



**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**

**ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ**

**ΚΑΤΕΥΘΥΝΣΗ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟΥ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ**

**ΡΟΕΣ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗΣ - ΑΝΑΛΥΣΗΣ**

**Η Θεωρία Ομάδων και η Θεωρία Αναπαραστάσεων στην  
Κρυσταλλογραφία**

**ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ**

του

**ΓΕΩΡΓΙΟΥ Π. ΝΙΝΗ**

**Επιβλέπων:** Λαμπροπούλου Σοφία,  
Αναπληρώτρια Καθηγήτρια Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Απρίλιος 2011





ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ  
ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ  
ΚΑΤΕΥΘΥΝΣΗ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟΥ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ  
ΡΟΕΣ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗΣ - ΑΝΑΛΥΣΗΣ

## Η Θεωρία Ομάδων και η Θεωρία Αναπαραστάσεων στην Κρυσταλλογραφία

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του

**ΓΕΩΡΓΙΟΥ Π. ΝΙΝΗ**

**Επιβλέπων:** Λαμπροπούλου Σοφία,  
Αναπληρώτρια Καθηγήτρια Ε.Μ.Π.

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή την 14<sup>η</sup> Απριλίου 2011.

.....  
Λαμπροπούλου Σοφία  
Αν. Καθηγήτρια Ε.Μ.Π.

.....  
Παρασκευαΐδης Κωνσταντίνος  
Αν. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....  
Μιρτάτ Μπουρουσιάν  
Επ. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Απρίλιος 2011

.....  
**ΓΕΩΡΓΙΟΣ Π. ΝΙΝΗΣ**

Διπλωματούχος Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, Ε.Μ.Π.

© 2011 – All rights reserved

## Περίληψη

Η παρούσα διπλωματική εργασία έχει ως στόχο την μελέτη των κρυστάλλων στο επίπεδο και στον χώρο, καθώς και την μαθηματική αναπαράσταση αυτών. Αποδεικνύεται η ύπαρξη των ομάδων σημείου στο επίπεδο και αναφέρονται οι ικανές και αναγκαίες συνθήκες για να είναι ένα επίπεδο μοτίβο κρύσταλλος, μέσω της θεωρίας ομάδων. Περιγράφονται αναλυτικά οι κρυσταλλογραφικές ομάδες στον χώρο μέσω των διεργασιών συμμετρίας, καθώς και όλοι οι δυνατοί τρόποι που μπορούν να τοποθετηθούν τα άτομα ή τα ιόντα σε ένα πλέγμα. Επίσης, αναφέρονται οι τρόποι αναπαράστασης των παραπάνω ομάδων σημείου μέσω κατάλληλων ομάδων πινάκων. Τέλος, πραγματεύεται στοιχεία από την θεωρία των ανάγωγων αναπαραστάσεων και αναφέρεται το «Μεγάλο Θεώρημα Ορθογωνιότητας».



## Πίνακας Περιεχομένων

1	Εισαγωγή.....	2
1.1	Σκοπός της Διπλωματικής Εργασίας.....	2
1.2	Η Συμμετρία στον κόσμο μας.....	2
1.3	Κρύσταλλοι και Κρυσταλλικά Στερεά.....	3
1.4	Θεωρία Ομάδων και Θεωρία Αναπαραστάσεων στις Φυσικές Επιστήμες.....	4
1.5	Δομή Διπλωματικής Εργασίας.....	4
2	Μαθηματικό Υπόβαθρο.....	6
2.1	Στοιχεία Συναρτησιακής Ανάλυσης.....	7
2.2	Στοιχεία Συμμετρίας.....	13
2.2.1	<i>Εσωτερική συμμετρία κρυστάλλου.....</i>	<i>13</i>
2.2.2	<i>Εξωτερική συμμετρία κρυστάλλου.....</i>	<i>14</i>
2.2.3	<i>Επίπεδο συμμετρίας.....</i>	<i>14</i>
2.2.4	<i>Κέντρο συμμετρίας.....</i>	<i>15</i>
2.2.5	<i>Άξονας συμμετρίας.....</i>	<i>15</i>
2.3	Στοιχεία Θεωρίας Ομάδων.....	16
2.3.1	<i>Βασικές Έννοιες.....</i>	<i>16</i>
2.3.2	<i>Σύμπλοκα και το Θεώρημα Lagrange.....</i>	<i>20</i>
2.3.3	<i>Κλάσεις Ισοδυναμίας και Διαμερίσεις Συνόλων.....</i>	<i>22</i>
2.3.4	<i>Θεωρήματα Ομομορφισμών.....</i>	<i>24</i>
2.4	Στοιχεία Θεωρίας Πινάκων.....	26
2.5	Στοιχεία Κυρτής Ανάλυσης.....	29
2.6	Ευθέα – Ημιευθέα Γινόμενα.....	31
2.7	Στοιχεία Γραμμικών Ισομετριών.....	31
3	Στοιχεία Κρυσταλλογραφίας.....	38
3.1	Ο Κρυσταλλογραφικός Περιορισμός.....	38
3.2	Συμμετρία σημείου και Κρυσταλλικές τάξεις.....	39
3.3	Κρυσταλλικά συστήματα και Κρυσταλλογραφικοί άξονες.....	39
3.4	Πλέγματα και Πλέγματα Bravais.....	43
3.4.1	<i>Θεμελιώδη διανύσματα μεταφοράς.....</i>	<i>46</i>
3.4.2	<i>Μοναδιαία κυψελίδα.....</i>	<i>47</i>

3.4.3	Κέντρωση επίπεδου πλέγματος	47
3.4.4	Κέντρωση χωροπλέγματος	48
3.4.5	Επίπεδα πλέγματα Bravais	48
3.4.6	Χωροπλέγματα Bravais	49
4	Κρύσταλλοι στο Επίπεδο	53
4.1	Εισαγωγή	53
4.2	Η μαθηματική μοντελοποίηση	53
4.3	Κατηγοριοποίηση των ομάδων επιπέδου	56
5	Κρύσταλλοι στον χώρο	63
5.1	Εισαγωγή	63
5.2	Διεργασίες Συμμετρίας στον χώρο	63
5.2.1	Περιστροφή και άξονες περιστροφής	64
5.2.2	Ανάκλαση και επίπεδα συμμετρίας	67
5.2.3	Περιστροφική ανάκλαση και άξονες περιστροφικής ανάκλασης	68
5.2.4	Κέντρο Συμμετρίας	70
5.2.5	Σύνοψη	70
5.3	Σύνθεση διεργασιών συμμετρίας	72
5.3.1	Σύνθεση – Αντιμεταθετικότητα	72
5.3.2	Αντίστροφη διεργασία	73
5.4	Συσχέτιση Στοιχείων Συμμετρίας	73
5.4.1	Συσχέτιση Αξόνων Συμμετρίας	74
5.4.2	Συσχέτιση Αξόνων και Επιπέδων Συμμετρίας	75
5.5	Ισοδύναμα Στοιχεία Συμμετρίας και Άτομα	76
5.6	Συζυγείς Διεργασίες Συμμετρίας – Κλάσεις	77
5.7	Κανόνες για τον καθορισμό των Κλάσεων	79
5.8	Ομάδες Σημείου στον χώρο	81
5.8.1	Οι ομάδες στροφής $C_n$	81
5.8.2	Οι ομάδες στροφοκατοπτρισμού $S_{2n}$	83
5.8.3	Οι ομάδες $C_{nh}$	84
5.8.4	Οι ομάδες $C_{nv}$	85
5.8.5	Οι διεδρικές ομάδες $D_n$	87



5.8.6	Οι ομάδες $Dnh$ .....	88
5.8.7	Οι ομάδες $Dnd$ .....	90
5.8.8	Οι κυβικές ομάδες ( $T, Td, Th, O, Oh$ ).....	91
5.9	Κρυσταλλογραφικές Ομάδες Σημείων.....	93
5.10	Κανόνες για τον προσδιορισμό συμμετρίας κρυστάλλων.....	94
6	Στοιχεία Θεωρίας Αναπαραστάσεων .....	95
6.1	Αναπαραστάσεις Διεργασιών .....	95
6.1.1	Η ταυτοτική διεργασία.....	95
6.1.2	Η ανάκλαση σε επίπεδο .....	95
6.1.3	Η αναστροφή ως προς κέντρο συμμετρίας .....	96
6.1.4	Η περιστροφή γύρω από άξονα συμμετρίας .....	96
6.1.5	Η περιστροφική ανάκλαση γύρω από άξονα.....	97
6.2	Αναπαραστάσεις Ομάδων Σημείου.....	97
6.3	Ανάγωγες και Αναγωγίσιμες Αναπαραστάσεις.....	98
6.4	Το «Μεγάλο Θεώρημα Ορθογωνιότητας».....	100
7	Βιβλιογραφία .....	103



# 1

## *Εισαγωγή*

### ***1.1 Σκοπός της Διπλωματικής Εργασίας***

Σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η μελέτη των κρυσταλλικών ομάδων σημείου στο επίπεδο και στον χώρο, καθώς και αναπαραστάσεις αυτών. Για τους δισδιάστατους κρυστάλλους αποδεικνύεται λεπτομερώς, μέσω της θεωρίας ομάδων η ύπαρξη των ομάδων σημείου επιπέδου, που πληρούν τις προϋποθέσεις για να είναι ένα επίπεδο μοτίβο κρύσταλλος. Γίνεται επίσης αναλυτική περιγραφή των ομάδων σημείου στον χώρο καθώς και όλοι οι δυνατοί τρόποι με τους οποίους μπορούν να τοποθετηθούν τα άτομα ή τα ιόντα σε ένα πλέγμα. Τέλος, αναφέρονται οι τρόποι αναπαράστασης των παραπάνω ομάδων σε κατάλληλες ομάδες πινάκων μέσω των ανάγωγων αναπαραστάσεών τους και αναφέρεται ο «Μεγάλο Θεώρημα Ορθογωνιότητας», η χρησιμότητα του οποίου σε εφαρμογές είναι θεμελιώδης.

### ***1.2 Η Συμμετρία στον κόσμο μας***

Η συμμετρία είναι μία έννοια που υπάρχει διάχυτη στον κόσμο μας. Η ίδια η λέξη (προέρχεται από το συν + μέτρον και ετυμολογικά σημαίνει: «αρμονία που πηγάζει από κανονικές αναλογίες») [1,σελ 1097], υποδηλώνει ότι δύο ή περισσότερα μέλη ενός αντικειμένου είναι κατά κάποιον τρόπο ίδια. Συμμετρία υπάρχει στην εξωτερική μορφή των περισσότερων πραγμάτων ή και όντων. Ο ίδιος ο άνθρωπος, φαίνεται από πρώτη ματιά να αποτελείται από δύο ίσα μέλη τα οποία, λειτουργικά και οπτικά είναι σχεδόν πανομοιότυπα. Παρόμοια εναντιόμορφη συμμετρία παρατηρείται και στα περισσότερα σπονδυλωτά αλλά και σε φυτά. Η αναγνώριση των στοιχείων συμμετρίας είναι χρήσιμη στη φυσική, στη χημεία, αλλά και στην ζωολογία, αφού η συμμετρία προσδιορίζει με αποφασιστικό τρόπο την συμπεριφορά του εκάστοτε συστήματος.

Η συμμετρία παίζει βασικό ρόλο στην περιγραφή διαφόρων ενώσεων και στις ιδιότητές τους, διότι απλουστεύεται σημαντικά η μαθηματική περιγραφή. Επίσης, είναι και βασικό στοιχείο του μικρόκοσμου. Η γεωμετρική διάταξη των ατόμων ενός

μορίου στο χώρο, επηρεάζει σε μεγάλο βαθμό τον τρόπο που συμπεριφέρεται το μόριο στις αλληλεπιδράσεις του με άλλα μόρια. Η συμμετρία είναι χαρακτηριστική τόσο στην τέχνη, όσο και στην αρχιτεκτονική και κυριαρχεί στην πλειοψηφία των ανθρώπινων κατασκευασμάτων από τα αρχαιότερα χρόνια [2].

### ***1.3 Κρύσταλλοι και Κρυσταλλικά Στερεά***

Ένας **κρύσταλλος** ή, ακριβέστερα, ένας **μονοκρύσταλλος** μπορεί να οριστεί μακροσκοπικά ως ένα στερεό αντικείμενο με ομοιόμορφη χημική σύσταση που, όπως απαντάται στη φύση ή σχηματίζεται στο εργαστήριο, διαμορφώνεται από επίπεδες έδρες, οι σχέσεις των οποίων δείχνουν μία τυπική συμμετρία, δηλαδή σχηματίζουν μεταξύ τους επακριβώς προσδιορισμένες γωνίες. Ο κρύσταλλος μιας χημικής ουσίας είναι το κανονικό πολυεδρικό σώμα που προκύπτει με τη μετάβασή της, υπό κατάλληλες συνθήκες, από την υγρή ή την αέρια κατάσταση στη στερεά. Κρυσταλλικά σώματα είναι ο πάγος, ο ασβεστίτης, το αλάτι και τα περισσότερα ορυκτά. Τα πραγματικά μη κρυσταλλικά ή άμορφα στερεά είναι πολύ λίγα. Πολλά στερεά σώματα όμως, όπως π.χ. τα μέταλλα και τα κράματα είναι συναθροίσεις μικροσκοπικών μονοκρυστάλλων, που συσσωρεύονται με λίγο πολύ τυχαίο τρόπο [3,κεφ 2<sup>ο</sup>].

Τα στερεά μπορούν να ταξινομηθούν λαμβάνοντας υπόψη την κανονικότητα με την οποία τα άτομα ή τα ιόντα διευθετούνται μεταξύ τους. Ένα στερεό θεωρείται κρυσταλλικό όταν τα άτομα του βρίσκονται σε μία επαναλαμβανόμενη περιοδική διάταξη για μεγάλες ατομικές αποστάσεις, δηλαδή έχουμε την ύπαρξη τάξης, μακράς εμβέλειας, ώστε κατά την στερεοποίηση τα άτομα να τοποθετούνται σε μία επαναλαμβανόμενη τρισδιάστατη διάταξη, όπου κάθε άτομο είναι δεσμευμένο με τα κοντινότερα γειτονικά του άτομα. Όλα τα μέταλλα, πολλά κεραμικά υλικά και ορισμένα πολυμερή, σχηματίζουν κρυσταλλικές δομές κάτω από κανονικές συνθήκες στερεοποίησης.

Μερικές από τις ιδιότητες των κρυσταλλικών στερεών εξαρτώνται από την κρυσταλλική δομή του υλικού, δηλαδή από τον τρόπο με τον οποίο τα άτομα, τα ιόντα ή τα μόρια είναι διευθετημένα στον χώρο. Υπάρχει ένας εξαιρετικά μεγάλος αριθμός διαφορετικών κρυσταλλικών δομών στον χώρο – όλες με μακράς εμβέλειας τάξη. Αυτές ποικίλουν από σχετικά απλές δομές για μέταλλα μέχρι πολύπλοκες, όπως αυτές που εμφανίζουν ορισμένα κεραμικά και πολυμερή υλικά.

Κατά την περιγραφή των κρυσταλλικών δομών, τα άτομα ή τα ιόντα θεωρούνται ως στερεές σφαίρες με καλά καθορισμένες ακτίνες. Αυτό το μοντέλο ονομάζεται

μοντέλο των ατομικών σκληρών σφαιρών, σύμφωνα με το οποίο οι σφαίρες που αντιπροσωπεύουν γειτονικά άτομα, βρίσκονται σε επαφή. Πολλές φορές για την περιγραφή της κρυσταλλικής δομής χρησιμοποιούμε τον όρο πλέγμα, δηλαδή μία τρισδιάστατη διευθέτηση σημείων που ταυτίζονται με τις θέσεις των κέντρων των ατόμων [4,κεφ 3<sup>ο</sup>].

## ***1.4 Θεωρία Ομάδων και Θεωρία Αναπαραστάσεων στις***

### ***Φυσικές Επιστήμες***

Ο μαθηματικός τρόπος μελέτης της συμμετρίας είναι η Θεωρία Ομάδων, που αποτελεί πλέον βασικό εργαλείο της σύγχρονης Χημείας και Φυσικής [5]. Η Θεωρία Ομάδων μελετά τις αλγεβρικές δομές, γνωστές και ως, ομάδες. Οι ομάδες έχουν γίνει κεντρικό αντικείμενο στη μελέτη της αφηρημένης άλγεβρας, και αποτελούν βασικά συστατικά πιο περίπλοκων αλγεβρικών δομών όπως οι δακτύλιοι, τα πεδία ή οι  $\mathbb{I}$ , και συναντώνται συχνά παντού στα μαθηματικά. Η θεωρία ομάδων έχει πολλές εφαρμογές στη Φυσική και τη Χημεία, και μπορεί να εφαρμοστεί σε οποιαδήποτε κατάσταση που χαρακτηρίζεται από συμμετρία [6,κεφ 1<sup>ο</sup>] και συγκεκριμένα στην γεωμετρική συμμετρία των ατόμων, των μορίων και των κρυστάλλων καθώς και στην συμμετρία των εξισώσεων που περιγράφουν τις ιδιότητες και την συμπεριφορά των υπό μελέτη συστημάτων. Η θεωρία ομάδων, μαζί με την θεωρία των αναπαραστάσεων (αναπαράσταση ομάδων μέσω πινάκων) δεν βοηθά μόνο στις κβαντομηχανικές μεθόδους για την εξερεύνηση της ηλεκτρονικής δομής ενός υλικού, αλλά και στην ανάλυση αποτελεσμάτων προερχόμενα από μεθόδους φασματοσκοπίας στην οργανική και ανόργανη Χημεία.

## ***1.5 Δομή Διπλωματικής Εργασίας***

Στις εισαγωγικές παραγράφους του κεφαλαίου 1, εισάγονται οι έννοιες της συμμετρίας, των κρυστάλλων και των κρυσταλλικών στερεών, η κατανόηση των οποίων είναι απαραίτητη για την συνέχεια. Στο κεφάλαιο 2, παρουσιάζεται αναλυτικά όλο το μαθηματικό υπόβαθρο προκειμένου να γίνει κατανοητή η απόδειξη της ύπαρξης ομάδων σημείου στο επίπεδο (βλ. κεφ4). Αν ο αναγνώστης έχει καλή γνώση θεωρίας ομάδων, μπορεί να παρακάμψει τις βασικές έννοιες. Στο κεφάλαιο 3, αναφέρονται οι τρόποι με τους οποίους μπορούν να τοποθετηθούν άτομα ή ιόντα σε ένα πλέγμα, καθώς και η περιορισμοί που υπάρχουν στην διαδικασία αυτή. Το

κεφάλαιο 4 πραγματεύεται την απόδειξη όλων των δυνατών κρυσταλλικών ομάδων επιπέδου. Στο κεφάλαιο 5, μέχρι και την παράγραφο 5.7, παρουσιάζονται όλες οι δυνατές ισομετρίες στον χώρο, καθώς και οι διεργασίες αυτών. Στις τελευταίες παραγράφους (5.8-5.10) γίνεται εκτενής αναφορά στις κρυσταλλογραφικές ομάδες σημείου στον χώρο. Στο κεφάλαιο 6 παρουσιάζονται οι τρόποι με τους οποίους μπορούν να αναπαρασταθούν οι κρυσταλλογραφικές ομάδες, μέσω κατάλληλων ορθογώνιων πινάκων και αναφέρεται το «Μεγάλο Θεώρημα της Ορθογωνιότητας» και μερικά σημαντικά πορίσματά του.

# 2

## *Μαθηματικό Υπόβαθρο*

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται κάποιες βασικές έννοιες, η κατανόηση των οποίων κρίθηκε απαραίτητη για τη μελέτη των κεφαλαίων που ακολουθούν. Αναλύονται βασικές έννοιες συναρτησιακής και κυρτής ανάλυσης, συμμετρίας, ανάλυσης πινάκων και γίνεται εκτενής αναφορά σε θέματα θεωρίας ομάδων καθώς και μία εισαγωγή στις γραμμικές ισομετρίες και τα επίπεδα και χωρικά πλέγματα.

## 2.1 Στοιχεία Συναρτησιακής Ανάλυσης

Η Συναρτησιακή Ανάλυση αποτελεί σημείο συνάντησης δύο θεμελιωδών κλάδων των Μαθηματικών, της Άλγεβρας και της Ανάλυσης. Ένας από τους βασικούς στόχους της είναι η μελέτη των διανυσματικών χώρων με νόρμα και περαιτέρω η μελέτη των γραμμικών συνεχών απεικονίσεων που ορίζονται σε αυτούς. Και στις δύο περιπτώσεις το χαρακτηριστικό γνώρισμα είναι η συνύπαρξη και η συνλειτουργία αλγεβρικών και αναλυτικών δομών (γραμμικοί χώροι, γραμμικοί τελεστές, πληρότητα, συνέχεια, και άλλα). Πρότυπα των δομών που μελετώνται αποτελούν οι πραγματικοί αριθμοί, ή πιο γενικά ο  $\mathbb{R}^n$  με την ευκλείδεια νόρμα. Εν τούτοις τα πρότυπα που αναφέραμε δεν αποτελούν τα αντιπροσωπευτικά παραδείγματα, δεδομένου ότι στην περίπτωση διανυσματικών χώρων πεπερασμένης διάστασης εμφανίζονται φαινόμενα αυτόματης πληρότητας και συνέχειας. Τα αντιπροσωπευτικά παραδείγματα αφορούν χώρους άπειρης διάστασης, οι οποίοι δεν αποτελούν αντικείμενο της παρούσας παραγράφου [7],[8].

### Ορισμός 2.1.1 (μετρικός χώρος):

Μετρικός χώρος είναι ένα ζεύγος  $(X, \rho)$ , όπου  $X$  είναι ένα μη κενό σύνολο και  $\rho: X \times X \rightarrow \mathbb{R}$  μία απεικόνιση που ικανοποιεί τις ιδιότητες:

- (i)  $\rho(x, y) \geq 0$  για κάθε  $x, y \in X$  και  $\rho(x, y) = 0$  αν και μόνο αν  $x = y$
- (ii)  $\rho(x, y) = \rho(y, x)$  για κάθε  $x, y \in X$  (συμμετρική ιδιότητα)
- (iii)  $\rho(x, y) \leq \rho(x, z) + \rho(y, z)$  για κάθε  $x, y, z \in X$  (τριγωνική ιδιότητα)

Η απεικόνιση  $\rho$  ονομάζεται **μετρική**, τα στοιχεία του συνόλου  $X$  ονομάζονται **σημεία** και ο πραγματικός αριθμός  $\rho(x, y)$  ονομάζεται **απόσταση** του  $x$  από το  $y$ .

### Παραδείγματα μετρικών χώρων

1. Θεωρούμε το μη κενό σύνολο  $\mathbb{R}$  των πραγματικών αριθμών.

Η συνήθης μετρική στο  $\mathbb{R}$  ορίζεται ως εξής:

$$\rho(x, y) = |x - y|$$

για δύο στοιχεία  $x, y \in \mathbb{R}$ .

2. Θεωρούμε το μη κενό σύνολο  $\mathbb{R}^n$ .

Η ευκλείδεια μετρική στον  $\mathbb{R}^n$  ορίζεται ως εξής:



$$\rho_2(\vec{x}, \vec{y}) = \left( \sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

για δύο στοιχεία  $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n), \vec{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n) \in \mathbb{R}^n$ .

**Ορισμός 2.1.2 (πραγματικός διανυσματικός χώρος):**

Πραγματικός διανυσματικός χώρος (ή γραμμικός χώρος) ονομάζεται μία τριάδα  $(V, +, \cdot)$ , όπου  $V$  είναι ένα σύνολο,  $+: V \times V \rightarrow V$  μία εσωτερική πράξη (πρόσθεση) και  $\cdot: \mathbb{R} \times V \rightarrow V$  μία εξωτερική πράξη (βαθμωτό γινόμενο) που ικανοποιούν τις ακόλουθες ιδιότητες:

- (i)  $(x + y) + z = x + (y + z)$  για κάθε  $x, y, z \in V$ .
- (ii)  $x + y = y + x$  για κάθε  $x, y \in V$ .
- (iii) Υπάρχει ένα στοιχείο  $0 \in V$  (μηδενικό στοιχείο), ώστε  $x + 0 = 0 + x = 0$  για κάθε  $x \in V$ .
- (iv) Για κάθε  $x \in V$ , υπάρχει  $-x \in V$ , ώστε  $x + (-x) = (-x) + x = 0$
- (v)  $\lambda(x + y) = \lambda x + \lambda y$ , για κάθε  $x, y \in V$  και για κάθε  $\lambda \in \mathbb{R}$ .
- (vi)  $(\lambda + \mu)x = \lambda x + \mu x$ , για κάθε  $x \in V$  και για κάθε  $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ .
- (vii)  $\lambda(\mu x) = (\lambda\mu)x$ , για κάθε  $x \in V$  και για κάθε  $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ .
- (viii)  $1(x) = x$ , για κάθε  $x \in V$ .

