στοιχεία Θεωρίας Αναπαραστάσεων
Το «Μεγάλο Θεώρημα Ορθογωνιότητας»

Πόρισμα 1:

Το άθροισμα των τετραγώνων των διαστάσεων των ανάγωγων αναπαραστάσεων μίας ομάδας ισούται με την τάξη της ομάδας. Δηλαδή ισχύει:

$$\sum l_i^2 = h$$

Πόρισμα 2:

Το άθροισμα των τετραγώνων των ιχνών σε κάθε ανάγωγη αναπαράσταση ισούται με h. Δηλαδή ισχύει:

$$\sum_R [\chi_i(R)]^2 = h$$

Πόρισμα 3:

Τα διανύσματα των οποίων οι συντεταγμένες είναι τα ίχνη δύο διαφορετικών ανάγωγων αναπαραστάσεων είναι ορθογώνια. Δηλαδή ισχύει:

$$\sum_R \chi_i(R)\,\chi_j(R) = 0, \alpha\nu\ i \neq j$$

Στοιχεία Θεωρίας Αναπαραστάσεων
Το «Μεγάλο Θεώρημα Ορθογωνιότητας»

Πόρισμα 4:

Για μία δοθείσα αναπαράσταση (ανάγωγη ή αναγωγίσιμη) τα ίχνη όλων των πινάκων που ανήκουν σε διεργασίες ίδιας κλάσης είναι ίσα.

Πόρισμα 5:

Ο αριθμός των αναπαραστάσεων μίας ομάδας ισούται με τον αριθμό των κλάσεων της ομάδας.

Πηγές

- [1] Μιχάλης Π. Σιγάλας, ‘’Σημειώσεις Παραδόσεων Μοριακής Συμμετρίας και Θεωρίας Ομάδων’’, Θεσσαλονίκη 2009, [Online] Available: http://www.chem.auth.gr/content/quantum_lab/sigalas/Symmetry_Lectures.pdf
- [2] Μ. Σ. Μπουρουσιάν, Χημεία Στερεάς Κατάστασης, 2005, Εκδόσεις Ε.Μ.Π.
- [3] William D. Callister, JR. "Materials Science and Engineering, An introduction", 7th edition, John Wiley & Sons Inc.
- [4] “Κρυσταλλογραφία (Crystallography).” [Online] Available: http://en.wikipedia.org/wiki/Crystallography.
- [5] Σπύρος Αργυρός, “Σημειώσεις Παραδόσεων Συναρτησιακής Ανάλυσης”, 2η Έκδοση, Μάιος 2004, Εκδόσεις Ε.Μ.Π.
- [6] Frederic Goodman, ''Abstract and Concrete Algebra'', 1998, Prentice Hall Inc.
- [7] "Linear and Multilinear Algebra", [Online] Availabe: http://www.math.niu.edu/~rusin/known-math/index/15-XX.html
- [8] "Reflection", [Online] Available: http://mathworld.wolfram.com/Reflection.html
- [9] "Σημειώσεις Συμμετρίας και Κρυσταλλοδομής (Symmetry and Crystal Structure Notes, MIT Open Course)." [Online] Available: http://ocw.mit.edu/courses/materials-science-and-engineering/3-60-symmetry-structure-and-tensor-properties-of-materials-fall-2005/
- [10] Boris S. Tsukerblat, ''Group Theory in Chemistry and Spectroscopy'', 2006, Dover Publications Inc.
- [11] F. Albert Cotton, ''Chemical Applications of Group Theory'', 1963, 2nd edition, John Wiley and Sons, Inc
- [12] "Συμμετρία (Symmetry Otterbein)." [Online] Available: http://symmetry.otterbein.edu/gallery/index.html
- [13] "Συμμετρίες του Κύβου (Symmetries of the Cube" [Online] Available: http://www.nyu.edu/classes/tuckerman/honors.chem/lectures/lecture_20/node1.html)
- [14] "Ομάδες Επιπέδου (Wallpaper Groups)" [Online] Available: http://en.wikipedia.org/wiki/Wallpaper_group
- [15] "Σημειώσεις Γραμμικής Άλγεβρας (Linear Algebra Notes)" [Online] Available: http://robotics.cucei.udg.mx/Index_files/linearNotes/mat17.pdf