Τα στοιχεία ενός διανυσματικού χώρου ονομάζονται **διανύσματα**.

**Παραδείγματα πραγματικών διανυσματικών χώρων**

1. Ο διανυσματικός χώρος  $\mathbb{R}^n$  εφοδιασμένος με πρόσθεση και βαθμωτό γινόμενο οριζόμενο από τις σχέσεις:

$$(x_1, x_2, \dots, x_n) + (y_1, y_2, \dots, y_n) = (x_1 + y_1, x_2 + y_2, \dots, x_n + y_n)$$

$$\lambda(x_1, x_2, \dots, x_n) = (\lambda x_1, \lambda x_2, \dots, \lambda x_n)$$

αποτελεί πραγματικό διανυσματικό χώρο.

2. Ο χώρος  $C[a, b]$  των συνεχών πραγματικών συναρτήσεων με πεδίο ορισμού το κλειστό διάστημα  $[a, b]$ . Σημειώνουμε ότι άθροισμα συνεχών συναρτήσεων, καθώς και το πραγματικό πολλαπλασιασμού μιας συνεχούς συνάρτησης είναι συνεχής συνάρτηση.

**Ορισμός 2.1.3 (νόρμα):**

Έστω  $(V, +, \cdot)$  πραγματικός διανυσματικός χώρος.

Μία απεικόνιση  $\|\cdot\|: V \rightarrow \mathbb{R}$  ονομάζεται νόρμα αν ικανοποιεί τις ιδιότητες:

- (i)  $\|x\| \geq 0, \forall x \in V$  και  $\|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$
- (ii)  $\|\lambda x\| = |\lambda| \cdot \|x\|, \forall x \in V$  και  $\forall \lambda \in \mathbb{R}$ .
- (iii)  $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|, \forall x, y \in V$  (τριγωνική ιδιότητα)

Το ζεύγος  $(V, \|\cdot\|)$  ονομάζεται **χώρος με νόρμα**.

**Πρόταση 2.1.4:**

Έστω  $(V, \|\cdot\|)$  χώρος με νόρμα. Τότε η απεικόνιση:

$$\rho = \rho_{\|\cdot\|} : V \times V \rightarrow \mathbb{R} \text{ με } \rho(x, y) = \|x - y\| \text{ είναι μετρική στον } V.$$

**Απόδειξη:**

Πράγματι είναι:

(a)  $\rho(x, y) = \|x - y\| \geq 0, \forall x, y \in V$  και  $\rho(x, y) = 0$ , δηλαδή  $\|x - y\| = 0$ , αν και μόνο αν  $x - y = 0$  δηλαδή αν, και μόνο αν  $x = y$ .

(b)  $\rho(x, y) = \|x - y\| = \|(-1)(y - x)\| = |-1| \|y - x\| = \rho(y, x), \forall x, y \in V$ .

(c)  $\rho(x, y) = \|x - y\| = \|(x - z) + (z - y)\| \leq \|x - z\| + \|z - y\| = \rho(x, z) + \rho(y, z), \forall x, y, z \in V$ .

**Ορισμός 2.1.5 (εσωτερικό γινόμενο):**

Έστω  $V$  πραγματικός διανυσματικός χώρος.

Εσωτερικό γινόμενο στον  $V$  είναι μία συνάρτηση  $\langle \cdot | \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$

με τις ιδιότητες:

- (i)  $\langle x | x \rangle \geq 0$ , για κάθε  $x \in V$  και αν  $\langle x | x \rangle = 0$  τότε  $x = 0$
- (ii)  $\langle x | y \rangle = \langle y | x \rangle$ , για κάθε  $x, y \in V$
- (iii)  $\langle \lambda x + \mu y | z \rangle = \lambda \langle x | z \rangle + \mu \langle y | z \rangle$ , για κάθε  $x, y, z \in V$ , για κάθε  $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ .

**Παραδείγματα χώρων με εσωτερικό γινόμενο**

1. Ο ευκλείδειος χώρος  $\mathbb{R}^n$  εφοδιασμένος με το σύνηθες εσωτερικό γινόμενο

$$\langle x | y \rangle = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \dots + x_n y_n,$$

όπου  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  και  $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ .

2. Ο διανυσματικός χώρος  $M(n, m)$  που αποτελείται από  $n \times m$  πίνακες με πραγματικά στοιχεία, εφοδιασμένος με το εσωτερικό γινόμενο ίχνος ως εξής:

Για δύο πίνακες  $A, B \in M(n, m)$  ορίζουμε:

$$\langle A | B \rangle = \text{tr}(AB^T).$$

**Πρόταση 2.1.6 (Ανισότητα Cauchy-Schwartz):**

Έστω  $V$  πραγματικός χώρος με εσωτερικό γινόμενο. Τότε για κάθε  $x, y \in V$  έχουμε:

$$\langle x|y \rangle^2 \leq \langle x|x \rangle \cdot \langle y|y \rangle$$

**Απόδειξη:**

Αν  $y = 0$  τότε η ανισότητα ισχύει αφού και τα δύο μέλη της είναι μηδέν.

Έστω  $y \neq 0$  και έστω ένα αυθαίρετο  $x \in V$ . Τότε για κάθε  $\lambda \in \mathbb{R}$  λαμβάνουμε:

$$\begin{aligned} \langle x - \lambda y | x - \lambda y \rangle &\geq 0 \\ \Leftrightarrow \langle y|y \rangle \lambda^2 - 2\langle x|y \rangle \lambda + \langle x|x \rangle &\geq 0 \end{aligned}$$

Αφού  $\langle y|y \rangle > 0$  και η ανισότητα ισχύει για κάθε  $\lambda \in \mathbb{R}$ , θα πρέπει:

$$\begin{aligned} \Delta = 4\langle x|y \rangle^2 - 4\langle x|x \rangle \langle y|y \rangle &\leq 0 \text{ ή} \\ \langle x|y \rangle^2 &\leq \langle x|x \rangle \cdot \langle y|y \rangle. \end{aligned}$$

**Πρόταση 2.1.7:**

Ένα εσωτερικό γινόμενο  $\langle \cdot | \cdot \rangle$  σε έναν χώρο  $V$  ορίζει μία νόρμα στον  $V$  από τη σχέση:

$$\|x\| = \langle x|x \rangle^{1/2}, x \in V$$

**Απόδειξη:**

Λαμβάνουμε:

(a)  $\|x\| = \langle x|x \rangle^{1/2} \geq 0, \forall x \in V$ . Επίσης  $\|x\| = \langle x|x \rangle^{1/2} = 0 \Leftrightarrow \langle x|x \rangle = 0 \Leftrightarrow x = 0$

(b)  $\|\lambda x\| = \langle \lambda x | \lambda x \rangle^{1/2} = \lambda^{1/2} \langle x | \lambda x \rangle^{1/2} = \lambda^{1/2} \lambda^{1/2} \langle x|x \rangle^{1/2} = |\lambda| \|x\| \quad \forall x \in V, \forall \lambda \in \mathbb{R}$ .

(c) Έστω  $x, y \in V$ . Είναι  $\|x + y\|^2 = \langle x + y | x + y \rangle =$   
 $= \langle x|x \rangle + \langle x|y \rangle + \langle y|x \rangle + \langle y|y \rangle = \|x\|^2 + 2\langle x|y \rangle + \|y\|^2 \leq$   
 $= \|x\|^2 + 2\|x\|\|y\| + \|y\|^2 = (\|x\| + \|y\|)^2$ . Από όπου έπεται:  
 $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ .

**Ορισμός 2.1.8 (γραμμικός τελεστής):**

Έστω  $X, Y$  διανυσματικοί χώροι.

Μία απεικόνιση  $\tau : X \rightarrow Y$  λέγεται γραμμικός τελεστής αν διατηρεί τις πράξεις.

Δηλαδή αν:

- (i)  $\tau(x_1 + x_2) = \tau(x_1) + \tau(x_2)$  για κάθε  $x_1, x_2 \in X$ .
- (ii)  $\tau(\lambda x) = \lambda \tau(x)$  για κάθε  $x \in X$ , για κάθε  $\lambda \in \mathbb{R}$ .

**Ορισμός 2.1.9 (ισομετρικοί τελεστές):**

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

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

Στην περίπτωση αυτή ο τελεστής  $\tau$  λέγεται **γραμμική ισομετρία ή ισομετρία**.

**Λήμμα 2.1.10:**

Έστω  $\tau : (\mathbb{R}^n, \|\cdot\|) \rightarrow (\mathbb{R}^n, \|\cdot\|)$  μία ισομετρία στον  $\mathbb{R}^n$  με μετρική  $\rho(x, y) = \|x - y\|$ ,  $\forall x, y \in \mathbb{R}^n$ . Τότε η ισομετρία  $\tau$  διατηρεί την απόσταση:

$$\rho(\tau(x), \tau(y)) = \rho(x, y), \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n.$$

**Απόδειξη:**

Καταρχήν ο διανυσματικός χώρος  $\mathbb{R}^n$  εφοδιάζεται με την μετρική  $\rho(x, y) = \|x - y\|$  για τα  $x, y \in \mathbb{R}^n$ , εφόσον και  $(x - y) \in \mathbb{R}^n$ . Από τον ορισμό της ισομετρίας  $\tau$  θα είναι:

$$\begin{aligned} \|\tau(x - y)\| &= \|x - y\| \Leftrightarrow \\ \|\tau(x) - \tau(y)\| &= \|x - y\| \text{ (λόγω γραμμικότητας του τελεστή)} \Leftrightarrow \\ \rho(\tau(x), \tau(y)) &= \rho(x, y), \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n. \end{aligned}$$

**Λήμμα 2.1.11:**

Έστω  $\tau : (\mathbb{R}^n, \|\cdot\|) \rightarrow (\mathbb{R}^n, \|\cdot\|)$  μία ισομετρία στον  $\mathbb{R}^n$  με  $\|x\| = \langle x|x \rangle^{1/2}$ ,  $\forall x \in \mathbb{R}^n$ . Τότε η ισομετρία  $\tau$  διατηρεί το εσωτερικό γινόμενο:

$$\langle \tau(x)|\tau(y) \rangle = \langle x|y \rangle, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n.$$

**Απόδειξη:**

$\forall x, y \in \mathbb{R}^n$  ισχύει:

$$\begin{aligned} \|x - y\|^2 &= \langle x - y|x - y \rangle = \langle x|x \rangle - \langle x|y \rangle - \langle y|x \rangle + \langle y|y \rangle = \\ &= \|x\|^2 - 2\langle x|y \rangle + \|y\|^2 \end{aligned}$$

ή ισοδύναμα  $\langle x|y \rangle = \frac{1}{2}(\|x\|^2 + \|y\|^2 - \|x - y\|^2)$ . Λαμβάνουμε:

$$\langle \tau(x)|\tau(y) \rangle = \frac{1}{2}(\|\tau(x)\|^2 + \|\tau(y)\|^2 - \|\tau(x) - \tau(y)\|^2) = \langle x|y \rangle.$$

Η τελευταία ισότητα βασίστηκε στον ορισμό της ισομετρίας και στην ισότητα

$$\tau(x) - \tau(y) = \tau(x - y).$$

**Ορισμός 2.1.12 (βάση διανυσματικού χώρου):**

Βάση ενός διανυσματικού χώρου  $V$  είναι ένα σύνολο  $B = \{b_i\}_{i \in I} \subset V$  έτσι ώστε για κάθε  $x \in V$  με  $x \neq 0$  υπάρχουν μοναδικοί πραγματικοί αριθμοί  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k, \dots$   $k \in \mathbb{N}$  ώστε:

$$x = \lambda_1 b_1 + \lambda_2 b_2 + \dots + \lambda_k b_k + \dots$$

Αν  $x = 0$ , ορίζουμε  $x = 0b_1 + 0b_2 + \dots + 0b_k + \dots$

**Ορισμός 2.1.13 (ορθοκανονικό σύνολο):**

Έστω  $(V, \langle \cdot | \cdot \rangle)$  χώρος με εσωτερικό γινόμενο.

Ένα σύνολο  $S = \{x_i \in V : i \in I\}$  καλείται ορθοκανονικό αν:

- (i)  $x_i \perp x_j, \forall i, j \in I$  με  $i \neq j$  και
- (ii)  $\|x_i\| = 1, \forall i \in I$ .

**Ορισμός 2.1.14 (ορθοκανονική βάση):**

Έστω  $(V, \langle \cdot | \cdot \rangle)$  χώρος με εσωτερικό γινόμενο και έστω  $S$  ένα ορθοκανονικό υποσύνολό του. Το  $S$  λέγεται ορθοκανονική βάση του  $V$  αν είναι ένα μεγιστικό ορθοκανονικό σύνολο, δηλαδή αν δεν περιέχεται γνήσια σε κανένα άλλο ορθοκανονικό υποσύνολο του  $V$ .

**Λήμμα 2.1.15 (ιδιότητα ορθοκανονικών βάσεων του  $\mathbb{R}^n$ ):**

Έστω  $\mathbb{F} = \{f_i\}_{i \in I}$  μια ορθοκανονική βάση του  $\mathbb{R}^n$ . Τότε:

(a) η ανάλυση ενός διανύσματος  $x \in \mathbb{R}^n$  σε σχέση με την βάση  $\mathbb{F}$  είναι:

$$x = \sum_i \langle x | f_i \rangle f_i.$$

(b) αν  $x = \sum_i x_i f_i$  και  $y = \sum_i y_i f_i$ , τότε  $\langle x | y \rangle = \sum_{i=1}^n x_i y_i$ .

**Απόδειξη:**

(a) Έστω  $x \in \mathbb{R}^n$ . Επειδή το σύνολο  $\mathbb{F} = \{f_i\}_{i \in I}$  είναι μία βάση του  $\mathbb{R}^n$  υπάρχουν μοναδικοί μη μηδενικοί πραγματικοί αριθμοί  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, n \in \mathbb{N}$  τέτοιοι ώστε:

$$x = \lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2 + \dots + \lambda_n f_n \Rightarrow$$

$$\langle x | f_1 \rangle = \langle \lambda_1 f_1 | f_1 \rangle + \langle \lambda_2 f_2 | f_1 \rangle + \dots + \langle \lambda_n f_n | f_1 \rangle.$$

Από τον ορισμό του εσωτερικού γινομένου συνεπάγεται:

$$\langle x | f_1 \rangle = \lambda_1 \langle f_1 | f_1 \rangle + \lambda_2 \langle f_2 | f_1 \rangle + \dots + \lambda_n \langle f_n | f_1 \rangle.$$

Επειδή το σύνολο  $\mathbb{F} = \{f_i\}_{i \in I}$  είναι ορθοκανονικό ισχύουν οι εξής σχέσεις:

$$\langle f_i | f_j \rangle = 0, \text{ για } i \neq j \text{ και } \langle f_i | f_j \rangle = 1, \text{ για } i=j, \text{ με } i, j \in I = \{1, 2, \dots, n\}.$$

$$\text{Συνεπώς λαμβάνουμε } \langle x | f_1 \rangle = \lambda_1.$$

Επαναλαμβάνοντας την παραπάνω διαδικασία για κάθε άλλη συνιστώσα του

$x \in \mathbb{R}^n$  βρίσκουμε  $\langle x | f_i \rangle = \lambda_i$  για κάθε  $i \in I = \{1, 2, \dots, n\}$ . Άρα είναι  $x = \sum_i \langle x | f_i \rangle f_i$ .

(b) Είναι  $\langle x|y \rangle = \langle \sum_i x_i f_i | \sum_i y_i f_i \rangle = \langle x_1 f_1 + x_2 f_2 + \dots + x_n f_n | y_1 f_1 + y_2 f_2 + \dots + y_n f_n \rangle$ .

Από τον ορισμό του εσωτερικού γινομένου και της ορθοκανονικής βάσης λαμβάνουμε το ζητούμενο.

Για περαιτέρω εμβάθυνση σε θέματα πραγματικής και συναρτησιακής ανάλυσης βλ. [7],[8]

## 2.2 Στοιχεία Συμμετρίας

### 2.2.1 Εσωτερική συμμετρία κρυστάλλου

Η γεωμετρική κρυσταλλογραφία ασχολείται με την μελέτη των γεωμετρικών ιδιοτήτων, των κρυστάλλων και των νόμων που διέπουν την εμφάνιση και την ανάπτυξη τους. Σύμφωνα με τις βασικές αρχές της κρυσταλλογραφίας, προκειμένου να θεωρηθεί ένα πολυεδρικό σχήμα ως κρυσταλλικό, θα πρέπει να ισχύουν οι ακόλουθοι νόμοι εσωτερικής συμμετρίας [3, κεφ 2<sup>ο</sup>]:

1. Ο νόμος της κυρτότητας των διέδρων γωνιών: Κάθε κρυσταλλικό σχήμα αποτελεί πάντοτε κυρτό πολυέδρο. Δηλαδή δύο τεμνόμενες έδρες ενός κρυσταλλικού σχήματος σχηματίζουν μία προεξέχουσα διέδρη γωνία.
2. Ο νόμος της σταθερότητας των διέδρων γωνιών: Σε όλο το μήκος της παράλληλης ανάπτυξης των εδρών ενός κρυστάλλου, υπό συνθήκες σταθερής πίεσης και θερμοκρασίας, οι διέδρες γωνίες παραμένουν σταθερές. Δηλαδή, οι διέδρες γωνίες των ομοίων εδρών σε στερεά του ίδιου κρυσταλλικού είδους είναι πάντα ίσες, ανεξάρτητα από το μέγεθος ή το σχήμα των κρυστάλλων. Η ισότητα των διέδρων γωνιών διατηρείται ακόμη και όταν οι κρύσταλλοι είναι παραμορφωμένοι. Αυτό που ενδιαφέρει την κρυσταλλογραφία δεν είναι οι διαστάσεις των κρυσταλλικών εδρών, αλλά οι γωνίες που σχηματίζουν μεταξύ τους.
3. Ο νόμος των δεικτών συμμετρίας: Οι παράμετροι (κρυσταλλογραφικές συντεταγμένες) οποιασδήποτε έδρας ενός κρυσταλλικού σχήματος είναι απλά πολλαπλάσια των παραμέτρων του απλούστερου κρυσταλλικού πολυέδρου που είναι ικανό να αποδώσει τη μορφή του κρυστάλλου. Το απλό πολυέδρο είναι ένα θεμελιώδες κρυσταλλικό σχήμα.

4. Ο νόμος της κρυσταλλικής συμμετρίας: Οι κρύσταλλοι χαρακτηρίζονται πάντα από ορισμένα στοιχεία συμμετρίας (άξονες, επίπεδα και κέντρα συμμετρίας).

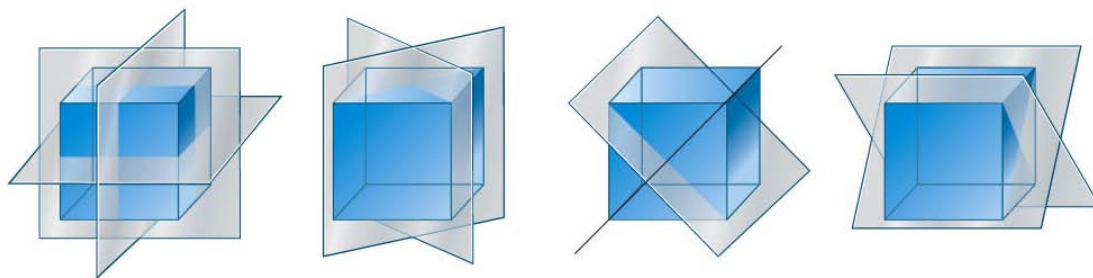
### **2.2.2 Εξωτερική συμμετρία κρυστάλλου**

Η εξωτερική συμμετρία των κρυστάλλων προσδιορίζεται με την μέτρηση των γωνιών ανάμεσα σε τυπικές έδρες ή με μεθόδους που περιλαμβάνουν π.χ. την εξέταση των οπτικών ιδιοτήτων των κρυστάλλων (την μεταβολή του δείκτη διάθλασης με τον προσανατολισμό, τη διπλοθλαστικότητα των οπτικά ενεργών μορφών κτλ), την παρατήρηση του φαινομένου του *σχισμού*, το οποίο συνίσταται στην τάση πολλών κρυστάλλων να διαρρηγνύονται κατά μήκος καθορισμένων διευθύνσεων, κ.α. Όμως, η εξωτερική συμμετρία των κρυστάλλων καθορίζεται από την εσωτερική, ατομική δομή τους. Η σύγχρονη κρυσταλλογραφία, με κύριο εργαλείο τις μεθόδους περίθλασης, μελετά την εσωτερική και εξωτερική συμμετρία και τη δομή των κρυστάλλων [3, κεφ 2<sup>ο</sup>].

Η μελέτη των κρυσταλλικών μορφών αποκαλύπτει ότι οι ιδιότητες της εξωτερικής συμμετρίας ή μακρο-συμμετρίας μπορούν να εκφραστούν μέσω τριών βασικών στοιχείων συμμετρίας: *επίπεδο συμμετρίας*, *κέντρο συμμετρίας* και *άξονας συμμετρίας*. Καθένα από αυτά τα στοιχεία αναφέρεται σε μία διεργασία συμμετρίας, μία διαδικασία με την οποία ένα ή περισσότερα σημεία μεταφέρονται γεωμετρικά σε συμμετρικές ως προς τις αρχικές τους θέσεις.

### **2.2.3 Επίπεδο συμμετρίας**

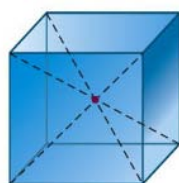
Το επίπεδο συμμετρίας υποδηλώνει μία κατοπτρική ανάκλαση με την οποία ένα σχήμα ή αντικείμενο αναπαράγεται με κατοπτρική προβολή των σημείων που το αποτελούν μέσω του επιπέδου αυτού. Όταν το επίπεδο περιέχεται στο εξεταζόμενο σχήμα, κάθε σημείο του σχήματος αυτού έχει ένα κατοπτρικό είδωλο. Ένας κρύσταλλος ή ένα μόριο χαρακτηρίζεται από *κατοπτρική συμμετρία*, αν περιέχει ένα ή περισσότερα επίπεδα συμμετρίας [3, κεφ 2<sup>ο</sup>]. Τα επίπεδα αυτά τέμνουν το μόριο ή τον κρύσταλλο και το χωρίζουν σε δύο, ακριβώς ίδια, ημίσεια μέρη (βλ. για παράδειγμα *Εικόνα 2.2.3.1*).



Εικόνα 2.2.3.1: Τα εννέα επίπεδα συμμετρίας του κύβου [17].

#### 2.2.4 Κέντρο συμμετρίας

Διεργασία συμμετρίας αποτελεί και η αναστροφή ως προς σημείο. Κατά την διαδικασία αυτή πραγματοποιείται προβολή μέσω κάποιου ιδιαίτερου σημείου. Αν η διεργασία αυτή αναπαράγει συμμετρικά ένα σχήμα ή ένα αντικείμενο, το ιδιαίτερο αυτό σημείο λέγεται κέντρο συμμετρίας. Έτσι, ένας κρύσταλλος διαθέτει κέντρο συμμετρίας αν οποιαδήποτε ευθεία που ξεκινά από μία κρυσταλλική έδρα και διέρχεται από το σημείο αυτό απολήγει σε ισοδύναμο σημείο κρυσταλλικής έδρας σε ίση απόσταση από το σημείο αναστροφής. Κάθε σημείο του κρυστάλλου μπορεί να προβληθεί στο αντίστοιχό του διά του κέντρου συμμετρίας (βλ. για παράδειγμα Εικόνα 2.2.4.1). Η διεργασία αυτή ονομάζεται και *αναστροφή (inversion) ως προς κέντρο συμμετρίας* [3, κεφ 2<sup>ο</sup>].



Εικόνα 2.2.4.1: Το κέντρο συμμετρίας του κύβου [17].

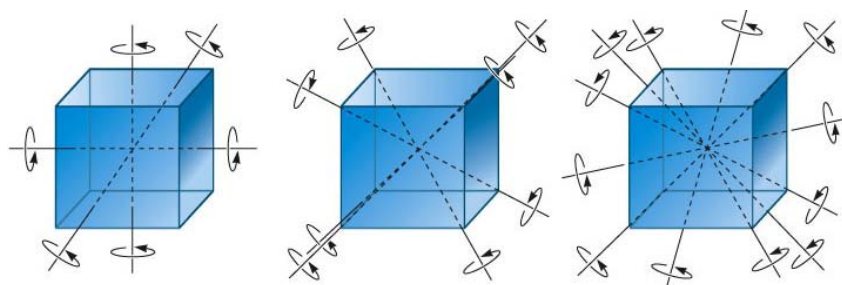
#### 2.2.5 Άξονας συμμετρίας

Τέλος, η περιστροφή είναι μία διεργασία μεταφοράς σημείων που πραγματοποιείται ως προς κατάλληλο άξονα. Μία στροφή γύρω από άξονα που περιέχεται σε ένα σχήμα αποτελεί διεργασία συμμετρίας όταν μεταφέρει κάθε σημείο σε ισοδύναμη θέση. Ειδικότερα, ορίζεται ότι ένα σχήμα έχει άξονα συμμετρίας  $n$ -οστής τάξης αν η



στροφή του σχήματος γύρω από τον άξονα αυτόν κατά γωνία  $2\pi/n$  υπερθέτει ισοδύναμα σημεία. Η έννοια των ισοδύναμων σημείων γίνεται ξεκάθαρη στην παράγραφο 5.5. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται  $n$  φορές, κατά τη διάρκεια μιας πλήρους περιστροφής  $2\pi$  [3, κεφ 2<sup>ο</sup>]. Ο άξονας συμμετρίας είναι ένα στοιχείο συμμετρίας και ο δείκτης  $n$  ονομάζεται *τάξη ή πολλαπλότητα της περιστροφής* (βλ. για παράδειγμα Εικόνα 2.2.5.1).

Στο σημείο αυτό είναι σκόπιμο να αναφέρουμε ότι οι κρύσταλλοι δεν διαθέτουν άξονες συμμετρίας  $5^{ns}$  και παραπάνω από  $6^{ns}$  τάξης. Ο λόγος είναι (όπως θα αποδειχθεί και θα αναπτυχθεί παρακάτω) ότι το εξωτερικό σχήμα των κρυστάλλων βασίζεται σε μία γεωμετρική διάταξη ατόμων που επαναλαμβάνεται περιοδικά πληρώνοντας μεταφορικά (μεταθετικά) τον χώρο.



Εικόνα 2.2.5.1: Από αριστερά προς τα δεξιά οι άξονες συμμετρίας του κύβου τάξης 4,3,2 αντίστοιχα [17].

## 2.3 Στοιχεία Θεωρίας Ομάδων

### 2.3.1 Βασικές Έννοιες

Στην παράγραφο αυτή ακολουθούν κάποιες βασικές έννοιες θεωρίας ομάδων, που κρίνονται απαραίτητες για την συνέχεια [9, κεφ 1<sup>ο</sup>].

#### Ορισμός 2.3.1.1 (διμελής πράξη):

Μία διμελής πράξη  $*$  σε ένα μη κενό σύνολο  $S$  είναι ένας κανόνας, με τον οποίο κάθε διατεταγμένο ζεύγος  $(a, b)$  στοιχείων του  $S$  αντιστοιχίζεται σε ένα μοναδικό στοιχείο του  $S$ .

Ο παραπάνω ορισμός αναφέρεται συχνά και ως συνθήκη κλειστότητας. Απαιτούμε το σύνολο  $S$  να είναι κλειστό ως προς μία διμελή πράξη στο  $S$ .

### Παραδείγματα διμελών πράξεων

1. Η συνήθης πρόσθεση και ο συνήθης πολλαπλασιασμός είναι διμελείς πράξεις στο σύνολο  $\mathbb{R}$ .
2. Ο συνήθης πολλαπλασιασμός πινάκων είναι μία διμελής πράξη στο σύνολο  $M_4(\mathbb{C})$ , των πινάκων  $4 \times 4$  με μιγαδικές συντεταγμένες.

### **Ορισμός 2.3.1.2 (ομάδα):**

Έστω ένα μη κενό σύνολο  $G$  και μία διμελής πράξη  $*$  στο  $G$ .

Το σύνολο  $G$  μαζί με την διμελή πράξη  $*$  λέγεται ομάδα και συμβολίζεται

$\langle G, * \rangle$ , αν ικανοποιούνται οι παρακάτω ιδιότητες:

- (i) Για κάθε  $a, b, c \in G$  ισχύει:

$$(a * b) * c = a * (b * c).$$

Δηλαδή η διμελής πράξη  $*$  είναι προσεταιριστική.

- (ii) Υπάρχει ένα στοιχείο  $e \in G$ , τέτοιο ώστε για κάθε  $x \in G$  ισχύει:

$$e * x = x * e = x.$$

Το στοιχείο  $e$  λέγεται ταυτοτικό στοιχείο για την διμελή πράξη  $*$  στο  $G$ .

- (iii) Για κάθε  $x \in G$ , υπάρχει  $x' \in G$ , τέτοιο ώστε να ισχύει:

$$x * x' = x' * x = e.$$

Το στοιχείο  $x'$  λέγεται συμμετρικό ή αντίστροφο του  $x$  ως προς την διμελή πράξη  $*$ .

Στην περίπτωση όπου έχουμε  $\langle G, * \rangle$  ομάδα με πράξη  $*$  και για κάθε  $a, b \in G$  ισχύει:

$$(a * b) = (b * a),$$

η ομάδα ονομάζεται αβελιανή.

### Παραδείγματα ομάδων

1. Το σύνολο  $\mathbb{Z}$  με πράξη  $+$  είναι αβελιανή ομάδα.
2. Το σύνολο  $M_2(\mathbb{R})$  των πινάκων  $2 \times 2$  με πράξη την πρόσθεση είναι ομάδα.
3. Το σύνολο των ορθογωνίων  $n \times n$  πινάκων με ορίζουσα  $+1$  είναι ομάδα με πράξη τον πολλαπλασιασμό. Συμβολίζεται με  $SO(n, \mathbb{R})$ .

### **Ορισμός 2.3.1.3 (τάξη ομάδας):**

Έστω  $\langle G, * \rangle$  ομάδα. Το πλήθος των στοιχείων της ομάδας λέγεται τάξη της ομάδας και συμβολίζεται με  $|G|$ .

**Ορισμός 2.3.1.4 (υποομάδα):**

Έστω  $\langle G, * \rangle$  ομάδα και έστω  $H$  ένα μη κενό υποσύνολο της  $G$ . Το  $H$  καλείται υποομάδα της  $G$  και συμβολίζεται  $H \leq G$ , αν το  $H$  είναι ομάδα με πράξη  $*$  που κληρονομεί από την  $G$ .

**Παραδείγματα υποομάδων**

1. Η ομάδα  $\langle \mathbb{Z}, + \rangle$  είναι υποομάδα της  $\langle \mathbb{R}, + \rangle$ .
2. Η ομάδα  $\langle \{e, a\}, \circ \rangle$  είναι υποομάδα της 4-ομάδας του Klein,  $V$ , των βασικών συμμετριών του ορθογωνίου παραλληλογράμμου.
3. Η ομάδα  $\langle U_4, \cdot \rangle$  είναι υποομάδα της  $\langle U_8, \cdot \rangle$ . Σημειώνουμε ότι οι  $n$ -οστές ρίζες της μονάδας στο  $\mathbb{C}$  αποτελούν ομάδα και την συμβολίζουμε  $U_n$ .

**Ορισμός 2.3.1.5 (ομομορφισμός ομάδων):**

Μια απεικόνιση  $\varphi : \langle G, * \rangle \rightarrow \langle H, \circ \rangle$  λέγεται ομομορφισμός ομάδων αν ισχύει:

$$\varphi(g_1 * g_2) = \varphi(g_1) \circ \varphi(g_2) \quad \forall g_1, g_2 \in G.$$

**Παρατήρηση:** Στον παραπάνω ορισμό η απεικόνιση  $\varphi$  δεν είναι υποχρεωτικά 1 – 1 ή επί.

**Παραδείγματα ομομορφισμών ομάδων**

1. Η απεικόνιση  $\varphi: \langle G, * \rangle \rightarrow \langle G, * \rangle$ , με  $\varphi(g) = g^n$ ,  $\forall g \in G$  και  $n \in \mathbb{N}$ , με  $G$  αβελιανή.
2. Η απεικόνιση  $T: \langle \mathbb{R}^n, + \rangle \rightarrow \langle \mathbb{R}^n, + \rangle$ , εφόσον  $T(a + b) = T(a) + T(b)$ ,  $\forall a, b \in \mathbb{R}^n$ .
3. Η απεικόνιση  $\det: \langle GL(n, \mathbb{R}), \cdot \rangle \rightarrow \langle \mathbb{R}^*, \cdot \rangle$ , εφόσον  $\det(AB) = \det(A) \cdot \det(B)$ .

**Πρόταση 2.3.1.6:**

Έστω  $\varphi: G \rightarrow H$  ομομορφισμός ομάδων. Ισχύουν τα εξής:

- (a)  $\varphi(e_G) = e_H$ .
- (b)  $\forall g \in G, \varphi(g^{-1}) = \varphi(g)^{-1}$ .

**Απόδειξη:**

- (a) Για κάθε  $g \in G$  ισχύει  $\varphi(e_G)\varphi(g) = \varphi(e_G g) = \varphi(g)$ . Άρα  $\varphi(e_G) = e_H$ .

(b) Για κάθε  $g \in G$  ισχύει  $\varphi(g^{-1})\varphi(g) = \varphi(g^{-1}g) = \varphi(e_G) = e_H$ .  
Άρα  $\varphi(g^{-1}) = \varphi(g)^{-1}$ .

**Πρόταση 2.3.1.7:**

Έστω  $\varphi : G \rightarrow H$  ομομορφισμός ομάδων.

(a) για κάθε υποομάδα  $A$  της  $G$  το σύνολο  $\varphi(A)$  είναι υποομάδα της  $H$ .

(b) για κάθε υποομάδα  $B$  της  $H$  το σύνολο  $\varphi^{-1}(B) = \{g \in G : \varphi(g) \in B\}$  είναι υποομάδα της  $G$ .

**Απόδειξη:**

(a) Έστω  $h_1, h_2 \in \varphi(A)$ . Θα δείξω ότι  $h_1 h_2 \in \varphi(A)$ , δηλαδή ότι το σύνολο  $\varphi(A)$  είναι κλειστό ως προς την πράξη. Επειδή  $h_1, h_2 \in \varphi(A) \Rightarrow$

$\exists a_1, a_2 \in A : h_1 = \varphi(a_1)$  και  $h_2 = \varphi(a_2)$ . Είναι  $h_1 h_2 = \varphi(a_1)\varphi(a_2) = \varphi(a_1 a_2)$ . Επειδή η  $A$  είναι υποομάδα της  $G$  έπεται  $a_1 a_2 \in A$  και άρα  $\varphi(a_1 a_2) \in \varphi(A)$  ή  $h_1 h_2 \in \varphi(A)$ .

Έστω  $h \in \varphi(A)$ . Θα δείξω ότι  $h^{-1} \in \varphi(A)$ , δηλαδή το αντίστροφο κάθε στοιχείου της  $\varphi(A)$ , ανήκει στην  $\varphi(A)$ . Επειδή  $h \in \varphi(A) \Rightarrow \exists \alpha \in A : h = \varphi(\alpha)$ . Είναι:

$h^{-1} = [\varphi(\alpha)]^{-1}$ . Λόγω της πρότασης 2.3.1.5 λαμβάνουμε  $h^{-1} = \varphi(\alpha^{-1})$ . Επειδή το σύνολο  $A$  είναι ομάδα  $\alpha^{-1} \in A$ , άρα  $\varphi(\alpha^{-1}) \in \varphi(A)$ , δηλαδή  $h^{-1} \in \varphi(A)$ .

Συνεπώς  $\varphi(A) \leq H$ .

(b) Με παρόμοια επιχειρήματα λαμβάνουμε  $\varphi^{-1}(B) \leq G$ .

**Ορισμός 2.3.1.8 (κανονική υποομάδα):**

Έστω  $G$  ομάδα και  $N$  μία υποομάδα της  $G$ . Η  $N$  λέγεται κανονική υποομάδα της  $G$  αν:

$$\forall g \in G \text{ ισχύει } gNg^{-1} = N.$$

**Ορισμός 2.3.1.9 (πυρήνας ομομορφισμού):**

Έστω  $\varphi : G \rightarrow H$  ομομορφισμός ομάδων. Πυρήνας του ομομορφισμού  $\varphi$  λέγεται το σύνολο:  $\varphi^{-1}(e_H) = \{g \in G : \varphi(g) = e_H\}$  και το συμβολίζουμε  $\ker\varphi$ .

**Πρόταση 2.3.1.10:**

Έστω  $\varphi : G \rightarrow H$  ομομορφισμός ομάδων. Τότε ο πυρήνας της απεικόνισης  $\varphi$ ,  $\ker\varphi$ , είναι κανονική υποομάδα της  $G$ .

**Απόδειξη:**

Θα δείξουμε ότι  $g\ker\varphi g^{-1} = \ker\varphi, \forall g \in G$ . Έστω  $x \in \ker\varphi$ . Τότε είναι:

$\varphi(gxg^{-1}) = \varphi(g)\varphi(x)\varphi(g^{-1})$ , (επειδή  $\varphi$  ομομορφισμός ομάδων)  $\Rightarrow$

$\varphi(gxg^{-1}) = \varphi(g)e\varphi(g^{-1})$ , (επειδή  $x \in \ker\varphi$ )  $\Rightarrow$

$\varphi(gxg^{-1}) = e$ , άρα  $gxg^{-1} \in \ker\varphi$ . Οπότε δείξαμε  $g\ker\varphi g^{-1} \subseteq \ker\varphi$ ,  $\forall g \in G$ .

Αντικαθιστώντας το  $g$  με το  $g^{-1}$ , λαμβάνουμε:  $g^{-1}\ker\varphi g \subseteq \ker\varphi$ ,  $\forall g \in G$ , ή ισοδύναμα,  $\ker\varphi \subseteq g\ker\varphi g^{-1}$ ,  $\forall g \in G$ .

### 2.3.2 Σύμπλοκα και το Θεώρημα Lagrange

#### Ορισμός 2.3.2.1 (σύμπλοκο):

Έστω  $H$  υποομάδα μίας ομάδας  $G$ . Ένα υποσύνολο της  $G$  της μορφής:

$gH = \{gh : h \in H\}$ , όπου  $g \in G$  λέγεται αριστερό σύμπλοκο της  $H$  στην  $G$  που περιέχει το  $g$ .

#### Πρόταση 2.3.2.2:

Έστω  $H$  υποομάδα της  $G$  και έστω  $a, b \in G$ . Τα ακόλουθα είναι ισοδύναμα:

- (a)  $a \in bH$
- (b)  $b \in aH$
- (c)  $aH = bH$
- (d)  $b^{-1}a \in H$
- (e)  $a^{-1}b \in H$

#### Απόδειξη:

(a) $\Rightarrow$ (b): Ισχύει  $a \in bH$ , άρα  $\exists h \in H$  τέτοιο ώστε  $a = bh$ . Άρα  $\exists h \in H$  τέτοιο ώστε  $b = ah^{-1}$ . Δηλαδή  $\exists h^{-1} \in H$  τέτοιο ώστε  $b = ah^{-1}$ , συνεπώς  $b \in aH$ .

Ομοίως (b) $\Rightarrow$ (a).

(a) $\Rightarrow$ (c): Ισχύει  $a \in bH \Rightarrow \exists h \in H$  τέτοιο ώστε  $a = bh$ . Έστω  $h_1 \in H$ . Λαμβάνουμε:  $ah_1 = bhh_1 \in bH$ . Συνεπώς είναι  $aH \subseteq bH$ . Ομοίως (b) $\Rightarrow$ (c).

(c) $\Rightarrow$ (a),(b): Ισχύει ότι  $aH = bH$ . Επίσης είναι  $a \in aH$  και  $b \in bH$ .

(d) $\Rightarrow$ (e): Ισχύει  $b^{-1}a \in H$ , άρα  $\exists h \in H$  τέτοιο ώστε  $b^{-1}a = h$ . Άρα  $\exists h \in H$  τέτοιο ώστε  $a^{-1}b = h^{-1}$ . Δηλαδή  $\exists h^{-1} \in H$  τέτοιο ώστε  $a^{-1}b = h^{-1}$ , συνεπώς  $a^{-1}b \in H$ .

Ομοίως (e) $\Rightarrow$ (d)[10,κεφ 3<sup>ο</sup>].

(a) $\Leftrightarrow$ (d): Ισχύει ότι  $a \in bH$ . Ισοδύναμα  $\exists h \in H$  τέτοιο ώστε  $a = bh$  ή  $\exists h \in H$  τέτοιο ώστε  $b^{-1}a = h$  ή  $b^{-1}a \in H$ .

**Πρόταση 2.3.2.3:**

Έστω  $G$  ομάδα και  $H$  υποομάδα της  $G$ . Ισχύουν τα εξής:

- (a) Έστω  $a, b \in G$ . Τότε είτε  $aH = bH$  είτε  $aH \cap bH = \emptyset$ .
- (b) Κάθε αριστερό σύμπλοκο  $aH$  είναι μη κενό.
- (c) Η ένωση των αριστερών συμπλόκων της  $H$  στην  $G$  είναι η  $G$ .

**Απόδειξη:**

(a) Έστω  $aH \neq bH \Rightarrow \{ah : h \in H\} \neq \{bh : h \in H\}$

Έστω  $aH \cap bH \neq \emptyset \Rightarrow$  υπάρχει  $c \in G$  τέτοιο ώστε  $c \in aH$  και  $c \in bH$ .

Ισοδύναμα, με βάση την προηγούμενη πρόταση, λαμβάνουμε  $aH = cH$  και  $bH = cH$ .

Δηλαδή  $aH = bH$ .

(b) Έστω το αριστερό σύμπλοκο  $aH = \{ah : h \in H\}$  της  $H$ , που περιέχει το  $a$ .

Για  $h = e \in H$  έπεται  $a \in G$  έπεται  $a \in aH$ , άρα  $aH = \{ah : h \in H\} \neq \emptyset$ .

(c) Επειδή για κάθε  $a \in G$  έπεται  $a \in aH$ . Λαμβάνουμε:

$$\bigcup_{a \in G} aH = G$$

**Πρόταση 2.3.2.4:**

Έστω  $G$  ομάδα και  $H$  υποομάδα της  $G$  και έστω  $a, b \in G$ . Τότε η απεικόνιση

$\varphi: x \mapsto ba^{-1}x$  είναι 1 – 1 και επί μεταξύ των συμπλόκων  $aH$  και  $bH$ .

**Απόδειξη:**

Η  $\varphi$  είναι 1 – 1. Πράγματι, αν  $ah_1, ah_2 \in aH$  για κάποια  $h_1, h_2 \in H$  έπεται ότι:

$$\varphi(ah_1) = \varphi(ah_2) \Leftrightarrow ba^{-1}ah_1 = ba^{-1}ah_2 \Leftrightarrow bh_1 = bh_2 \Leftrightarrow h_1 = h_2 \Leftrightarrow ah_1 = ah_2.$$

Η  $\varphi$  είναι επί. Πράγματι, για το στοιχείο  $bh \in bH$  υπάρχει το στοιχείο  $ah \in aH$  τέτοιο ώστε  $\varphi(ah) = ba^{-1}ah = bh$  [10, κεφ 3<sup>ο</sup>].

**Θεώρημα 2.3.2.5 (Lagrange):**

Έστω  $G$  ομάδα πεπερασμένης τάξης και  $H$  μία υποομάδα της  $G$ . Τότε η τάξη της  $H$

διαιρεί την τάξη της  $G$ . Επίσης το πηλίκο  $\frac{|G|}{|H|}$  είναι το πλήθος των αριστερών συμπλόκων της  $H$  στην  $G$ .

### **Απόδειξη:**

Τα διακεκριμένα αριστερά σύμπλοκα είναι ανά δύο ξένα μεταξύ τους και η ένωση των αριστερών συμπλόκων της  $H$  στην  $G$  είναι η  $G$ , με βάση την Πρόταση 2.3.2.4. Επίσης τα αριστερά σύμπλοκα της  $H$  στην  $G$  έχουν την ίδια πληθικότητα, με βάση την πρόταση 2.3.4.4. Συνεπώς είναι:

$$|G| = |H| \cdot (\text{πλήθος των αριστερών συμπλόκων της } H \text{ στην } G).$$

### **Ορισμός 2.3.2.6 (δείκτης υποομάδας):**

Έστω  $G$  ομάδα και  $H$  μία υποομάδα της  $G$ . Δείκτης της  $H$  στην  $G$  είναι το πλήθος των αριστερών συμπλόκων της  $H$  στην  $G$  και συμβολίζεται  $[G:H]$

## **2.3.3 Κλάσεις Ισοδυναμίας και Διαμερίσεις Συνόλων**

### **Ορισμός 2.3.3.1 (διαμέριση συνόλου):**

Έστω ένα σύνολο  $X$ . Μία διαμέριση του συνόλου  $X$  είναι μία συλλογή από σύνολα  $\{A_i\}_{i \in I}$  τέτοια ώστε:

- (i)  $A_i \cap A_j = \emptyset$ , για κάθε  $i \neq j$
- (ii)  $\cup_{i \in I} A_i = X$

### **Ορισμός 2.3.3.2 (σχέση ισοδυναμίας):**

Έστω ένα σύνολο  $X$ . Σχέση ισοδυναμίας στο  $X$  ονομάζουμε μία διμελή σχέση στο  $X$  με τις ακόλουθες ιδιότητες:

- (i) Για κάθε  $x \in X$ ,  $x \sim x$  (ανακλαστικότητα)
- (ii) Για κάθε  $x, y \in X$ ,  $x \sim y \Leftrightarrow y \sim x$  (συμμετρικότητα)
- (iii) Για κάθε  $x, y, z \in X$ , αν  $x \sim y$  και  $y \sim z$ , τότε  $x \sim z$  (μεταβατικότητα)

### **Ορισμός 2.3.3.3 (κλάση ισοσυναμίας):**

Έστω ένα σύνολο  $X$  και  $\sim$  μία σχέση ισοδυναμίας στο  $X$ . Τότε για κάθε  $x \in X$  η κλάση ισοδυναμίας του  $x$  είναι το σύνολο:

$$[x] = \{y \in X : y \sim x\}$$

### **Πρόταση 2.3.3.4:**

Έστω ένα σύνολο  $X$  και  $\sim$  μία σχέση ισοδυναμίας στο  $X$ . Για  $x, y \in X$  οι ακόλουθες προτάσεις είναι ισοδύναμες:

- (a)  $x \in [y]$ .
- (b)  $y \in [x]$ .
- (c)  $[x] = [y]$ .

**Απόδειξη:**

(a) $\Rightarrow$ (b) Έστω  $x \in [y]$ . Τότε είναι  $x \sim y \Rightarrow y \sim x$ , λόγω συμμετρικότητας.

Άρα  $y \in [x]$ .

(b) $\Rightarrow$ (c) Έστω  $y \in [x]$ . Θα δείξω ότι  $[x] = [y]$  ή ισοδύναμα θα δείξω ότι  $[x] \subseteq [y]$  και  $[x] \supseteq [y]$ . Έστω  $k \in [x]$ . Τότε  $k \sim x$ , άρα  $x \sim k$  λόγω συμμετρικότητας και επειδή  $y \in [x]$  έπεται ότι  $y \sim x$ . Τέλος επειδή η σχέση ισοδυναμίας  $\sim$  είναι μεταβατική, λαμβάνουμε  $y \sim k$ , άρα  $k \sim y$  (λόγω συμμετρικότητας), δηλαδή  $k \in [y]$ . Αποδείξαμε ότι  $[x] \subseteq [y]$ . Έστω  $k \in [y]$ . Τότε  $k \sim y$  και επειδή  $y \in [x]$  είναι  $y \sim x$ . Λόγω μεταβατικότητας της  $\sim$  λαμβάνουμε  $k \sim x$ , δηλαδή  $k \in [x]$ . Άρα  $[x] \supseteq [y]$ . Συνεπώς είναι  $[x] = [y]$ .

(c) $\Rightarrow$ (a) Έστω  $[x] = [y]$ . Επειδή η σχέση ισοδυναμίας  $\sim$  είναι ανακλαστική ισχύει  $x \in [x] = [y]$ , οπότε  $x \in [y]$ .

**Πόρισμα 2.3.3.5:**

Έστω ένα σύνολο  $X$  και  $\sim$  μία σχέση ισοδυναμίας στο  $X$ . Τότε η συλλογή όλων των ισοδύναμων κλάσεων του  $X$  είναι μία διαμέριση του  $X$ .

**Ορισμός 2.3.3.6 (κανονική προβολή):**

Έστω  $G$  ομάδα και  $H$  μία υποομάδα της  $G$ . Το σύνολο των αριστερών συμπλόκων της  $H$  στην  $G$  συχνά συμβολίζεται με  $G/H$ . Η επί απεικόνιση:

$$\pi: G \rightarrow G/H, \text{ με } \pi(\alpha) = \alpha H$$

λέγεται κανονική προβολή ή απεικόνιση πηλίκο της  $G$  επί του συνόλου  $G/H$ .

**Ορισμός 2.3.3.8 (συζυγή στοιχεία):**

Έστω  $G$  ομάδα και έστω  $a, b \in G$ . Τα στοιχεία  $a, b$  λέγονται συζυγή αν υπάρχει στοιχείο  $g \in G$  τέτοιο ώστε  $b = g a g^{-1}$ .

Η σχέση συζυγίας είναι μία σχέση ισοδυναμίας στην  $G$ .



**Ορισμός 2.3.3.9 (κλάσεις συζυγίας):**

Οι κλάσεις ισοδυναμίας συζυγών στοιχείων λέγονται κλάσεις συζυγίας.

**2.3.4 Θεωρήματα Ομομορφισμών**

**Θεώρημα 2.3.4.1:**

Έστω  $G$  ομάδα και  $N$  μία κανονική υποομάδα της  $G$ . Το σύνολο των αριστερών συμπλόκων  $G/N$  έχει μία μοναδική πράξη «γινόμενο» η οποία κάνει την  $G/N$  ομάδα και την απεικόνιση  $\pi: G \rightarrow G/N$  ομομορφισμό ομάδων.

**Απόδειξη:**

Ορίζουμε το γινόμενο δύο συμπλόκων  $aN$  και  $bN$  της  $N$  στην  $G$  ως εξής:

$$aNbN = abN$$

Το γινόμενο των συμπλόκων είναι καλώς ορισμένο, επειδή η  $N$  είναι κανονική. Πράγματι:

$$aNbN = \{an_1bn_2 : n_1, n_2 \in N\} = \{abn'_1n_2 : n'_1, n_2 \in N\} = \{abn : n \in N\} = abN$$

Το γινόμενο συμπλόκων είναι προσεταιριστικό, επειδή το γινόμενο συνόλων είναι προσεταιριστικό.

Επίσης υπάρχει το ταυτοτικό σύμπλοκο  $eN$  και το αντίστροφο του συμπλόκου  $aN$ , το οποίο είναι το  $a^{-1}N$ .

Τέλος, η απεικόνιση  $\pi$  είναι ομομορφισμός ομάδων. Πράγματι, έστω  $a, b \in G$ , έχουμε:

$$\pi(ab) = abN = aNbN = \pi(a)\pi(b).$$

**Θεώρημα 2.3.4.2:**

Έστω  $\varphi: G \rightarrow \bar{G}$  ένας επιμορφισμός ομάδων. Έστω επίσης ο ομομορφισμός  $\pi: G / \ker\varphi \rightarrow \bar{G}$ . Τότε υπάρχει ένας ισομορφισμός  $h: G / \ker\varphi \rightarrow \bar{G}$  ικανοποιώντας την ισότητα  $h \circ \pi = \varphi$ .

**Απόδειξη:**

Υπάρχει μοναδικός τρόπος για να ορίσουμε την  $h$ , έτσι ώστε να ικανοποιεί την ισότητα  $h \circ \pi = \varphi$ , ορίζοντας  $h(a\ker\varphi) = \varphi(a)$  για κάθε  $a\ker\varphi \in G / \ker\varphi$ . Είναι:  
 $h(a\ker\varphi \cdot b\ker\varphi) = h(ab\ker\varphi) = \varphi(ab) = \varphi(a)\varphi(b) = h(a\ker\varphi)h(b\ker\varphi)$ .

### Ερμηνείες Θεωρημάτων 2.3.4.2 και 2.3.4.3

Τα Θεωρήματα 2.3.4.1 και 2.3.4.2 μας δείχνουν ότι οι κανονικές υποομάδες και οι επιμορφισμοί ομάδων είναι δύο όψεις του ίδιου νομίσματος. Για δοθείσα κανονική υποομάδα  $N$ , υπάρχει επιμορφισμός με πυρήνα  $N$  και ένας επιμορφισμός προσδιορίζεται πλήρως από τον πυρήνα του. Το Θεώρημα 2.3.4.3 αποκαλύπτει τον καλύτερο τρόπο για να κατανοήσουμε μία ομάδα πηλίκο  $G/N$ .

### Πρόταση 2.3.4.3:

Έστω  $\varphi: G \rightarrow \bar{G}$  επιμορφισμός ομάδων. Τότε ισχύουν τα εξής:

- Αν  $B$  υποομάδα της  $\bar{G}$ , τότε  $\varphi^{-1}(B)$  είναι υποομάδα της  $G$  που περιέχει τον πυρήνα  $\ker\varphi$ .
- Η απεικόνιση  $B \rightarrow \varphi^{-1}(B)$  είναι αμφιμονοσήμαντη μεταξύ των υποομάδων της  $\bar{G}$  και των υποομάδων της  $G$ , που περιέχουν τον  $\ker\varphi$ .
- Έστω  $N$  υποομάδα της  $\bar{G}$ . Η  $N$  είναι κανονική υποομάδα της  $\bar{G}$ , αν και μόνο αν, το σύνολο  $\varphi^{-1}(N)$  είναι κανονική υποομάδα της  $G$ .

### Απόδειξη:

- Για κάθε υποομάδα  $B$  της  $\bar{G}$ , η  $\varphi^{-1}(B)$  είναι υποομάδα της  $G$ . Εφόσον  $e \in B$   $\varphi^{-1}(B) \supseteq \varphi^{-1}(\{e\}) = \ker\varphi$ .
- Έστω  $A$  υποομάδα της  $G$  και έστω η απεικόνιση  $A \rightarrow \varphi(A)$ . Θα δείξω ότι η απεικόνιση  $A \rightarrow \varphi(A)$  είναι αντίστροφη της  $B \rightarrow \varphi^{-1}(B)$ . Επειδή η  $\varphi^{-1}(B)$  είναι υποομάδα της  $G$  έπεται ότι  $\varphi(\varphi^{-1}(B))$  είναι υποομάδα της  $\bar{G}$ , που περιέχει a priori την  $B$  και επειδή η  $\varphi$  είναι επί λαμβάνουμε ότι  $B = \varphi(\varphi^{-1}(B))$ . Για μία  $A$  υποομάδα της  $G$  που περιέχει τα σύνολα  $\ker\varphi$  και  $\varphi^{-1}(\varphi(A))$ , a priori περιέχει την  $A$ . Έστω  $x \in A$ . Τότε υπάρχει  $a \in A$  τέτοιο ώστε  $\varphi(x) = \varphi(a)$  ή ισοδύναμα  $a^{-1}x \in \ker\varphi \subseteq A$ . Άρα  $x \in aA = A$ , δηλαδή  $\varphi^{-1}(\varphi(A)) = A$ .
- Ευθύ: Έστω  $N$  είναι κανονική υποομάδα της  $\bar{G}$ . Θα δείξω ότι το σύνολο  $\varphi^{-1}(N)$  είναι κανονική υποομάδα της  $G$ . Έστω  $g \in G$ . Τότε  $g\varphi^{-1}(N)g^{-1} \supseteq g\ker\varphi g^{-1} = \ker\varphi$ . Άρα η  $g\varphi^{-1}(N)g^{-1}$  είναι υποομάδα της  $G$  που περιέχει τον πυρήνα  $\ker\varphi$ . Με βάση το (b) έχουμε:

$$g\varphi^{-1}(N)g^{-1} = \varphi^{-1}(\varphi(g\varphi^{-1}(N)g^{-1})) = \varphi^{-1}(\varphi(g)(N)\varphi(g^{-1})) = \varphi^{-1}(N)$$

Αντίστροφο: Αρκεί να δείξω ότι για τον επιμορφισμό  $\varphi$  ότι αν  $A$  κανονική υποομάδα της  $G$ , τότε η  $\varphi(A)$  είναι κανονική υποομάδα της  $\bar{G}$ . Έχουμε:

$$\forall g \in G \text{ ισχύει } gAg^{-1} = A \Rightarrow \varphi(gAg^{-1}) = \varphi(A) \Rightarrow \varphi(g)\varphi(A)\varphi(g^{-1}) = \varphi(A) \Rightarrow$$

$\forall \varphi(g) \in \overline{G}$  ισχύει  $(g)\varphi(A)\varphi(g)^{-1} = \varphi(A)$ .

**Πρόταση 2.3.4.4:**

Έστω  $\varphi: G \rightarrow H$  ένας επιμορφισμός με πυρήνα  $N$ . Έστω  $A$  υποομάδα της  $G$ . Τότε είναι  $\varphi^{-1}(\varphi(A)) = AN = \{an: a \in A, n \in N\}$  και η  $AN$  είναι υποομάδα της  $G$  που περιέχει την  $N$ . Επιπλέον ισχύει:

$$AN / N \cong \varphi(A) \cong A / (A \cap N)$$

**Απόδειξη:** Έστω  $x \in G$ . Λαμβάνουμε:

$$\begin{aligned} x &\in \varphi^{-1}(\varphi(A)) \\ &\Leftrightarrow \varphi(x) \in \varphi(A) \\ &\Leftrightarrow \exists \alpha \in A: \varphi(x) = \varphi(\alpha) \\ &\Leftrightarrow \exists \alpha^{-1}x \in N \\ &\Leftrightarrow \exists h \in N: \alpha^{-1}x = h \\ &\Leftrightarrow \exists \alpha \in A: x = ah \Leftrightarrow x \in AN \end{aligned}$$

Άρα  $AN = \varphi^{-1}(\varphi(A))$  και με βάση προηγούμενη πρόταση είναι κανονική υποομάδα της  $G$  που περιέχει τον  $N$ .

Ο περιορισμός της  $\varphi$  στην  $AN$  μας δίνει τον ισομορφισμό:

$$AN / N \cong \varphi(A).$$

Ο περιορισμός της  $\varphi$  στην  $A$  μας δίνει τον ισομορφισμό:

$$A / (A \cap N) \cong \varphi(A) \text{ [10, κεφ 3}^\circ\text{]}.$$

## 2.4 Στοιχεία Θεωρίας Πινάκων

**Ορισμός 2.4.1 (ορθογώνιος πίνακας):**

Ένας  $n \times n$  τετραγωνικός πίνακας  $A$  λέγεται ορθογώνιος, αν  $A^T = A^{-1}$ .

Ισοδύναμα, αν  $AA^T = A^T A = I$ .

**Αντίστροφος:** Έστω  $AA^T = A^T A = I$ . Τότε έπεται άμεσα ότι  $A^T = A^{-1}$ , δηλαδή ο  $A$  ορθογώνιος.

**Λήμμα 2.4.2:**

Έστω  $A_{n \times m}$  πίνακας με  $n \geq m$ . Οι στήλες του  $A$  αποτελούν ορθοκανονικό σύνολο από διανύσματα του  $\mathbb{R}^n$  αν και μόνον αν  $A^T A = I_m$ .

### Απόδειξη:

Έστω  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$  οι στήλες του πίνακα  $A$ . Άρα  $A = [\alpha_1 \ \alpha_2 \ \dots \ \alpha_m]$ . Οι γραμμές του

πίνακα  $A^T$  είναι  $\alpha_1^T, \alpha_2^T, \dots, \alpha_m^T$ . Άρα  $A^T = \begin{bmatrix} \alpha_1^T \\ \alpha_2^T \\ \vdots \\ \alpha_m^T \end{bmatrix}$ . Λαμβάνουμε:  $\langle \alpha_1 | \alpha_1 \rangle = 1$

$$A^T A = \begin{bmatrix} \alpha_1^T \alpha_1 & \alpha_1^T \alpha_2 & \dots & \alpha_1^T \alpha_m \\ \alpha_2^T \alpha_1 & \alpha_2^T \alpha_2 & \dots & \alpha_2^T \alpha_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_m^T \alpha_1 & \alpha_m^T \alpha_2 & \dots & \alpha_m^T \alpha_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \alpha_1 | \alpha_1 \rangle & \langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle & \dots & \langle \alpha_1 | \alpha_m \rangle \\ \langle \alpha_2 | \alpha_1 \rangle & \langle \alpha_2 | \alpha_2 \rangle & \dots & \langle \alpha_2 | \alpha_m \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \alpha_m | \alpha_1 \rangle & \langle \alpha_m | \alpha_2 \rangle & \dots & \langle \alpha_m | \alpha_m \rangle \end{bmatrix}.$$

### Ευθύ:

Έστω οι στήλες του  $A$  αποτελούν ορθοκανονικό σύνολο από διανύσματα του  $\mathbb{R}^n$ .

Τότε, αν  $\alpha_i, \alpha_j \in \mathbb{R}^n$ , πρέπει  $\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = 0$  για  $i \neq j$  και  $\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = 1$  για  $i = j$ .

Συνεπώς είναι  $A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} = I_m$

### Αντίστροφο:

Έστω  $A^T A = I_m$ . Τότε είναι  $\begin{bmatrix} \langle \alpha_1 | \alpha_1 \rangle & \langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle & \dots & \langle \alpha_1 | \alpha_m \rangle \\ \langle \alpha_2 | \alpha_1 \rangle & \langle \alpha_2 | \alpha_2 \rangle & \dots & \langle \alpha_2 | \alpha_m \rangle \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \langle \alpha_m | \alpha_1 \rangle & \langle \alpha_m | \alpha_2 \rangle & \dots & \langle \alpha_m | \alpha_m \rangle \end{bmatrix} = I_m$ . Δηλαδή είναι

$\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = 0$ , για  $i \neq j$  και  $\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = 1$ , για  $i = j$ . Άρα οι στήλες του  $A$  αποτελούν ορθοκανονικό σύνολο από διανύσματα του  $\mathbb{R}^n$ , [11].

### Λήμμα 2.4.3:

Έστω  $x, y \in \mathbb{R}^n$ . Τότε ισχύει:  $\langle x | y \rangle = \frac{1}{4} \|x + y\|^2 - \frac{1}{4} \|x - y\|^2$ .

### Απόδειξη:

Είναι  $\|x + y\|^2 = \|x\|^2 + 2\langle x | y \rangle + \|y\|^2$  (1) και  $\|x - y\|^2 = \|x\|^2 - 2\langle x | y \rangle + \|y\|^2$  (2).

Αφαιρώντας την (2) από την (1) λαμβάνουμε:

$$\|x + y\|^2 - \|x - y\|^2 = 4\langle x | y \rangle \text{ ή } \langle x | y \rangle = \frac{1}{4} \|x + y\|^2 - \frac{1}{4} \|x - y\|^2.$$

### Θεώρημα 2.4.4:

Έστω ένας  $A_{n \times n}$  πίνακας. Τα ακόλουθα είναι ισοδύναμα:

- (α) Ο  $A$  είναι ορθογώνιος.
- (β) Για κάθε  $x \in \mathbb{R}^n$  ισχύει  $\|Ax\| = \|x\|$ .
- (γ) Για κάθε  $x, y \in \mathbb{R}^n$  ισχύει  $\langle Ax|Ay \rangle = \langle x|y \rangle$ .

### Απόδειξη:

(α)  $\Rightarrow$  (β): Έστω ότι ο πίνακας  $A$  είναι ορθογώνιος και έστω  $x \in \mathbb{R}^n$ . Έχουμε:

$$\|Ax\| = \langle Ax|Ax \rangle^{1/2} = \langle x|A^T Ax \rangle^{1/2}. \text{ Επειδή ο } A \text{ είναι ορθογώνιος ισχύει } A^T A = I.$$

$$\text{Η τελευταία ισότητα γίνεται: } \|Ax\| = \langle x|x \rangle^{1/2} = \|x\|.$$

(β)  $\Rightarrow$  (γ): Έστω ότι ισχύει  $\|Ax\| = \|x\|$  για κάθε  $x \in \mathbb{R}^n$ . Έστω  $x, y \in \mathbb{R}^n$ . Έχουμε:

$$\begin{aligned} \langle Ax|Ay \rangle &= \frac{1}{4} \|Ax + Ay\|^2 - \frac{1}{4} \|Ax - Ay\|^2 = \frac{1}{4} \|A(x + y)\|^2 - \frac{1}{4} \|A(x - y)\|^2 \Rightarrow \\ \langle Ax|Ay \rangle &= \frac{1}{4} \|x + y\|^2 - \frac{1}{4} \|x - y\|^2 = \langle x|y \rangle. \end{aligned}$$

Η τελευταία ισότητα βασίστηκε στο Λήμμα 2.4.3.

(γ)  $\Rightarrow$  (α): Υποθέτουμε ότι ισχύει  $\langle Ax|Ay \rangle = \langle x|y \rangle$ , για κάθε  $x, y \in \mathbb{R}^n$ . Τότε για κάθε  $x, y \in \mathbb{R}^n$  έπεται:  $\langle x|A^T Ay \rangle = \langle x|y \rangle \Rightarrow \langle x|A^T Ay \rangle - \langle x|y \rangle = 0 \Rightarrow \langle x|A^T Ay - y \rangle = 0$   
 $\Rightarrow \langle x|(A^T A - I)y \rangle = 0$ . Επειδή η τελευταία ισότητα ισχύει για κάθε  $x \in \mathbb{R}^n$ , επιλέγουμε  $x = (A^T A - I)y$ . Λαμβάνουμε  $\langle (A^T A - I)y|(A^T A - I)y \rangle = 0$  ή  $(A^T A - I)y = 0$  για κάθε  $y \in \mathbb{R}^n$ . Άμεσα έπεται  $A^T A = I$ , δηλαδή ο πίνακας  $A$  είναι ορθογώνιος[11].

### Θεώρημα 2.4.5:

Έστω  $A_{n \times n}, B_{n \times n}$  δύο ορθογώνιοι πίνακες. Τότε ισχύει:

- (α) Ο πίνακας  $A^{-1}$  είναι ορθογώνιος.
- (β) Ο πίνακας  $AB$  είναι ορθογώνιος.
- (γ)  $\det(A) = 1$  ή  $\det(A) = -1$

### Απόδειξη:

(α) Επειδή ο πίνακας  $A$  είναι ορθογώνιος ( $AA^T = A^T A = I$ ) λαμβάνουμε:

$$A^{-1}(A^{-1})^T = A^{-1}(A^T)^T = A^{-1}A^T = I$$

(β) Επειδή οι πίνακες  $A$  και  $B$  είναι ορθογώνιοι ( $AA^T = A^T A = I$  και  $BB^T = B^T B = I$ ), έχουμε:  $(AB)(AB)^T = AB B^T A^T = AA^T = I$

(γ) Επειδή ο πίνακας  $A$  είναι ορθογώνιος έχουμε:

$$1 = \det(I) = \det(AA^T) = \det(A)\det(A^T)$$

Από το (α) λαμβάνουμε:  $\det(A) = \det(A^T)$ . Συνεπώς έχουμε:

$$1 = \det(A)^2, \text{ δηλαδή } \det(A) = 1 \text{ ή } \det(A) = -1.$$

### **Ορισμός 2.4.6 (ιδιοτιμή πίνακα):**

Έστω  $V$  διανυσματικός χώρος και  $A$  ο πίνακας μίας γραμμικής απεικόνισης του  $V$  στον εαυτό του. Ένα στοιχείο  $v \neq 0 \in V$  λέγεται ιδιοδιάνυσμα του πίνακα  $A$  αν υπάρχει  $\lambda \in \mathbb{R}$  τέτοιο ώστε:  $Av = \lambda v$ . Το  $\lambda$  λέγεται ιδιοτιμή του πίνακα  $A$  που αντιστοιχεί στο ιδιοδιάνυσμα  $v$ .

## ***2.5 Στοιχεία Κυρτής Ανάλυσης***

Ένα **υπερεπίπεδο** του  $\mathbb{R}^n$  είναι ένας υπόχωρος του  $\mathbb{R}^n$  διάστασης  $n - 1$ .

Υπερεπίπεδο στον  $\mathbb{R}^2$  είναι μία γραμμή που διέρχεται από το  $(0,0)$ , στον  $\mathbb{R}^3$  ένα επίπεδο που διέρχεται από το  $(0,0,0)$  κτλ., [11].

Στην περίπτωση αυτή συμβολίζουμε:  $H_a = \{x \in \mathbb{R}^n : \langle x|a \rangle = 0\}$

### **Ορισμός 2.5.1 (υπερεπίπεδο, αφινικό υπερεπίπεδο):**

Έστω  $p, a \in \mathbb{R}^n$  με  $a \neq 0$ . Το υπερεπίπεδο που διέρχεται από το  $p$  και είναι κάθετο στο  $a$  είναι το σύνολο λέγεται αφινικό υπερεπίπεδο του  $\mathbb{R}^n$  και συμβολίζεται με:

$$p + H_a = \{x \in \mathbb{R}^n : \langle x - p|a \rangle = 0\}$$

### **Παρατήρηση:**

Το αφινικό υπερεπίπεδο  $p + H_a = \{x \in \mathbb{R}^n : \langle x - p|a \rangle = 0\}$  είναι μία παράλληλη μετατόπιση του  $H_a = \{x \in \mathbb{R}^n : \langle x|a \rangle = 0\}$  κατά  $p$ .

### **Λήμμα 2.5.2:**

Έστω  $p, a \in \mathbb{R}^n$  με  $a \neq 0$ . Τότε για το αφινικό υπερεπίπεδο που διέρχεται από το σημείο  $p$  και είναι κάθετο στο  $a$  ισχύει:

$$p + H_a = \{x \in \mathbb{R}^n : \langle x|a \rangle = \langle p|a \rangle\}.$$

### **Απόδειξη:**

Είναι:  $\langle x - p|a \rangle = 0 \Leftrightarrow \langle x|a \rangle - \langle p|a \rangle \Leftrightarrow \langle x|a \rangle = \langle p|a \rangle$ .

**Πρόταση 2.5.3:**

Έστω  $a$  και  $b$  δύο διακεκριμένα σημεία του  $\mathbb{R}^n$ . Τότε το σύνολο των σημείων που έχουν την ίδια απόσταση από τα  $a$  και  $b$  είναι το αφινικό υπερεπίπεδο  $x_0 + H_c$ , όπου  $x_0 = \frac{a+b}{2}$ ,  $c = b - a$  και  $H_c = \{x \in \mathbb{R}^n : \langle x|c \rangle = 0\}$ .

**Απόδειξη:**

Τα σημεία που έχουν ίδια απόσταση από τα  $a$  και  $b$  είναι το σύνολο

$$\{x \in \mathbb{R}^n : \|x - a\| = \|x - b\|\}.$$

Έχουμε:

$$\begin{aligned} \|x - a\| = \|x - b\| &\Rightarrow \|x - a\|^2 = \|x - b\|^2 \Leftrightarrow \langle x - a|x - a \rangle = \langle x - b|x - b \rangle \Leftrightarrow \\ \|x\|^2 - 2\langle x|a \rangle + \|a\|^2 &= \|x\|^2 - 2\langle x|b \rangle + \|b\|^2 \Leftrightarrow \|b\|^2 - \|a\|^2 = 2\langle x|b \rangle - 2\langle x|a \rangle \Leftrightarrow \\ \|b\|^2 - \|a\|^2 &= 2\langle x|b - a \rangle. \end{aligned}$$

Ας είναι  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ ,  $a = (a_1, a_2, \dots, a_n)$ , και  $b = (b_1, b_2, \dots, b_n)$ .

Λαμβάνουμε  $\|x - a\| = \|x - b\| \Rightarrow$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n b_i^2 - \sum_{i=1}^n a_i^2 &= 2 \sum_{i=1}^n x_i(b_i - a_i) \Leftrightarrow \\ \sum_{i=1}^n x_i(b_i - a_i) &= 1/2 \sum_{i=1}^n (b_i - a_i)(b_i + a_i) \Leftrightarrow \\ \langle x|b - a \rangle &= \left\langle \frac{\alpha + \beta}{2} \middle| b - a \right\rangle. \end{aligned}$$

Με βάση το λήμμα 2.5.2 τα σημεία που ισαπέχουν από τα  $a$  και  $b$  είναι το αφινικό υπερεπίπεδο  $x_0 + H_c$ , όπου  $x_0 = \frac{a+b}{2}$ ,  $c = b - a$ .

**Πόρισμα 2.5.4:**

Έστω  $a_i (1 \leq i \leq n + 1)$   $n + 1$  σημεία του  $\mathbb{R}^n$  τα οποία δεν βρίσκονται όλα στο ίδιο υπερεπίπεδο. Αν τα  $a$  και  $b$  ικανοποιούν την ισότητα  $\rho(a, a_i) = \rho(b, a_i) \forall i (1 \leq i \leq n + 1)$ , τότε ισχύει  $a = b$ .

**Απόδειξη:**

Έστω  $a \neq b$ . Τότε από την Πρόταση 2.5.3 έχουμε ότι το σύνολο των σημείων που ισαπέχουν από τα  $a$  και  $b$  είναι το αφινικό υπερεπίπεδο  $x_0 + H_c$ , όπου  $x_0 = \frac{a+b}{2}$ ,  $c = b - a$ . Επειδή ισχύει:

$$\rho(a, a_i) = \rho(b, a_i) \quad (1 \leq i \leq n + 1) \text{ έπεται ότι } a_i \in x_0 + H_c, \forall i (1 \leq i \leq n + 1).$$

Άτοπο, αφού δεν βρίσκονται όλα τα  $a_i$  στο ίδιο υπερεπίπεδο.

### **Πόρισμα 2.5.5:**

Έστω  $a_i (1 \leq i \leq n + 1)$  είναι  $n + 1$  σημεία του  $\mathbb{R}^n$  τα οποία δεν βρίσκονται όλα στο ίδιο υπερεπίπεδο. Έστω επίσης μια γραμμική ισομετρία  $\tau : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ . Αν η ισομετρία  $\tau$  ικανοποιεί την ισότητα  $\tau(a_i) = a_i \forall i (1 \leq i \leq n + 1)$ , τότε  $\tau = id$ .

### **Απόδειξη:**

Για κάθε σημείο  $a \in \mathbb{R}^n$  είναι:

$\rho(\tau(a), a_i) = \rho(\tau(a), \tau(a_i)) = \rho(a, a_i) \forall i (1 \leq i \leq n + 1)$ . Με βάση το πόρισμα 2.5.4 λαμβάνουμε  $\tau(a) = a$ , δηλαδή  $\tau = id$ .

## **2.6 Ευθέα – Ημieuθέα Γινόμενα**

### **Ορισμός 2.6.1 (ευθύ γινόμενο):**

Έστω οι ομάδες  $\langle G, * \rangle, \langle H, \circ \rangle$ . Ορίζουμε το ευθύ γινόμενο των δύο ομάδων ως εξής:

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

Το ευθύ γινόμενο  $G \times H$  είναι ομάδα με πράξη  $(g, h)(g', h') = (g * g', h \circ h')$ , [10].

### **Ορισμός 2.6.2 (ημieuθύ γινόμενο):**

Έστω οι ομάδες  $G$  και  $H$ , και έστω ένας ομομορφισμός  $\alpha : H \rightarrow \text{Aut}(G)$ . Ορίζουμε το ημieuθύ γινόμενο ως εξής:

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

Το ημieuθύ γινόμενο  $G \rtimes_{\alpha} H$  είναι ομάδα με πράξη  $(g, h)(g', h') = (g\alpha(h)g', hh')$ , [10].

## **2.7 Στοιχεία Γραμμικών Ισομετριών**

### **Ορισμός 2.7.1 (ορθογώνια ομάδα):**

Το σύνολο των ορθογωνίων τετραγωνικών πινάκων συμβολίζεται με  $O(n, \mathbb{R})$  και είναι ομάδα βάσει του Θεωρήματος 2.4.6, η λεγόμενη ορθογώνια ομάδα.

### **Ορισμός 2.7.2 (ειδική ορθογώνια ομάδα):**

Το σύνολο των ορθογωνίων τετραγωνικών πινάκων με ορίζουσα +1 λέγεται ειδική ορθογώνια ομάδα και συμβολίζεται με  $SO(n, \mathbb{R})$ .



### Λήμμα 2.7.3:

Η ορίζουσα μιας ισομετρίας είναι  $\pm 1$ .

### Απόδειξη:

Θεωρούμε την απεικόνιση  $det: O(n, \mathbb{R}) \rightarrow \{1, -1\}$  μεταξύ των ομάδων  $O(n, \mathbb{R})$ ,  $\{1, -1\}$  (με πράξη τον πολλαπλασιασμό). Επειδή  $det(A, B) = det(A) det(B)$ , η απεικόνιση  $det$  είναι ομομορφισμός. Συνεπώς έχουμε  $SO(n, \mathbb{R}) = \ker(det)$ .

### Λήμμα 2.7.2:

Έστω  $A$  ένας ορθογώνιος πίνακας. Τότε η γραμμική απεικόνιση  $\tau: x \rightarrow Ax$  είναι ισομετρία.

### Απόδειξη:

Με βάση το Θεώρημα 2.4.5 λαμβάνουμε  $\|Ax\| = \|x\|$ , για κάθε  $x \in \mathbb{R}^n$ , άρα  $\|\tau(x)\| = \|x\|$ , για κάθε  $x \in \mathbb{R}^n$ .

### Θεώρημα 2.7.3:

Έστω  $\tau: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  μια γραμμική απεικόνιση. Τα ακόλουθα είναι ισοδύναμα:

- Η απεικόνιση  $\tau$  είναι ισομετρία.
- Η απεικόνιση  $\tau$  διατηρεί το εσωτερικό γινόμενο.
- Για κάποια ορθοκανονική βάση  $\{f_1, \dots, f_n\}$  του  $\mathbb{R}^n$ , το σύνολο  $\{\tau(f_1), \dots, \tau(f_n)\}$  είναι ορθοκανονικό.
- Για κάθε ορθοκανονική βάση  $\{f_1, \dots, f_n\}$  του  $\mathbb{R}^n$ , σύνολο  $\{\tau(f_1), \dots, \tau(f_n)\}$  είναι ορθοκανονικό.
- Ο πίνακας της γραμμικής απεικόνισης  $\tau$ , σε σχέση με κάποια ορθοκανονική βάση, είναι ορθογώνιος.
- Ο πίνακας της γραμμικής απεικόνισης  $\tau$ , σε σχέση με κάθε ορθοκανονική βάση, είναι ορθογώνιος.

### Απόδειξη:

(a) $\Rightarrow$ (b): Έπεται από το Λήμμα 2.1.11

(b) $\Rightarrow$ (c): Έστω ότι η απεικόνιση  $\tau$  διατηρεί το εσωτερικό γινόμενο και έστω μία ορθοκανονική βάση του  $\{f_1, \dots, f_n\}$  του  $\mathbb{R}^n$ . Για το σύνολο  $\{\tau(f_1), \dots, \tau(f_n)\}$  έχουμε:  $\langle \tau(f_i) | \tau(f_j) \rangle = \langle f_i | f_j \rangle = 0$ , για  $i \neq j$  και 1, για  $i = j$ .

(c) $\Rightarrow$ (d): Έπεται άμεσα από την προηγούμενη συνεπαγωγή.

(d) $\Rightarrow$ (e): Έστω μία ορθοκανονική βάση  $\{f_1, \dots, f_n\}$  του  $\mathbb{R}^n$ . Ο πίνακας της γραμμικής απεικόνισης  $\tau$  σε σχέση με την βάση  $\{f_1, \dots, f_n\}$  είναι:

$$\begin{bmatrix} \langle f_1|f_1 \rangle & \langle f_1|f_2 \rangle & \cdots & \langle f_1|f_n \rangle \\ \langle f_2|f_1 \rangle & \langle f_2|f_2 \rangle & \ddots & \langle f_2|f_n \rangle \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \langle f_n|f_1 \rangle & \langle f_n|f_2 \rangle & \cdots & \langle f_n|f_n \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} = I_n$$

(e) $\Rightarrow$ (f): Έπεται άμεσα από την προηγούμενη συνεπαγωγή.

(f) $\Rightarrow$ (a): Έπεται από το Λήμμα 2.7.2.

#### **Πρόταση 2.7.4:**

Ένα στοιχείο  $A \in O(3, \mathbb{R})$  έχει ορίζουσα 1 αν και μόνον αν ο  $A$  εκτελεί στροφή.

#### **Απόδειξη:**

Ευθύ: Έστω  $A \in SO(3, \mathbb{R})$  και έστω  $\tau$  η αντίστοιχη γραμμική ισομετρία  $\tau: x \rightarrow Ax$ . Ο  $A$  θα έχει ιδιοδιάνυσμα  $v$  με αντίστοιχη ιδιοτιμή +1. Έστω ένα επίπεδο  $P$  κάθετο στο  $v$ . Το  $P$  είναι αναλλοίωτο υπό την ισομετρία  $\tau$  και  $\det(\tau|_P) = \det(\tau) = 1$ . Άρα ο περιορισμός  $\tau|_P$  είναι στροφή. Συνεπώς, η ισομετρία  $\tau$  είναι στροφή γυρω από τον φορέα του διανύσματος  $v$ , [10].

Αντίστροφο: Έστω ότι η  $\tau$  είναι στροφή. Τότε ο πίνακας της ισομετρίας  $\tau$ , σε σχέση με κατάλληλη ορθοκανονική βάση έχει την μορφή:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ 0 & \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$$

που έχει ορίζουσα 1.

**Πρόταση 2.7.5:** Κάθε στοιχείο  $A \in O(3, \mathbb{R}) \setminus SO(3, \mathbb{R})$  εκτελεί ή ορθογώνια ανάκλαση ή ανάκλαση και στροφή.

**Απόδειξη:** Έστω  $A \in O(3, \mathbb{R}) \setminus SO(3, \mathbb{R})$  και έστω  $\tau$  η αντίστοιχη γραμμική ισομετρία  $\tau: x \rightarrow Ax$ . Άς είναι  $v$  ένα ιδιοδιάνυσμα του πίνακα  $A$  με αντίστοιχη ιδιοτιμή  $\pm 1$ .

Διακρίνουμε τις περιπτώσεις:

Αν η ιδιοτιμή είναι +1, τότε ο περιορισμός της ισομετρίας  $\tau$  σε ένα επίπεδο  $P$  ορθογώνιο στο  $v$ , έχει ορίζουσα -1, άρα πρόκειται για ανάκλαση. Συνεπώς η ισομετρία  $\tau$  είναι ανάκλαση.

Αν η ιδιοτιμή είναι  $-1$ , τότε ο περιορισμός της ισομετρίας  $\tau$  στο επίπεδο  $P$  έχει ιδιοτιμή  $+1$ , άρα πρόκειται για στροφή. Σε αυτή την περίπτωση η ισομετρία  $\tau$  είναι σύνθεση μιας ανάκλασης (στο επίπεδο  $P$ ) και μιας στροφής (γύρω από έναν άξονα που παράγεται από το  $v$ ), [10].

**Θεώρημα 2.7.6:** Κάθε γραμμική ισομετρία του  $\mathbb{R}^n$  είναι σύνθεση το πολύ  $n$  ορθογώνιων ανακλάσεων.

**Απόδειξη:**

Έστω  $\tau$  μία γραμμική ισομετρία του  $\mathbb{R}^n$  και έστω  $\mathbb{E} = \{e_i\}$ , με  $1 \leq i \leq n$ , η τυπική ορθοκανονική βάση του  $\mathbb{R}^n$ . Έστω επίσης  $f_i = \tau(e_i)$ , με  $1 \leq i \leq n$ . Θα δείξουμε με την μέθοδο της μαθηματικής επαγωγής για  $1 \leq p \leq n$  ότι υπάρχει γινόμενο  $\rho_p$  το πολύ  $p$  ορθογώνιων ανακλάσεων που ικανοποιούν την ισότητα  $\tau_p(e_i) = f_i \forall i \in 1 \leq i \leq p$ .

Αν  $e_1 = f_1$ , θέτουμε  $\rho_1 = id$ . Αλλιώς το  $\mathbf{0}$  βρίσκεται στο υπερεπίπεδο που αποτελείται από τα σημεία του  $\mathbb{R}^n$ , που έχουν την ίδια απόσταση με τα σημεία  $e_1$  και  $f_1$ . Σε αυτή την περίπτωση το  $\rho_1$  είναι ορθογώνια ανάκλαση στο υπερεπίπεδο που βρίσκεται το  $\mathbf{0}$ . Υποθέτουμε ότι  $\rho = \rho_{p-1}$  είναι γινόμενο το πολύ  $p - 1$  ορθογώνιων ανακλάσεων, οι οποίες αντιστοιχούν το  $e_i \rightarrow f_i \forall i \in 1 \leq i \leq p - 1$ . Αν επιπλέον ισχύει  $\rho(e_p) = f_p$ , τότε θέτουμε  $\rho_p = \rho$ . Διαφορετικά, παρατηρούμε το εξής: τα σύνολα  $\{f_1, \dots, f_{p-1}, f_p\}$  και  $\{f_1, \dots, f_{p-1}, \rho(e_p)\} = \{\rho(e_1), \dots, \rho(e_{p-1}), \rho(e_p)\}$  είναι ορθοκανονικά. Συνεπώς το σύνολο  $\{f_1, \dots, f_{p-1}\} \cup \{\mathbf{0}\}$  βρίσκονται στο υπερεπίπεδο που αποτελείται από τα σημεία του  $\mathbb{R}^n$ , που έχουν την ίδια απόσταση από τα σημεία  $f_p$  και  $\rho(e_p)$ . Αν  $\sigma$  είναι μία ορθογώνια ανάκλαση στο συγκεκριμένο υπερεπίπεδο, τότε η  $\rho_p = \sigma \circ \rho$  είναι η ζητούμενη ισομετρία. Τέλος, με βάση το Πρόγραμμα 2.5.5, αν  $\tau = \rho_n$ , λαμβάνουμε την ισομετρία  $\rho_n^{-1} \circ \tau$ , [10].

**Παρατηρήσεις:**

1. Ένα στοιχείο της  $O(n, \mathbb{R})$  έχει ορίζουσα  $1$  αν και μόνον αν είναι άρτιο γινόμενο ανακλάσεων.
2. Ένα στοιχείο της  $O(n, \mathbb{R})$  έχει ορίζουσα  $-1$  αν και μόνον αν είναι περιττό γινόμενο ανακλάσεων.

**Ορισμός 2.7.7 (μεταφορά):** Έστω  $b \in \mathbb{R}^n$ . Ορίζουμε ως **μεταφορά (translation)**  $\tau_b$  την ισομετρία:

$$\tau_b(x) = x + b, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \text{ (Εικόνα 2.7.7.1)}.$$

**Ορισμός 2.7.8 (αφινική 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:

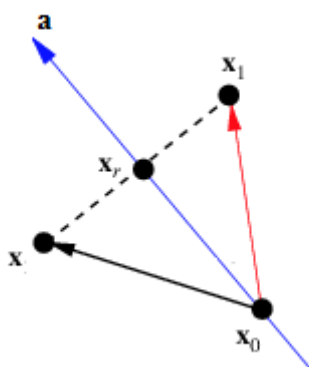
$$f_{a,x_0} = x - 2\langle x - x_0 | a \rangle a \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \text{ (Εικόνα 2.7.8.1)}.$$

Στο σημείο αυτό είναι σκόπιμο να κάνουμε την γεωμετρική ερμηνεία της αφινικής ανάκλασης (βλ. Σχήμα 2.7.8.1β) και να παρατηρήσουμε τα εξής:

Το διάνυσμα  $x_r - x_0$  γράφεται και με την βοήθεια εσωτερικού γινομένου ως εξής:

$x_r - x_0 = [\langle x - x_0 | a \rangle a]$ . Επειδή είναι  $x_r = 1/2(x + x_1)$ , λαμβάνουμε την ισομετρία:

$$x_1 = x - 2\langle x - x_0 | a \rangle a.$$



Σχήμα 2.7.8.1β: Γεωμετρική Ερμηνεία της αφινικής ανάκλασης, [12]

**Ορισμός 2.7.9 (ολισθαίνουσα ανάκλαση):** Έστω  $\tau_a$  μεταφορά (translation), για κάποιο  $a \in \mathbb{R}^n$ , παράλληλο στο υπερεπίπεδο μιας ανάκλασης  $\sigma$  (affine reflection). Ορίζουμε ως **ολισθαίνουσα ανάκλαση (glide reflection)** την ισομετρία:

$$g_{a,\sigma} = \tau_a \sigma \text{ (Εικόνα 2.7.9.1)}.$$

**Ορισμός 2.7.10 (αφινική στροφή):** Έστω  $P \in \mathbb{R}^n$ ,  $\tau_{x_0}$  μεταφορά (translation) και  $R$  στροφή (rotation). Ορίζουμε ως **στροφή ή αφινική στροφή (affine rotation)** με κέντρο  $x_0$  την ισομετρία:

$$r_\theta = \tau_P R \tau_{-P} \text{ (Εικόνα 2.7.10.1)}.$$

**Πόρισμα 5.11:** Το σύνολο των μεταφορών του  $\mathbb{R}^n$  είναι κανονική υποομάδα της ομάδας των ισομετριών του  $\mathbb{R}^n$ , και ισομορφική με την προσθετική ομάδα  $(\mathbb{R}^n, +)$ . Επιπλέον, για κάθε ισομετρία  $\sigma$  και για κάθε διάνυσμα  $b \in \mathbb{R}^n$  ισχύει  $\sigma\tau_b\sigma^{-1} = \tau_{\sigma(b)}$ .

**Θεώρημα 2.7.11:** Η ομάδα των ισομετριών  $Isom(n)$  του  $\mathbb{R}^n$  είναι το ημιγινόμενο της ομάδας των γραμμικών ισομετριών και της ομάδας των μεταφορών. Είναι:

$$Isom(n) \cong O(n, \mathbb{R}) \ltimes \mathbb{R}^n.$$

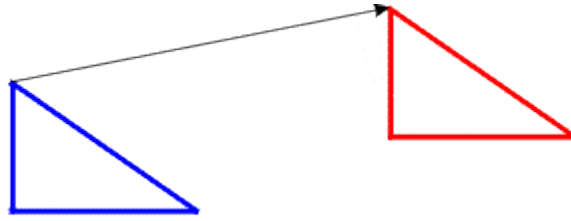
**Απόδειξη του θεωρήματος:** Το καρτεσιανό γινόμενο μεταξύ της ομάδας των μεταφορών και της ομάδας των γραμμικών ισομετριών είναι ολόκληρη η ομάδα των ισομετριών. Η τομή αυτών των ομάδων είναι το ταυτοτικό στοιχείο και η ομάδα των μεταφορών είναι κανονική υποομάδα της ομάδας των ισομετριών. Συνεπώς η ομάδα των ισομετριών  $Isom(n)$  του  $\mathbb{R}^n$  είναι το ημιευθύ γινόμενο των δύο αυτών υποομάδων, Δηλαδή είναι  $Isom(n) \cong O(n, \mathbb{R}) \ltimes \mathbb{R}^n$ .

**Πρόταση 2.7.12:** Κάθε ισομετρία στον  $\mathbb{R}^2$  είναι μεταφορά, ολισθαίνουσα ανάκλαση, αφινική ανάκλαση ή αφινική στροφή.

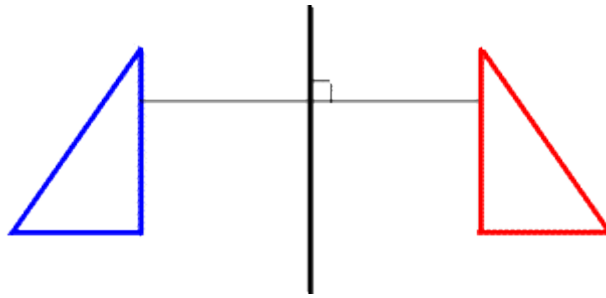
**Απόδειξη πρότασης:** Κάθε ισομετρία γράφεται μοναδικά ως γινόμενο  $\tau_b B$ , όπου  $B$  είναι γραμμική ισομετρία. Αν  $B = I$  τότε η ισομετρία είναι μεταφορά.

Αν  $B = R_\theta$ , στροφή γωνίας  $0 < \theta < 2\pi$ . Τότε ο πίνακας  $I - R_\theta$  είναι αντιστρέψιμος και άρα η εξίσωση  $x - R_\theta x$  είναι επιλύσιμη. Λαμβάνουμε:  $\tau_h R_\theta = \tau_x \tau_{-R(x)} R_\theta = \tau_x R_\theta \tau_{-x}$ . Συνεπώς πρόκειται για αφινική στροφή.

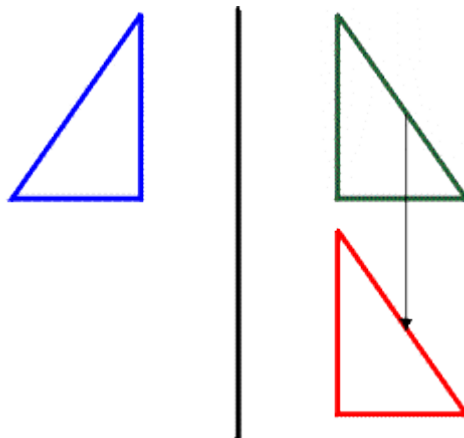
Αν  $B = j_a$  είναι ανάκλαση και γράφουμε  $sa + tb$ , όπου το διάνυσμα  $b$  είναι κάθετο στο διάνυσμα  $a$ . Παρατηρούμε ότι:  $\tau_{sa} j_a(x) = x - 2\langle x - (s/2)a | a \rangle a$  είναι αφινική ανάκλαση. Αν  $t=0$  πρόκειται για ολισθαίνουσα ανάκλαση.



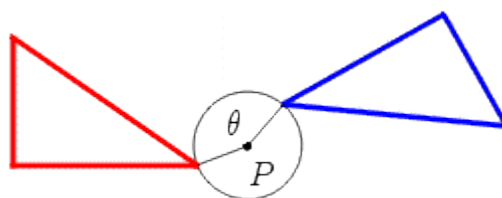
Εικόνα 2.7.7.1: Μεταφορά



Εικόνα 2.7.8.1: Αφινική ανάκλαση ή ανάκλαση



Εικόνα 2.7.9.1: Ολισθαίνουσα ανάκλαση



Εικόνα 2.7.10.1: Στροφή

# 3

## *Στοιχεία*

### *Κρυσταλλογραφίας*

#### ***3.1 Ο Κρυσταλλογραφικός Περιορισμός***

Ένας κρύσταλλος αποτελείται από δομικές μονάδες (άτομα, ιόντα ή μόρια) που συγκρατούνται με χημικούς δεσμούς σε μια διάταξη η οποία επαναλαμβάνεται περιοδικά σε τρεις διαστάσεις. Κρυσταλλική δομή είναι η κανονική, περιοδική γεωμετρική διάταξη στη οποία διευθετούνται οι δομικές μονάδες ενός στερεού. Αν ένα στερεό δεν παρουσιάζει μια ορισμένη κρυσταλλική δομή, τότε είναι άμορφο. Η έννοια της κρυσταλλικής δομής συνδέεται άμεσα με τον συμμετρικό τρόπο διευθέτησης των δομικών μονάδων, που αντανακλάται στη μορφή ή στις μορφές ενός κρυστάλλου. Μάλιστα, η ίδια εξωτερική συμμετρία των ποικίλων μορφών με τις οποίες εμφανίζεται ο κρύσταλλος μιας χημικής ουσίας, καθώς και η μελέτη των ιδιοτήτων του με μεθόδους που ήταν διαθέσιμες πριν την ανακάλυψη της περίθλασης ακτίνων Χ, δίνει ισχυρές ενδείξεις ότι τα άτομα από τα οποία οικοδομείται δεν είναι τυχαία προσανατολισμένα, όπως οι κόκκοι σε ένα σωρό άμμου, αλλά στοιβάζονται με μεγάλη τάξη και κανονικότητα. Όπως έχουμε αναφέρει στην παράγραφο 2.2 η εξωτερική συμμετρία ενός κρυστάλλου εκφράζεται από τα τρία βασικά στοιχεία συμμετρίας: τον άξονα συμμετρίας, το επίπεδο συμμετρίας και το κέντρο συμμετρίας. Όμως, οι κρύσταλλοι είναι στερεά που αποτελούνται από άτομα ή ομάδες ατόμων που επαναλαμβάνονται με κανονικό τρόπο στον χώρο. Η περιοδική αυτή επανάληψη είναι μία μορφή συμμετρίας, γνωστή ως συμμετρία από μεταφορά ή μεταφορική συμμετρία. Στην συνέχεια θα αποδείξουμε ότι οι κρύσταλλοι δεν διαθέτουν άξονες

συμμετρίας 5<sup>ης</sup> και παραπάνω από 6<sup>ης</sup> τάξης [3,κεφ 2<sup>ο</sup>],[13]. Ο περιορισμός ότι επιτρέπονται μόνο συγκεκριμένοι άξονες περιστροφής, γιατί οι άλλοι δεν είναι συμβατοί με την μεταφορική πλήρωση του χώρου ονομάζεται *κρυσταλλογραφικός περιορισμός*.

### ***3.2 Συμμετρία σημείου και Κρυσταλλικές τάξεις***

Αν ληφθεί υπόψη ο κρυσταλλογραφικός περιορισμός στο επίπεδο και στον χώρο αντίστοιχα, αποδεικνύεται ότι υπάρχουν 10 διαφορετικοί συνδυασμοί στοιχείων συμμετρίας στο επίπεδο και 32 στον χώρο. Κάθε μία από τις 10 ή τις 32 αυτές ομάδες καλείται ομάδα συμμετρίας σημείου (point group). Μία ομάδα συμμετρίας σημείου είναι μία ομάδα ισοδύναμων σημείων που παράγονται από εφαρμογή διεργασιών συμμετρίας πάνω σε ένα γενικό σημείο, δηλαδή κάποιο σημείο που δεν βρίσκεται απαραίτητα πάνω σε άξονες αναφοράς. Πρόκειται για συμμετρία σημείου γιατί τα στοιχεία συμμετρίας, που ορίζονται αναφορικά με ένα σύστημα συντεταγμένων, διέρχονται από την αρχή των αξόνων, ένα σημείο που παραμένει σταθερό. Η μελέτη των κρυστάλλων με βάση τα στοιχεία συμμετρίας αναφέρεται σε διεργασίες συμμετρίας κατά τις οποίες ένα σημείο στο επίπεδο ή στον χώρο παραμένει σταθερό. Σε ένα πρώτο στάδιο περιγραφής, η συμμετρία των κρυστάλλων προσδιορίζεται εξωτερικά από την συμμετρία σημείου. Κάθε ομάδα συμμετρίας σημείου στο επίπεδο ή στον χώρο, αντιστοιχεί σε μία κρυσταλλική τάξη. Κάθε κρυσταλλική τάξη διαθέτει μια συγκεκριμένη συμμετρία ομάδας σημείου. Δεν υπάρχουν γνωστοί κρύσταλλοι που να μην ανήκουν σε μία από τις 10 ή 32 κρυσταλλικές τάξεις (αν πρόκειται για κρύσταλλο δύο ή τριών διαστάσεων αντίστοιχα). Υπενθυμίζουμε ότι, το σχήμα ενός κρυστάλλου δεν εξαρτάται μόνο από την συμμετρία του και έτσι με τον όρο κρυσταλλική τάξη δεν δηλώνεται ένα συγκεκριμένο κρυσταλλικό σχήμα αλλά μία ομάδα στοιχείων συμμετρίας, η οποία χαρακτηρίζει πολλές κρυσταλλικές μορφές [3,κεφ 2<sup>ο</sup>].

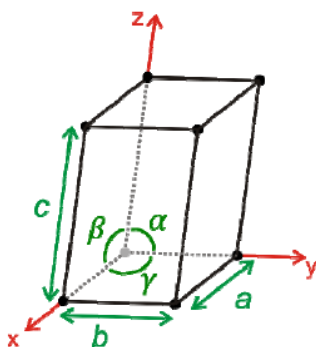
### ***3.3 Κρυσταλλικά συστήματα και Κρυσταλλογραφικοί άξονες***

Για την περιγραφή των ομάδων σημείου (κρυσταλλικών τάξεων), χρησιμοποιούνται συγκεκριμένα συστήματα αξόνων αναφοράς x,y,z (όχι υποχρεωτικά αμοιβαία ορθογώνιων με συγκεκριμένους λόγους ή σχέσεις μεταξύ των μοναδιαίων διαστάσεων a,b,c). Οι γωνίες μεταξύ των αξόνων καθώς και τα μοναδιαία διανύσματα αποτελούν τις παραμέτρους του κρυσταλλικού πλέγματος (*Εικόνα 3.4.1*). Κάθε αξονικό σύστημα είναι κατάλληλο για την συμμετρία ορισμένων από τις ομάδες

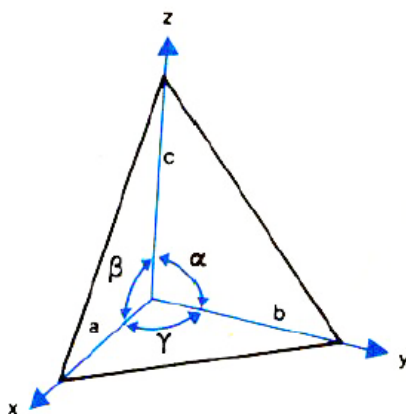


σημείου. Οι 10 κρυσταλλικές τάξεις του επιπέδου απαιτούν 3 συστήματα αξόνων, ενώ οι 32 κρυσταλλικές τάξεις του χώρου απαιτούν συνολικά 6 (Εικόνες 3.4.2 έως 3.4.8). Κάθε ένα σύστημα αξόνων ονομάζεται κρυσταλλικό σύστημα. Οι άξονες σε κάθε κρυσταλλικό σύστημα ονομάζονται κρυσταλλογραφικοί άξονες. Ειδικότερα, για τον προσδιορισμό των κρυσταλλικών συστημάτων χρησιμοποιούνται δεξιόστροφα συστήματα τριών ή και τεσσάρων αξόνων, με τα οποία καθορίζονται διευθύνσεις και μήκη σε έναν κρύσταλλο. Ανάλογα με την ισχύουσα συμμετρία σημείου, οι διευθύνσεις μπορεί να είναι κάθετες ή όχι, μεταξύ τους, ενώ τα μοναδιαία διανύσματα πάνω σε κάθε άξονα μπορεί να είναι ή να μην είναι ίσα σε μήκος. Κάθε κρυσταλλικό σύστημα είναι ουσιαστικά ένα διαφορετικό σύστημα κρυσταλλογραφικών αξόνων.

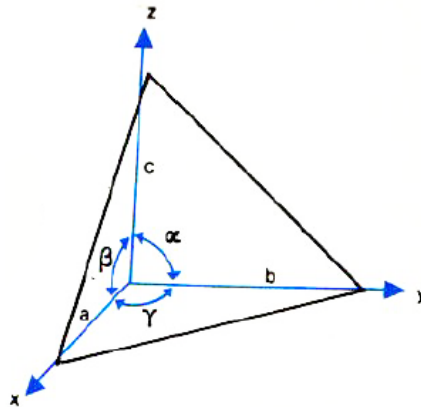
Στο σημείο αυτό, είναι σκόπιμο να πούμε ότι οι κρύσταλλοι με εξαγωνική συμμετρία και οι κρύσταλλοι με τριγωνική συμμετρία μελετώνται στα πλαίσια του ίδιου κρυσταλλικού συστήματος, δηλαδή με τους ίδιους κρυσταλλογραφικούς άξονες. Επίσης όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.4.6, στο εξαγωνικό σύστημα είναι βολικότερο να χρησιμοποιείται σύστημα τεσσάρων αξόνων με γωνίες 120° ανάμεσα στους τρεις συνεπίπεδους άξονες  $x, y, z$  [3, κεφ 2°].



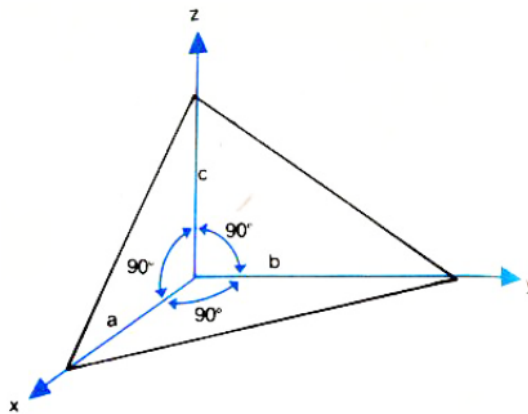
Εικόνα 3.4.1: Παράμετροι κρυσταλλικού πλέγματος



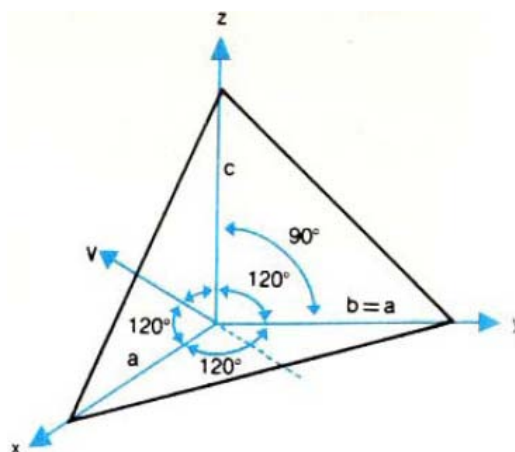
Εικόνα 3.4.2: Τρικλινές κρυσταλλικό σύστημα ( $a \neq b \neq c$  και  $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90$ )



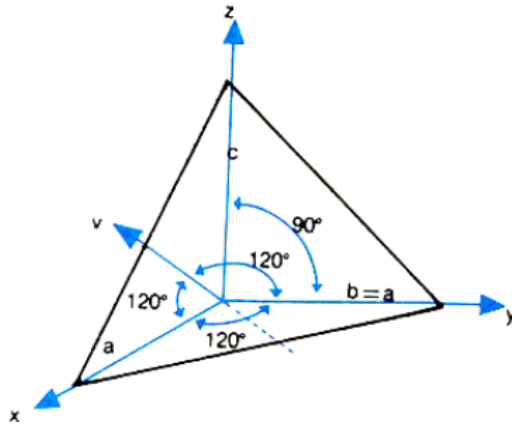
Εικόνα 3.4.3: Μονοκλινές κρυσταλλικό σύστημα ( $a \neq b \neq c$  και  $\alpha = \gamma = 90, \beta > 90$ )



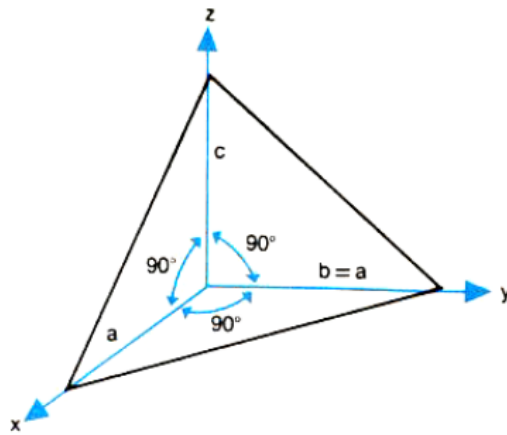
Εικόνα 3.4.4: Ορθορομβικό κρυσταλλικό σύστημα ( $a \neq b \neq c$  και  $\alpha = \beta = \gamma = 90$ )



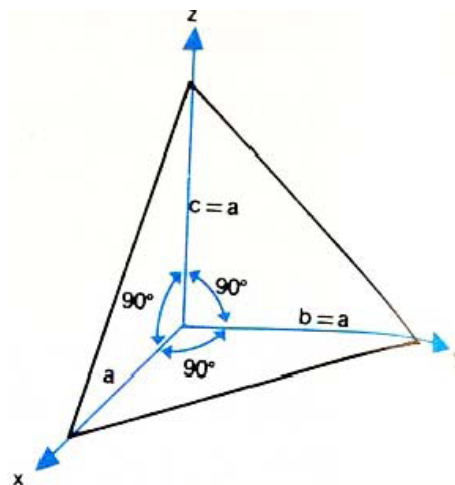
Εικόνα 3.4.5: Τριγωνικό κρυσταλλικό σύστημα ( $a = b = c$  και  $\alpha = \beta = \gamma \neq 90$ )



Εικόνα 3.4.6: Εξαγωνικό κρυσταλλικό σύστημα ( $a = b \neq c$  και  $\alpha = \beta = 90, \gamma = 120$ )



Εικόνα 3.4.7: Τετραγωνικό κρυσταλλικό σύστημα ( $a = b \neq c$  και  $\alpha = \beta = \gamma = 90$ )



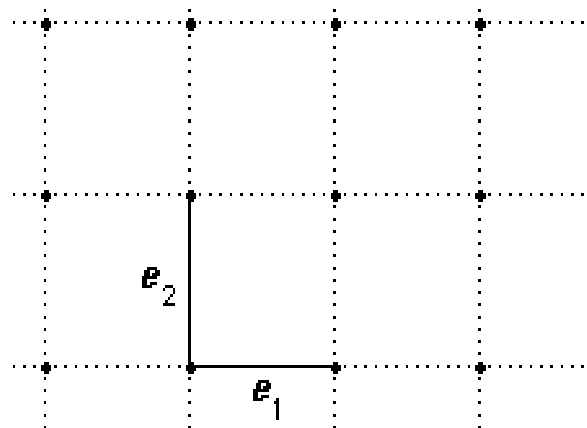
Εικόνα 3.4.8: Κυβικό κρυσταλλικό σύστημα ( $a = b = c$  και  $\alpha = \beta = \gamma = 90$ )

### 3.4 Πλέγματα και Πλέγματα Bravais

**Ορισμός 3.4.1 (πλέγμα):** Πλέγμα  $L$  σε έναν πραγματικό διανυσματικό χώρο  $V$  είναι το σύνολο των ακέραιων γραμμικών συνδυασμών κάποιας βάσης του  $V$  [10, κεφ11<sup>ο</sup>].

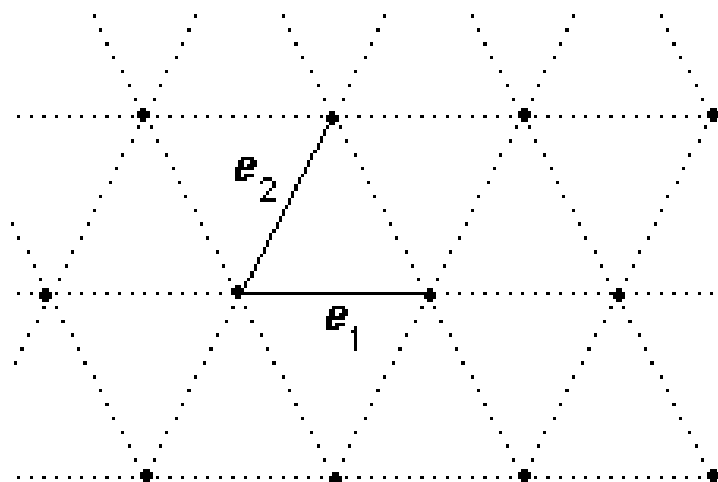
Παραδείγματα πλεγμάτων στο επίπεδο και στον χώρο:

1. Θεωρώντας την βάση  $e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ ,  $e_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$  του  $\mathbb{R}^2$ , λαμβάνουμε το τετραγωνικό πλέγμα με γεννήτορες  $\{e_1, e_2\}$  (Εικόνα 2.8.1.1).



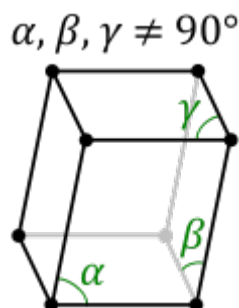
Εικόνα 2.8.1.1: Επίπεδο τετραγωνικό πλέγμα

2. Θεωρώντας την βάση  $e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ ,  $e_2 = \begin{bmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}$  του  $\mathbb{R}^2$ , λαμβάνουμε το εξαγωνικό πλέγμα με γεννήτορες  $\{e_1, e_2\}$  (Εικόνα 2.8.1.2).



Εικόνα 2.8.1.2: Επίπεδο εξαγωνικό πλέγμα

3. Θεωρώντας την βάση  $\{v_1, v_2, v_3\}$  του  $\mathbb{R}^3$ , με  $v_1 \neq v_2 \neq v_3$  και για τις μεταξύ τους γωνίες να ισχύει  $\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ , λαμβάνουμε το τρικλινές πλέγμα με γεννήτορες  $\{v_1, v_2, v_3\}$  (Εικόνα 2.8.1.3).



Εικόνα 2.8.1.3: Χωρικό, τρικλινές πλέγμα

**Ορισμός 3.4.2 (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)  $\cup_{x \in L} x + D = V$
- (ii) Για  $x \neq y$  στο πλέγμα  $L$ , η τομή  $(x + D) \cap (y + D)$  περιέχεται στο σύνορο του  $(x + D)$ .

**Ερμηνεία ορισμού:**

- (i) Όλες οι μεταφορές της κλειστής περιοχής  $D$  κατά  $x$ , όπου  $x \in L$  καλύπτουν ολόκληρο τον διανυσματικό χώρο  $V$ .
- (ii) Δύο διαφορετικές μεταφορές της κλειστής περιοχής  $D$ , κατά  $x$  και κατά  $y$  ( $x \neq y$ ), έχουν ως μοναδικά κοινά σημεία τα σημεία των συνόρων τους [10, κεφ 11<sup>ο</sup>].

Η ταξινόμηση των κρυστάλλων (επίπεδων ή χωρικών) σε τάξεις με βάση τις ομάδες συμμετρίας σημείου δεν περιγράφει πλήρως την εσωτερική δομή των κρυστάλλων, γιατί με τον τρόπο αυτό δεν προσδιορίζονται οι θέσεις των δομικών μονάδων στο εσωτερικό του κρυστάλλου. Η εμβάθυνση στην κρυσταλλική δομή απαιτεί τη γνώση του τρόπου με τον οποίο οι δομικές μονάδες διατάσσονται στο επίπεδο ή στον χώρο. Για τον λόγο αυτό, εισάγεται στην κρυσταλλογραφία, η έννοια του χωροπλέγματος ή απλά πλέγματος και ορίζεται ότι η δομή των κρυστάλλων μπορεί να περιγραφεί ως συνάρτηση ενός δισδιάστατου ή τρισδιάστατου δικτύου σημείων του πλέγματος, σε

κάθε σημείου του οποίου (πλεγματικό σημείο) αντιστοιχεί μία ομάδα δομικών μονάδων. Γεωμετρικά, το πλέγμα είναι μία κανονική, επαναλαμβανόμενη επ'άπειρον, διάταξη σημείων. Το περιβάλλον κάθε διακεκριμένου σημείου είναι το ίδιο με αυτό κάθε άλλου σημείου του πλέγματος. Το πλέγμα είναι μία μαθηματική κατασκευή και η κρυσταλλική δομή οικοδομείται μόνον όταν η ίδια ομάδα ατόμων, που ονομάζεται βάση, τοποθετείται σε κάθε πλεγματικό σημείο, ώστε:

$$\text{ΠΛΕΓΜΑ} + \text{ΒΑΣΗ} = \text{ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗ ΔΟΜΗ}$$

Τα πλεγματικά σημεία είναι απειροστά σημεία στο χώρο και δεν πρέπει να συγχέονται με τις δομικές μονάδες, οι οποίες είναι φυσικές οντότητες. Τα πλεγματικά σημεία δεν συμπίπτουν απαραίτητα με πυρήνες ατόμων. Ένα πλέγμα καθορίζεται από τις αποστάσεις μεταξύ των σημείων του σε διαφορετικές κατευθύνσεις. Μπορεί να παραχθεί μεταφέροντας επαναληπτικά ένα σημείο με κατάλληλα μοναδιαία διανύσματα συστήματος αξόνων αναφοράς, δηλαδή με μία διαδικασία συμμετρικής μεταφοράς, η οποία διασφαλίζει την ύπαρξη μεταφορικής συμμετρίας. Ο τύπος του πλέγματος καθορίζεται από την γεωμετρική σχέση μεταξύ των μοναδιαίων διανυσμάτων.

Τέλος, το θεμελιωδέστερο χαρακτηριστικό των κρυστάλλων, που προκύπτει από τον ορισμό της κρυσταλλικής δομής και εκφράζει την κανονικότητα ή την περιοδικότητα της, είναι η ιδιότητα της απλής μεταφορικής συμμετρίας ή ανεξαρτησίας από μεταφορά κατά μήκος των κρυσταλλογραφικών αξόνων (το περιβάλλον κάθε διακεκριμένου πλεγματικού σημείου είναι το ίδιο με εκείνο κάθε άλλου πλεγματικού σημείου). Από την άποψη της συμμετρίας, οι δυνατοί τρόποι περιοδικής επανάληψης σημείων με την ιδιότητα της ανεξαρτησίας από μεταφορά είναι περιορισμένοι. Ο αριθμός των διαφορετικών γεωμετρικών πλεγμάτων εξαρτάται από το αν το σύστημα αναφοράς που μελετάμε έχει μία, δύο ή τρεις διαστάσεις. Υπάρχει μόνο ένα μονοδιάστατο πλέγμα (γραμμή σημείων), πέντε διαφορετικά επίπεδα πλέγματα και δεκατέσσερα χωροπλέγματα καθένα από τα οποία παρουσιάζει διαφορετική συμμετρία, γνωστά και ως πλέγματα Bravais. Τα έξι (ή επτά) συστήματα αξόνων, δηλαδή τα κρυσταλλικά συστήματα που φαίνονται στις Εικόνες 3.4.2 έως και 3.4.8, προκύπτουν από την μελέτη των δυνατών μακροσυμμετριών σημείου των κρυστάλλων, συμμετριών στις οποίες δεν λαμβάνονται υπόψη πλεγματικές μεταφορές. Οι συμμετρίες από μεταφορά εφαρμόζονται μόνο στα πλέγματα και τις κρυσταλλικές δομές και γι'αυτό ονομάζονται μικροσυμμετρίες. Περνώντας από τη συμμετρία των κρυστάλλων στη συμμετρία των πλεγμάτων, πρέπει να επισημανθεί

αρχικά ότι κάθε κρυσταλλικό σύστημα συνδέεται με ένα διακεκριμένο θεμελιώδες πλέγμα, που παρουσιάζει σε κάθε σημείο του την αντίστοιχη, μέγιστη συμβατή με το σύστημα συμμετρία σημείου [3, κεφ 2<sup>ο</sup>].

### **3.4.1 Θεμελιώδη διανύσματα μεταφοράς**

Η μετάθεση μεταξύ δύο ισοδύναμων σημείων του χώρου σε ένα πλέγμα τριών διαστάσεων μπορεί να αναπαρασταθεί με ένα διάνυσμα μεταφοράς  $T$ , το οποίο είναι συνάρτηση τριών μοναδιαίων διανυσμάτων  $a, b, c$ :

$$T = n_1 a + n_2 b + n_3 c,$$

όπου  $n_i$  είναι ακέραιοι αριθμοί. Τα μοναδιαία διανύσματα μεταφοράς επιλέγονται έτσι, ώστε τα  $a, b$  να μην είναι συγγραμμικά και το  $c$  να μην είναι ομοεπίπεδο με το επίπεδο που βρίσκονται τα  $a, b$ . Τα διανύσματα αυτά έχουν κοινή (αυθαίρετη) αρχή και αποτελούν τους κρυσταλλογραφικούς άξονες αναφοράς.

Η απαίτηση της ανεξαρτησίας από μεταφορά στο πλέγμα (ή στον κρύσταλλο) καθορίζει ότι το σημείο  $r'$ , που προκύπτει από τη μεταφορά  $T$  του σημείου  $r$ :

$$r' = r + T = r + n_1 a + n_2 b + n_3 c$$

(όπου τα  $r', r$  μετρούνται ως προς αυθαίρετη αρχή)

Πρέπει να είναι ισοδύναμο (ταυτόσημο) από κάθε άποψη (να έχει το ίδιο περιβάλλον) με το σημείο  $r$ , για κάθε αυθαίρετη εκλογή των  $n_i$ . Αν δεν συμβαίνει αυτό, τα διανύσματα  $a, b, c$  δεν είναι διανύσματα μεταφοράς του πλέγματος.

Τα διανύσματα μεταφοράς είναι θεμελιώδη (όπως και οι αντίστοιχοι άξονες αναφοράς), αν κάθε ταυτόσημο σημείο του κρυστάλλου μπορεί να προκύψει με την εφαρμογή της μεταφοράς  $T$ , με κατάλληλη εκλογή ακεραίων  $n_i$ . Όταν η αρχή των θεμελιωδών διανυσμάτων μεταφοράς συμπίπτει με πλεγματοειδές σημείο, οποιοδήποτε σημείο του πλέγματος μπορεί να παραχθεί από το τέλος ενός διανύσματος μεταφοράς. Με άλλα λόγια, τα διανύσματα μεταφοράς  $a, b, c$  αλλά και το πλέγμα που παράγουν, θεωρούνται θεμελιώδη, αν δύο οποιαδήποτε πλεγματοειδή σημεία  $r', r$  ικανοποιούν την παραπάνω σχέση με κατάλληλη εκλογή των συντεταγμένων  $n_i$ . Όπως αναπτύξαμε παραπάνω για τους κρυσταλλογραφικούς άξονες, οι περιορισμοί στα μήκη των αξόνων και τις γωνίες εισάγουν συγκεκριμένες συμμετρίες σε κάθε πλέγμα.

Η επιλογή θεμελιωδών διανύσματα σε ένα πλέγμα δεν είναι μοναδική, αλλά συνήθως επιλέγονται ως θεμελιώδη τα μικρότερα διανύσματα μεταφοράς. Επίσης, τα διανύσματα μεταφοράς ή ισοδύναμα οι άξονες αναφοράς που εκλέγονται για την μελέτη ενός πλέγματος κρυστάλλου δεν είναι αναγκαστικά θεμελιώδεις. Έτσι, π.χ.

ορισμένα πλέγματα με μη ορθογώνιους, θεμελιώδεις άξονες αναφοράς, περιγράφονται συνήθως με μη θεμελιώδεις άξονες αναφοράς, λόγω υπολογιστικών πλεονεκτημάτων (βλ. κεντρωμένα πλέγματα) [3,κεφ 2<sup>ο</sup>],[13].

### **3.4.2 Μοναδιαία κυψελίδα**

Η ένωση των πλεγματικών σημείων με ευθείες γραμμές σε τρεις διαστάσεις διαιρεί τον χώρο σε παραλληλεπίπεδα. Η διαδοχική μετάθεση των παραλληλεπιπέδων από το ένα πλεγματικό σημείο στο άλλο, παράγει τον όγκο που εγγράφεται στο τρισδιάστατο πλέγμα. Ένα παραλληλεπίπεδο το οποίο, όταν μεταφέρεται παράλληλα στον εαυτό του, μέσω του διανύσματος μεταφοράς, πληρώνει τον χώρο, παράγοντας το πλέγμα, ονομάζεται *μοναδιαία κυψελίδα* (unit cell). Η μοναδιαία κυψελίδα ορίζεται με βάση ένα δεξιόστροφο σύστημα συντεταγμένων με άξονες παράλληλους στα διανύσματα μεταφοράς  $a, b, c$  του πλέγματος.

Η αρχή της κυψελίδας μπορεί να επιλεγεί αυθαίρετα οπουδήποτε στον χώρο του πλέγματος, συνεπώς μπορεί να συμπίπτει ή όχι με κάποιο πλεγματικό σημείο. Όταν περιέχει μόνο ένα πλεγματικό σημείο, η μοναδιαία κυψελίδα λέγεται *θεμελιώδης* (primitive unit cell), όπως και τα διανύσματα μεταφοράς που την καθορίζουν. Η θεμελιώδης κυψελίδα δεν είναι μοναδική, παρότι όλες οι θεμελιώδεις κυψελίδες έχουν τον ίδιο όγκο  $a \cdot (b \times c)$ . Έτσι, υπάρχει ένας άπειρος αριθμός από θεμελιώδεις και μη, μοναδιαίες κυψελίδες, που μπορούν να επιλεγούν για την περιγραφή ενός πλέγματος.

Η θεμελιώδης κυψελίδα είναι ο μικρότερος όγκος, που παράγει με επανάληψη ην κρυσταλλική δομή ή αλλιώς, που αποδίδει την πλήρη συμμετρία της κρυσταλλικής δομής. Η γνώση της διάταξης των ατόμων στην μοναδιαία κυψελίδα καθορίζει την ατομική διάταξη σε ολόκληρο τον κρύσταλλο. Ό,τι ισχύει για μία μοναδιαία κυψελίδα (συμμετρία, διάταξη ατόμων κλπ.) ισχύει ακριβώς για οποιαδήποτε άλλη κυψελίδα του υπό μελέτη κρυστάλλου.

Στις δύο διαστάσεις η μοναδιαία κυψελίδα εκφυλίζεται σε παραλληλόγραμμο [3,κεφ 2<sup>ο</sup>].

### **3.4.3 Κέντρωση επίπεδου πλέγματος**

Στο πλαίσιο ενός κρυσταλλικού συστήματος, υπάρχει δυνατότητα επιλογής νέων, μη θεμελιωδών τύπων πλεγμάτων που διατηρούν τη συμμετρία σημείου του συγκεκριμένου συστήματος. Τα πλέγματα αυτά προκύπτουν με μία διαδικασία που ονομάζεται *κέντρωση* (centering) και η οποία εισάγει πλεγματικά σημεία στις θέσεις



υψηλής συμμετρίας ενός θεμελιώδους πλέγματος. Τα κεντρωμένα πλέγματα δεν παραβιάζουν την συμμετρία του κρυσταλλικού συστήματος, αλλά τα μοναδιαία διανύσματα μεταφοράς με τα οποία περιγράφονται δεν είναι πλέον θεμελιώδη, εφόσον υπάρχουν επιπρόσθετα πλεγματικά σημεία σε σχέση με εκείνα του θεμελιώδους πλέγματος από το οποίο προέκυψαν. Τα νέα πλέγματα που προκύπτουν από την κέντρωση, έχουν τη ίδια συμμετρία σημείου με το θεμελιώδες πλέγμα του συστήματος, αλλά διαφορετική συμμετρία επιπέδου [3,κεφ 2<sup>ο</sup>],[13].

#### **3.4.4 Κέντρωση χωροπλέγματος**

Κάθε κρυσταλλικό σύστημα ή θεμελιώδες πλέγμα περιγράφεται με μία μοναδιαία κυψελίδα. Καθένα από τα μη θεμελιώδη πλέγματα ενός κρυσταλλικού συστήματος περιγράφεται με μία συμβατική ή τυπική κεντρωμένη κυψελίδα διαφορετική της θεμελιώδους. Ορίζονται τρεις τύποι κεντρωμένων πλεγμάτων στον χώρο, ανάλογα με την θέση των επιπλέον πλεγματικών σημείων:

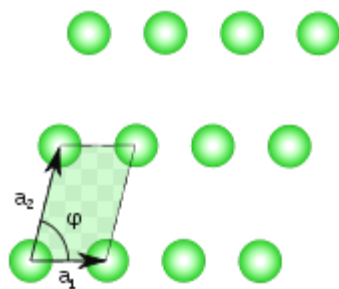
**Εδροκεντρωμένο πλέγμα** (Face centered, F): η αντίστοιχη κυψελίδα απεικονίζεται με πλεγματικά σημεία στις κορυφές και όλα τα κέντρα των εδρών.

**Χωροκεντρωμένο πλέγμα** (Body centered, I): η αντίστοιχη μοναδιαία κυψελίδα απεικονίζεται με πλεγματικά σημεία στις κορυφές και στο κέντρο της.

**Πλευροκεντρωμένο πλέγμα** (Side centered, C): η αντίστοιχη μοναδιαία κυψελίδα απεικονίζεται με πλεγματικά σημεία στις κορυφές και στα κέντρα δύο απέναντι εδρών [3,κεφ 2<sup>ο</sup>].

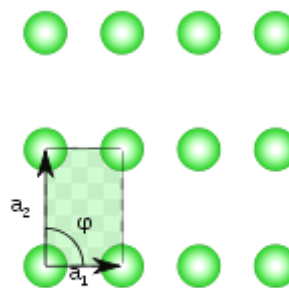
#### **3.4.5 Επίπεδα πλέγματα Bravais**

Στις δύο διαστάσεις υπάρχουν πέντε πλέγματα Bravais, εκ των οποίων το ένα είναι κεντρωμένο. Συγκεκριμένα είναι το πλάγιο, το θεμελιώδες ορθογώνιο, το κεντρωμένο ορθογώνιο, το εξαγωνικό και το τετραγωνικό (Εικόνες 3.5.5.1 έως και 3.5.5.5).



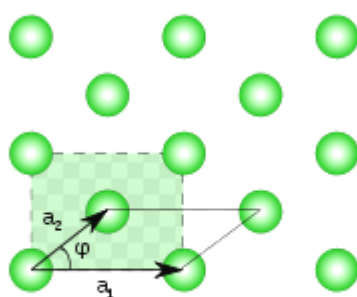
$$|a_1| \neq |a_2|, \varphi \neq 90^\circ$$

Εικόνα 3.5.5.1: Πλάγιο



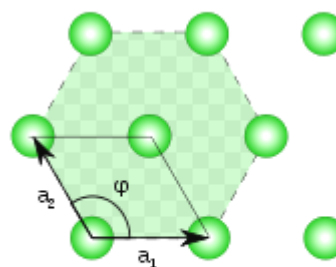
$$|a_1| \neq |a_2|, \varphi = 90^\circ$$

Εικόνα 3.5.5.2: Θεμελιώδεις ορθογώνιο



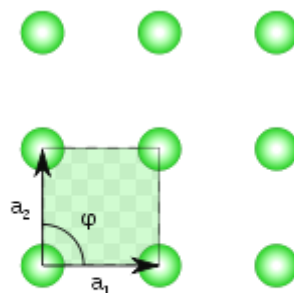
$$|a_1| \neq |a_2|, \varphi \neq 90^\circ$$

Εικόνα 3.5.5.3: Κεντρωμένο ορθογώνιο



$$|a_1| = |a_2|, \varphi = 120^\circ$$

Εικόνα 3.5.5.4: Εξαγωνικό



$$|a_1| = |a_2|, \varphi = 90^\circ$$

Εικόνα 3.5.5.5: Τετραγωνικό

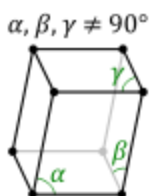
### 3.4.6 Χωροπλέγματα Bravais

Για καθένα από τα κεντρωμένα χωροπλέγματα είναι πάντα δυνατόν να επιλεγεί μία θεμελιώδης κυψελίδα και όχι η συμβατική κεντρωμένη, που χρησιμοποιείται. Οι θεμελιώδεις κυψελίδες των κεντρωμένων πλεγμάτων όμως, παρόλο που είναι κανονικά αποδεκτές, δεν δείχνουν την πλήρη συμμετρία του κρυσταλλικού

συστήματος (π.χ. η επιλογή θεμελιώδους τύπου κυψελίδας σε εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα παρουσιάζει ρομβοεδρική συμμετρία). Έτσι, για την περιγραφή των κεντρωμένων πλεγμάτων, χρησιμοποιούνται συνήθως οι συμβατικές κυψελίδες που περιέχουν περισσότερα από ένα πλεγμικά σημεία, καθώς η χρήση τους είναι σύμφωνη με την πλήρη συμμετρία του εκάστοτε κρυσταλλικού συστήματος.

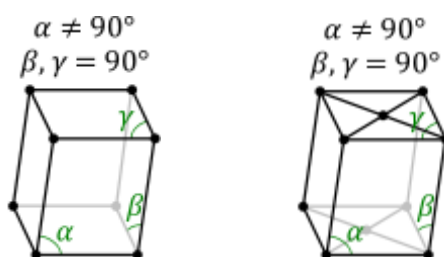
Τα θεμελιώδη πλέγματα Bravais που αντιστοιχούν στα έξι συστήματα κρυσταλλογραφικών αξόνων είναι έξι. Κεντρώνοντας τα πλέγματα αυτά προκύπτουν οκτώ νέα πλέγματα. Τα επτά από αυτά είναι εδροκεντρωμένα, πλευροκεντρωμένα ή χωροκεντρωμένα, ενώ το όγδοο είναι ένα ειδικά κεντρωμένο εξαγωνικό πλέγμα που περιγράφεται με μία θεμελιώδη ρομβοεδρική κυψελίδα [3,κεφ 2<sup>ο</sup>],[13].

### Τρικλινές κρυσταλλικό σύστημα



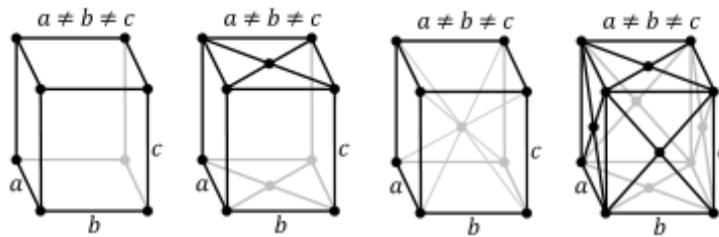
Εικόνα 3.5.6.1: Θεμελιώδες πλέγμα

### Μονοκλινές κρυσταλλικό σύστημα



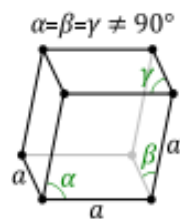
Εικόνα 3.5.6.2: Από αριστερά προς τα δεξιά, το θεμελιώδες το πλευροκεντρωμένο πλέγμα αντίστοιχα

Ορθορομβικό κρυσταλλικό σύστημα



Εικόνα 3.5.6.3: Από αριστερά προς τα δεξιά, το θεμελιώδες, το πλευροκεντρωμένο, το χωροκεντρωμένο και το εδροκεντρωμένο πλέγμα

Τριγωνικό ή Ρομβοεδρικό κρυσταλλικό σύστημα



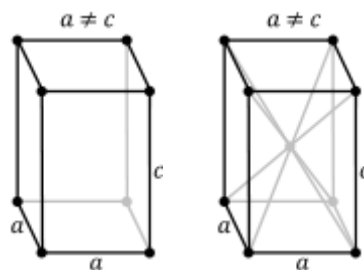
Εικόνα 3.5.6.4: Θεμελιώδες πλέγμα

Εξαγωνικό κρυσταλλικό σύστημα



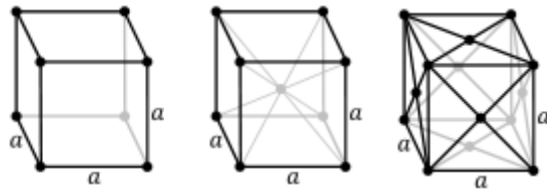
Εικόνα 3.5.6.5: Ρομβοεδρικό πλέγμα

Τετραγωνικό κρυσταλλικό σύστημα



Εικόνα 3.5.6.6: Από αριστερά προς τα δεξιά το θεμελιώδες και το χωροκεντρωμένο πλέγμα

Κυβικό κρυσταλλικό σύστημα



Εικόνα 3.5.6.7: Από αριστερά προς τα δεξιά το θεμελιώδες, το χωροκεντρωμένο και το εδροκεντρωμένο πλέγμα

# 4

## *Κρύσταλλοι στο Επίπεδο*

### *4.1 Εισαγωγή*

Το κεφάλαιο αυτό στοχεύει στην κατανόηση του τρόπου με τον οποίο παράγονται οι ομάδες σημείου στο επίπεδο, μέσω της Θεωρίας Ομάδων. Σε αυτό συνεισφέρουν τα θεωρήματα και τα πορίσματα του κεφαλαίου 2, καθώς επίσης και τα συμπεράσματα που προκύπτουν από τον κρυσταλλογραφικό περιορισμό (βλ. παράγραφο 3.1).

### *4.2 Η μαθηματική μοντελοποίηση*

**Ορισμός 4.2.1 (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.

Στη συνέχεια θα μελετήσουμε την ομάδα συμμετριών ενός δισδιάστατου κρυστάλλου. Η ομάδα συμμετριών ενός κρυσταλλικού πλέγματος σε έναν σύνδεσμο  $L$  περιλαμβάνει το λιγότερο  $L$  μεταφορές [10, κεφ11<sup>ο</sup>]. Κάνουμε την εξής παραδοχή:

**Παραδοχή:**  $L$  είναι η ομάδα μεταφορών του κρυστάλλου.

Η παραπάνω παραδοχή έχει ως συνέπεια ότι ένας κρύσταλλος δεν έχει συμμετρίες μεταφορών εκτός του συνδέσμου  $L$ .

Στόχος μας είναι να φτάσουμε στον μαθηματικό ορισμό της ομάδας σημείων ενός δισδιάστατου κρυστάλλου. Στο σημείο αυτό χρησιμοποιούμε κάποια χρήσιμα συμπεράσματα από τις προηγούμενες παραγράφους.

Έστω  $V$  πραγματικός διανυσματικός χώρος. Η ομάδα συμμετριών  $G$  ενός κρυστάλλου είναι υποομάδα των ισομετριών  $Isom(V)$  του διανυσματικού χώρου  $V$ . Επίσης 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  $G$ . [10, κεφ11<sup>ο</sup>] Τέλος, η ομάδα πηλίκο είναι ισομορφική με την εικόνα της  $G$ , συνεπώς λαμβάνουμε:

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

**Ορισμός 4.2.2 (ομάδα συμμετρίας σημείου):** Ομάδα συμμετρίας σημείου ή ομάδα σημείου (point group)  $G^0$  ενός κρυστάλλου είναι η ομάδα  $G/L$ .

**Λήμμα 4.2.3:** Το πλέγμα  $L$  είναι αναλλοίωτο υπό την ομάδα σημείων  $G^0$ .

**Απόδειξη:** Από τον ορισμό του  $G^0$ , υπάρχει  $h \in V$  τέτοιο ώστε  $\tau_h A \in G$ . Είναι:

$$\tau_h A \tau_h (\tau_h A)^{-1} = \tau_h \tau_{Ax} \tau_{-h} = \tau_{Ax} \in G.$$

**Πρόταση 4.2.4:** Κάθε μη τετριμμένη στροφή στην ομάδα  $G^0$  είναι τάξης 2, 3, 4 ή 6.

**Απόδειξη:** Προκύπτει άμεσα από τον κρυσταλλογραφικό περιορισμό.

**Συμπεράσματα:**

- (i) Η ομάδα σημείων ενός δισδιάστατου κρυστάλλου είναι μία από τις ακόλουθες ομάδες:  $\mathbb{Z}_n$  ή  $D_n$  για  $n=1,2,3,4,6$
- (ii) Στοιχεία άπειρης τάξης σε ένα δισδιάστατο πλέγμα είναι ή μεταφορές ή ολισθαίνουσες ανακλάσεις.
- (iii) Ένα στοιχείο άπειρης τάξης είναι μία μεταφορά αν και μόνο αν αντιμετωπίζεται με το τετράγωνο κάθε στοιχείου άπειρης τάξης.

**Πόρισμα 4.2.5:** Έστω  $L$  ένα δισδιάστατο πλέγμα. Έστω επίσης  $\alpha$  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  $b \notin L \setminus \mathbb{R}a$ . Τότε το σύνολο  $\{a, b\}$  είναι μία βάση του  $L$ . Επίσης το  $L$  είναι ο ακέραιος γραμμικός συνδυασμός των  $\{a, b\}$ .

**Πόρισμα 4.2.6:** Θεωρούμε την ομάδα σημείων ενός δισδιάστατου κρυστάλλου που περιλαμβάνει στροφές  $R$  τάξης 3, 4 ή 6. Τότε:

- (i) Το πλέγμα είναι εξαγωνικό και παράγεται από δύο ισομήκη διανύσματα, που σχηματίζουν γωνιά  $\pi/3$ , αν η ομάδα στροφών είναι τάξης 3 ή 6.
- (ii) Το πλέγμα είναι τετραγωνικό και παράγεται από δύο κάθετα διανύσματα ισομήκη, αν η ομάδα στροφών είναι τάξης 4.

**Πόρισμα 4.2.7:** Έστω  $G_i$  ομάδες συμμετριών δισδιάστατων κρυστάλλων με πλέγματα  $L_i$  και ομάδες σημείων  $G_i^0$ , για  $i = 1, 2$ . Έστω  $\varphi : G_1 \rightarrow G_2$ , ισομορφισμός ομάδων. Τότε:

- (i)  $\varphi(L_1) = L_2$
- (ii) Υπάρχει  $\Phi \in GL(\mathbb{R}^2)$  τέτοια ώστε  $\varphi(\tau_x) = \tau_{\Phi(x)}$  με  $x \in L_1$ . Ο πίνακας της  $\Phi$  σε σχέση με τις βάσεις  $L_1, L_2$  έχει ακέραιες τιμές, καθώς επίσης και ο πίνακας  $\Phi^{-1}$ .



### 4.3 Κατηγοριοποίηση των ομάδων επιπέδου

**Θεώρημα 4.3.1:** Υπάρχουν 17 διαφορετικές ομάδες επιπέδου (plane groups) οι οποίες παράγονται γεωμετρικά από τις ομάδες σημείων  $\mathbb{Z}_n$  και  $D_n$  για  $n = 1, 2, 3, 4, 6$  (Πίνακας 4.3.1.1)[10, κεφ 10<sup>ο</sup>].

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

Πίνακας 4.3.1.1: Ταξινόμηση των ομάδων επιπέδου

#### **ΑΠΟΔΕΙΞΗ**

Η στρατηγική της απόδειξης είναι να μελετήσουμε καθεμία από τις ομάδες σημείου ξεχωριστά και να παράγουμε όλες τις δυνατές ομάδες επιπέδου. Όλες αυτές οι διαφορετικές ομάδες που θα βρούμε θα είναι αμοιβαία μη ισομορφικές. Για όλη την απόδειξη θα συμβολίζουμε με  $G$  την ομάδα επιπέδου, με  $G^0$  τις ομάδες σημείων και με  $L$  το αντίστοιχο πλέγμα.

#### **Ομάδα σημείου $\mathbb{Z}_1$**

Ο κρύσταλλος ονομάζεται τύπου  $p1$ . Στο πλέγμα υπάρχει μόνο η ιδιότητα της μεταφοράς. Δεν υπάρχουν ανακλάσεις, ολισθαίνουσες ανακλάσεις και στροφές. Πρόκειται για τετριμμένη περίπτωση (Εικόνα 4.3.1.1).

### **Ομάδα σημείου $D_1$**

Η ομάδα σημείων δημιουργείται από μία απλή ανάκλαση  $\sigma$  σε έναν άξονα  $A$  που περνάει από την αρχή των αξόνων. Έστω  $B$  ένας άλλος άξονας κάθετος στον  $A$ . Άς είναι  $v$  ένα διάνυσμα στο  $L$  τέτοιο ώστε  $v \notin A \cup B$ . Τότε ισχύουν τα εξής:

$v + \sigma(v) \in L \cap A$  και  $v - \sigma(v) \in L \cap B$ . Έστω  $L_0$  το πλέγμα που δημιουργείται από το σύνολο  $L \cap (A \cup B)$ .

#### Διακρίνουμε τις περιπτώσεις:

(a)  $L = L_0$ . Σε αυτή την περίπτωση το πλέγμα παράγεται από ορθογώνια διανύσματα  $\alpha, b$  τέτοια ώστε:  $\alpha \in A$  και  $b \in B$ .

(a)(i) Αν  $\sigma \in G$ , τότε το  $G$  είναι το ημιευθύ γινόμενο των  $D_1$  και  $L$ . Αυτή η ομάδα λέγεται  $D_{1m}$  ή  $pm$  (Εικόνα 4.3.1.2).

(a)(ii) Αν  $\sigma \notin G$ , τότε το  $G$  περιέχει μία ολισθαίνουσα ανάκλαση παράλληλη προς τον άξονα  $A$ . Χωρίς βλάβη της γενικότητας υποθέτουμε ότι η αρχή των αξόνων βρίσκεται στον άξονα  $A$  και  $g = \tau_{sa}\sigma$ , με  $0 < |s| \leq \frac{1}{2}$ . Επειδή  $g^2 = \tau_{2sa} \in G$ , θα είναι  $|s| = \frac{1}{2}$ . Το  $G$  παράγεται από το  $L$  και από την ολισθαίνουσα ανάκλαση  $\tau_{\alpha/2}\sigma$ . Η ομάδα αυτή λέγεται  $D_{1m}$  ή  $pg$  (Εικόνα 4.3.1.3).

(b)  $L \neq L_0$ . Έστω  $u$  ένα διάνυσμα με  $u \in L \setminus L_0$ . Χωρίς βλάβη της γενικότητας υποθέτουμε ότι μεταξύ του  $u$  και των γεννητόρων  $a, b$  του  $L_0$  υπάρχει οξεία γωνία. Έστω  $v = \sigma(u)$ . Το  $G$  περιλαμβάνει μία ολισθαίνουσα ανάκλαση και χωρίς βλάβη της γενικότητας υποθέτουμε ότι είναι  $\tau_{\alpha/2}\sigma = \tau_{(u+v)/2}\sigma$ . Επίσης το  $G$  περιέχει και την ανάκλαση  $\tau_{-v}\tau_{(\frac{1}{2})(u+v)}\sigma = \tau_{(\frac{1}{2})(u-v)}\sigma$ . Το  $G$  είναι το ημιευθύ γινόμενο των  $L$  και  $D_1$ . Η ομάδα αυτή λέγεται  $D_{1c}$  ή  $cm$  (Εικόνα 4.3.1.4).

### **Ομάδα σημείων $\mathbb{Z}_2$**

Η ομάδα σημείων δημιουργείται μόνο από στροφές κατά  $180^\circ$ . Δεν υπάρχουν ανακλάσεις και ολισθαίνουσες ανακλάσεις. Έστω  $-E \in G$  στροφή κατά  $180^\circ$ . Τότε θα ισχύει  $\tau_h(-E) \in G$ , όπου  $\tau_h(-E)$  είναι επίσης στροφή κατά  $180^\circ$  γύρω από ένα σημείο του  $L$ . Το  $G$  είναι το ημιευθύ γινόμενο των  $L$  και  $\mathbb{Z}_2$ . Η ομάδα αυτή λέγεται  $\mathbb{Z}_2$  ή  $p_2$  (Εικόνα 4.3.1.5).

### **Ομάδα σημείων $D_2$**

Σε αυτή την περίπτωση η ομάδα επιπέδου  $D_2$  παράγεται από ανακλάσεις σε δύο ορθογώνιους άξονες  $A$  και  $B$ . Έστω  $L_0$  το πλέγμα που παράγεται από το σύνολο  $L \cap (A \cup B)$ .

Διακρίνουμε τις περιπτώσεις:

(α)  $L = L_0$ . Σε αυτή την περίπτωση το πλέγμα γεννάται από ορθογώνια διανύσματα  $\alpha, \beta$  τέτοια ώστε:  $\alpha \in A$  και  $\beta \in B$ .

Συμβολίζουμε με  $\alpha$  και  $\beta$  τις ανακλάσεις στους άξονες  $A$  και  $B$  αντίστοιχα.

(α)(i) Αν οι ανακλάσεις  $\alpha$  και  $\beta$  ανήκουν στο  $G$ , τότε το  $G$  είναι το ημιευθύ γινόμενο των  $L$  και  $D_2$ . Η ομάδα αυτή λέγεται  $D_{2mm}$  ή  $pm$  (Εικόνα 4.3.1.6).

(α)(ii) Αν η ανάκλαση  $\alpha$  ανήκει στο  $G$  και η ανάκλαση  $\beta$  δεν ανήκει, τότε το  $G$  παράγεται από το  $L, \alpha$  και από την ολισθαίνουσα ανάκλαση  $\tau_{\beta/2}\beta$ . Η ομάδα αυτή λέγεται  $D_{2mg}$  ή  $pmg$  (Εικόνα 4.3.1.7).

(α)(iii) Αν οι ανακλάσεις  $\alpha$  και  $\beta$  δεν ανήκουν στο  $G$ , τότε το  $G$  παράγεται από το  $L$  και από δύο ολισθαίνουσες ανακλάσεις  $\tau_{\alpha/2}\alpha$  και  $\tau_{\beta/2}\beta$ . Αυτή η ομάδα λέγεται  $D_{2gg}$  ή  $pgg$  (Εικόνα 4.3.1.8).

(β)  $L \neq L_0$ . Σε αυτή την περίπτωση αυτή το πλέγμα  $L$  παράγεται από δύο ισομήκη διανύσματα  $u$  και  $v$  τα οποία σχετίζονται με τα  $a, b$  του  $L_0$  ως εξής:  $a = u + v$  και  $b = u - v$ . Συνεπώς το  $G$  πρέπει να περιέχει ανακλάσεις στους ορθογώνιους άξονες  $A$  και  $B$ . Το  $G$  είναι το ημιευθύ γινόμενο των  $L$  και  $D_2$ . Η ομάδα επιπέδου αυτή λέγεται  $D_{2c}$  ή  $ctm$  (Εικόνα 4.3.1.9).

### **Ομάδα σημείου $\mathbb{Z}_3$**

Η ομάδα επιπέδου  $\mathbb{Z}_3$  έχει εξαγωνικό πλέγμα με γεννήτορες δύο διανύσματα ίσου μήκους, που σχηματίζουν γωνία  $\pi/3$  μεταξύ τους. Το σύνολο  $G$  περιλαμβάνει μία αφινική στροφή τάξης 3, γύρω από κάποιο σημείο του  $G$ , άρα το  $G$  είναι το ημιευθύ γινόμενο των  $L$  και  $\mathbb{Z}_3$ . Η ομάδα επιπέδου αυτή λέγεται  $\mathbb{Z}_3$  ή  $p_3$  (Εικόνα 4.3.1.10).

### **Ομάδα σημείου $D_3$**

Το πλέγμα είναι εξαγωνικό για την ομάδα επιπέδου  $D_3$ , με γεννήτορες δύο διανύσματα ίσου μήκους, που σχηματίζουν γωνία  $\pi/3$  μεταξύ τους. Η ομάδα σημείου  $G^0$  περιέχει ανακλάσεις σημείων από δύο άξονες που σχηματίζουν μεταξύ τους γωνία  $\pi/3$ . Έστω  $A$  και  $B$  δύο υπερεπίπεδα ανάκλασης. Το πλέγμα  $L$  περιέχει σημεία των υπερεπιπέδων  $A$  και  $B$ . Έστω  $L_0$  το πλέγμα που παράγεται από το σύνολο  $L \cap (A \cup B)$ .

Διακρίνουμε τις περιπτώσεις:

(α)  $L = L_0$ . Σε αυτή την περίπτωση η ομάδα  $D_3$  παράγεται από ανακλάσεις σημείων στα υπερεπίπεδα  $A$  και  $B$ , συμπεριλαμβανομένου και των έξι μικρότερων διανυσμάτων του πλέγματος. Η ομάδα επιπέδου αυτή λέγεται  $D_{3m}$  ή  $p3m1$  (Εικόνα 4.3.1.11).

(β)  $L \neq L_0$ . Εδώ, το πλέγμα  $L$  παράγεται από διανύσματα τα οποία τέμνουν τα υπερεπίπεδα ανάκλασης  $A$  και  $B$ . Η ομάδα επιπέδου αυτή λέγεται  $D_{3c}$  ή  $p31m$  (Εικόνα 4.3.1.12).

.

### **Ομάδα σημείου $\mathbb{Z}_4$**

Η ομάδα  $G$  περιέχει αφινική στροφή τάξης 4, γύρω από ένα σημείο του  $G$ . Το  $G$  είναι το ημιευθύ γινόμενο των  $L$  και  $\mathbb{Z}_4$ . Η ομάδα επιπέδου λέγεται  $\mathbb{Z}_4$  ή  $p_4$  (Εικόνα 4.3.1.13).

### **Ομάδα σημείου $D_4$**

Το πλέγμα είναι τετραγωνικό και παράγεται από δύο διανύσματα  $a$  και  $b$  ίσου μήκους και κάθετα μεταξύ τους. Η ομάδα επιπέδου  $G$  περιέχει στροφές τάξης 4. Η ομάδα σημείων  $G^0$  περιλαμβάνει ανακλάσεις στα υπερεπίπεδα  $a$ ,  $b$ ,  $a + b$ ,  $a - b$ . Επίσης η ομάδα  $G$  περιλαμβάνει και ανακλάσεις παράλληλες στα υπερεπίπεδα  $a + b$ ,  $a - b$ . Χωρίς βλάβη της γενικότητας υποθέτουμε ότι η αρχή των αξόνων είναι η τομή των υπερεπιπέδων  $a + b$ ,  $a - b$ .

Διακρίνουμε τις περιπτώσεις:

(α) Η ομάδα  $G$  περιέχει ανακλάσεις στα υπερεπίπεδα που παράγονται από τα  $a, b$ . Τότε η  $G$  είναι το ημιευθύ γινόμενο των  $L$  και  $D_4$ . Η ομάδα επιπέδου ονομάζεται  $D_{4m}$  ή  $p4m$  (Εικόνα 4.3.1.14).

(β) Η ομάδα  $G$  δεν περιέχει ανακλάσεις στα υπερεπίπεδα που παράγονται από τα  $a$  και περιλαμβάνει ολισθαίνουσες ανακλάσεις  $\tau_{\alpha/2}\sigma$ , όπου  $\sigma$  είναι οι ανακλάσεις με υπερεπίπεδο ανάκλασης που παράγεται από το  $a$ . Η συγκεκριμένη ομάδα επιπέδου ονομάζεται  $D_{4g}$  ή  $p4g$  (Εικόνα 4.3.1.15).

#### **Ομάδα σημείου $\mathbb{Z}_6$**

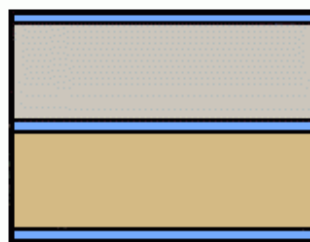
Το πλέγμα είναι εξαγωνικό και περιλαμβάνει στροφές τάξης 6. Η ομάδα επιπέδου  $G$  είναι το ημιευθύ γινόμενο των  $L$  και  $\mathbb{Z}_6$ . Η ομάδα αυτή λέγεται  $\mathbb{Z}_6$  ή  $p6$  (Εικόνα 4.3.1.16).

#### **Ομάδα σημείου $D_6$**

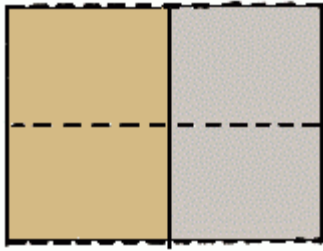
Το πλέγμα είναι εξαγωνικό. Η ομάδα  $G$  περιλαμβάνει στροφές τάξης 6 και ανακλάσεις στα υπερεπίπεδα που δημιουργούνται από τα 6 μικρότερα διανύσματα του  $L$ , καθώς και ανακλάσεις στα υπερεπίπεδα που δημιουργούνται από τα αθροίσματα και τις διαφορές των 6 παραπάνω διανυσμάτων. Η ομάδα επιπέδου λέγεται  $D_{6m}$  ή  $p6m$  (Εικόνα 4.3.1.17).



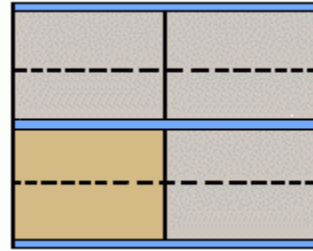
Εικόνα 4.3.1.1: Ομάδα Σημείου  $p1$



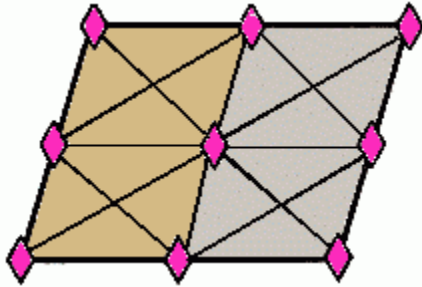
Εικόνα 4.3.1.2: Ομάδα Σημείου  $pm$



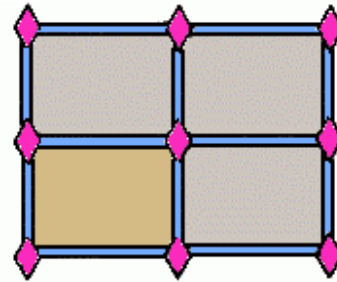
Εικόνα 4.3.1.3: Ομάδα Σημείου  $pg$



Εικόνα 4.3.1.4: Ομάδα Σημείου  $cm$



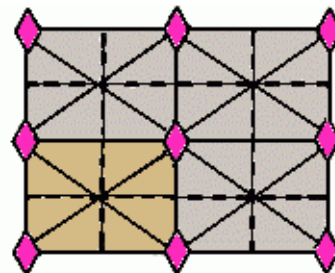
Εικόνα 4.3.1.5: Ομάδα Σημείου  $p2$



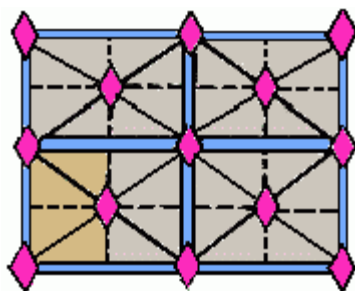
Εικόνα 4.3.1.6: Ομάδα Σημείου  $pm$



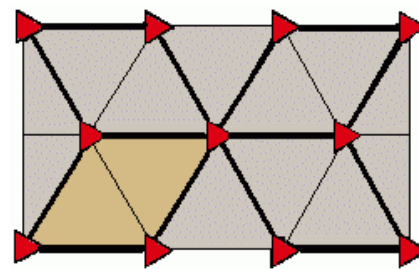
Εικόνα 4.3.1.7: Ομάδα Σημείου  $pmg$



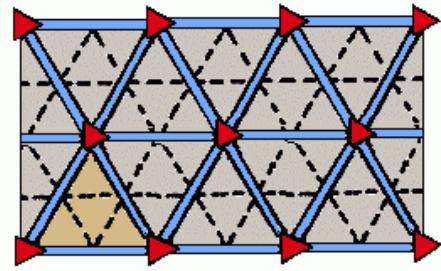
Εικόνα 4.3.1.8: Ομάδα Σημείου  $pgg$



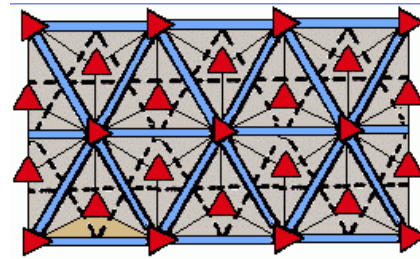
Εικόνα 4.3.1.9: Ομάδα Σημείου  $cm$



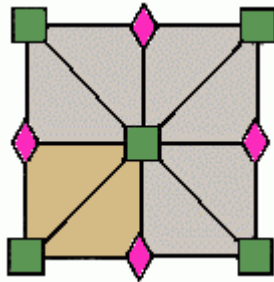
Εικόνα 4.3.1.10: Ομάδα Σημείου  $p3$



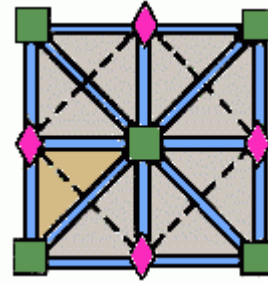
Εικόνα 4.3.1.11: Ομάδα Σημείου  $p3m1$



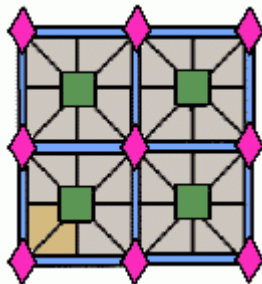
Εικόνα 4.3.1.12: Ομάδα Σημείου  $p31m$



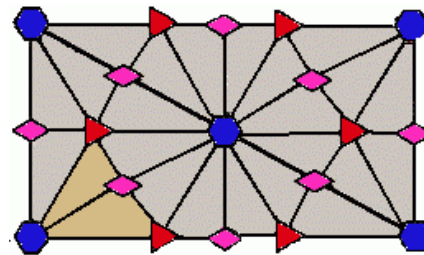
Εικόνα 4.3.1.13: Ομάδα Σημείου  $p4$



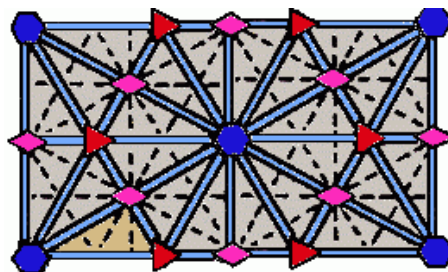
Εικόνα 4.3.1.14: Ομάδα Σημείου  $p4m$



Εικόνα 4.3.1.15: Ομάδα Σημείου  $p4g$



Εικόνα 4.3.1.16: Ομάδα Σημείου  $p6$



Εικόνα 4.3.1.16: Ομάδα Σημείου  $p6m$

Για περισσότερες εικόνες των ομάδων σημείου στο επίπεδο βλ. [18].

# 5

## *Κρύσταλλοι στον χώρο*

### *5.1 Εισαγωγή*

Στο κεφάλαιο που ακολουθεί γίνεται μία λεπτομερής ανάλυση των διεργασιών συμμετρίας στον χώρο, καθώς και η αναφορά όλων των τρόπων με τους οποίους γίνεται η σύνθεση αυτών, προκειμένου να παράγουμε όλες τις ομάδες σημείου για έναν κρύσταλλο. Η τελική ταξινόμηση γίνεται με την βοήθεια των κλάσεων των ομάδων σημείου, που μας δίνουν σαφώς την έννοια των ισοδύναμων σημείων σε ένα πλέγμα.

### *5.2 Διεργασίες Συμμετρίας στον χώρο*

Στην παράγραφο 2.2 αναφέρθηκαν τα τρία βασικά στοιχεία συμμετρίας: ο άξονας συμμετρίας, το επίπεδο συμμετρίας και το κέντρο συμμετρίας. Ένα σχήμα χαρακτηρίζεται συνήθως από συνδυασμό διαφόρων στοιχείων συμμετρίας. Τα στοιχεία συμμετρίας, όμως, δεν είναι πάντα ανεξάρτητα μεταξύ τους, καθώς από την παρουσία δύο εξ αυτών μπορεί να συνάγεται ένα τρίτο. Έτσι, π.χ. ένας άξονας 2<sup>ης</sup> τάξης και ένα κέντρο συμμετρίας πάνω στον άξονα αυτό, συνεπάγεται την ύπαρξη ενός επιπέδου συμμετρίας που διέρχεται από το κέντρο συμμετρίας και είναι κάθετο στον άξονα.

Η διαδοχική εφαρμογή κάποιων βασικών διεργασιών ορίζει, δια του συνδυασμού, παράγωγες ή σύνθετες διεργασίες συμμετρίας που υποδηλώνουν σύνθετα στοιχεία συμμετρίας. Έτσι, μία διεργασία συμμετρίας που περιλαμβάνει στροφή ως προς άξονα n-οστής τάξης και αναστροφή ως προς κέντρο συμμετρίας, είναι μία σύνθετη διεργασία στροφο-αναστροφής ή περιστροφικής αναστροφής. Μία διεργασία που περιλαμβάνει στροφή ως προς άξονα και ανάκλαση ως προς επίπεδο κάθετο στον

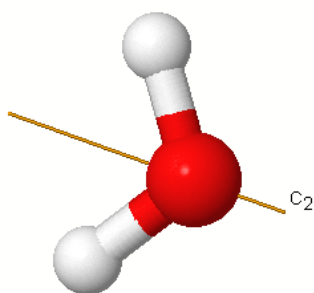


άξονα είναι μία σύνθετη διεργασία στροφοκατοπτρισμού (χρησιμοποιείται κυρίως για μόρια). Γενικά, σε έναν κρύσταλλο, το ότι ο συνδυασμός δύο απλών διεργασιών αποτελεί διεργασία συμμετρίας, δεν σημαίνει ότι κάθε μια από τις απλές διεργασίες, θα είναι από μόνη της διεργασία συμμετρίας.

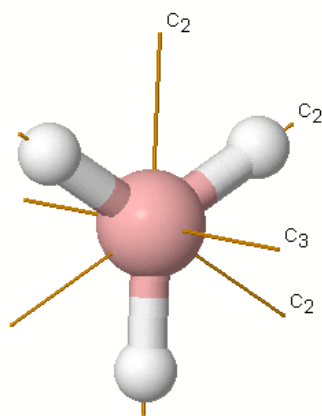
Συχνά, η απλή περιστροφή ως προς άξονα καλείται γνήσια ή κανονική περιστροφή (proper rotation), ενώ αν η διεργασία περιστροφής ακολουθείται από είτε από μία αναστροφή είτε από μία ανάκλαση λέγεται καταχρηστική περιστροφή (improper rotation). Στην συνέχεια παρουσιάζονται αναλυτικά οι εν λόγω συμμετρίες που αναφέραμε [14, κεφ 1<sup>ο</sup>, 2<sup>ο</sup>].

### 5.2.1 Περιστροφή και άξονες περιστροφής

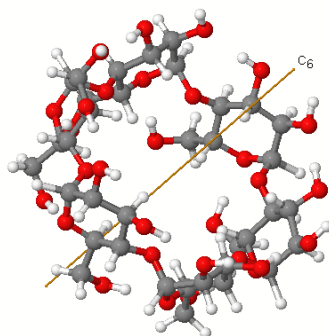
Αν ένα σώμα επανέλθει στην αρχική του κατάσταση μέσω περιστροφής γωνίας  $2\pi/n$ , γύρω από έναν άξονα, τότε ο άξονας αυτός λέγεται άξονας συμμετρίας τάξης  $n$  και συμβολίζεται με  $C_n$ . Η αντίστοιχη διεργασία περιστροφής συμβολίζεται με  $\widehat{C}_n$  (Εικόνες 5.2.1.1 έως και 5.2.1.3). Για  $n = 1$  η διεργασία  $C_1$  είναι περιστροφή κατά  $2\pi$ , η οποία πάντα οδηγεί το αντικείμενο στη αρχική του θέση. Αν υπάρχει μόνο ο άξονας  $C_1$ , τότε δεν υπάρχει κάποιου είδους συμμετρίας. Η διεργασία  $\widehat{C}_1$  αφήνει όλα τα άτομα στις αρχικές τους θέσεις (Εικόνα 5.2.1.4). Ο μετασχηματισμός καλείται τετριμμένος και συμβολίζεται με  $\hat{E}$  ( $\widehat{C}_1 = \hat{E}$ ). Τα γραμμικά μόρια ( $H_2, HCl, κτλ.$ ) έχουν  $C_\infty$  άξονες. Η αντίστοιχη διεργασία είναι περιστροφή κατά οποιαδήποτε γωνία. Είναι φανερό ότι η ύπαρξη  $C_\infty$  άξονα, δεν περιλαμβάνει άλλους άξονες συμμετρίας (Εικόνα 5.2.1.5).



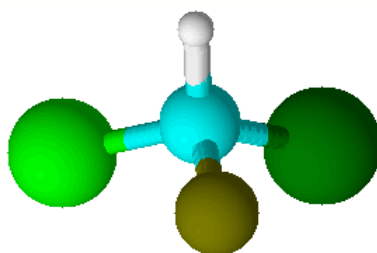
Εικόνα 5.2.1.1: Το μόριο του νερού ( $H_2O$ ) έχει άξονα συμμετρίας  $C_2$ , που συμπίπτει με την διχοτόμο της γωνίας HOH [16].



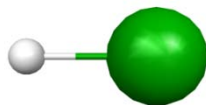
Εικόνα 5.2.1.2: Το μόριο ( $BH_3$ ) έχει τρεις άξονες τάξης 2 ( $C_2$ ), που βρίσκονται στο επίπεδο του μορίου και έναν άξονα τάξης 3 ( $C_3$ ), ο οποίος είναι κάθετος στο επίπεδο του μορίου [16].



Εικόνα 5.2.1.3: Το μόριο της  $\alpha$ -κυκλοδεξτρίνης έχει έναν άξονα τάξης 6, που διέρχεται από το κέντρο του μοριακού επιπέδου και είναι κάθετο σ'αυτό. Επίσης διαθέτει και άλλους δύο άξονες περιστροφής τάξης 2 και 3. Οι τρεις παραπάνω άξονες ταυτίζονται.



Εικόνα 5.2.1.4: Το μόριο  $HCFBrCl$  έχει μόνο τον τετριμμένο άξονα περιστροφής. Δεν έχει άξονες μεγαλύτερης από  $1^{ns}$  τάξης, αφού αποτελείται από διαφορετικά άτομα.



Εικόνα 5.2.1.5: Το γραμμικό μόριο HCl έχει  $C_\infty$  άξονες περιστροφής.

Εφαρμόζοντας διαδοχικά  $m$  διεργασίες περιστροφής  $\widehat{C}_n$  γύρω από άξονα  $C_n$ , λαμβάνουμε τις εξής διεργασίες συμμετρίας:  $\widehat{C}_n^2, \widehat{C}_n^3, \dots, \widehat{C}_n^m$  οι οποίες αντιστοιχούν στις περιστροφές κατά γωνία  $2\left(\frac{2\pi}{n}\right), 3\left(\frac{2\pi}{n}\right), \dots, n\left(\frac{2\pi}{n}\right)$  αντίστοιχα. Για  $m = n$ , λαμβάνουμε  $\widehat{C}_n^n = \widehat{E}$ . Αν ένα μόριο ή ένας κρύσταλλος έχει άξονα  $C_n$ , συμπεραίνουμε ότι υπάρχει πεπερασμένος αριθμός από διεργασίες συμμετρίας. Για παράδειγμα, στην περίπτωση του άξονα  $C_4$ , έχουμε τις εξής διεργασίες συμμετρίας:

$$\widehat{C}_4^1, \widehat{C}_4^2, \widehat{C}_4^3, \widehat{C}_4^4 = \widehat{E}, \widehat{C}_4^5, \dots$$

Όσον αφορά τις γωνίες περιστροφής θα έχουμε:  $5\left(\frac{2\pi}{4}\right) = 2\pi + \frac{2\pi}{4}$  και άρα  $\widehat{C}_4^5 = \widehat{C}_4^1$  κ.ο.κ. Συνεπώς, ένας άξονας  $C_4$  μας δίνει μόνο 4 διεργασίες συμμετρίας. Ομοίως ένας άξονας  $C_6$  μας δίνει τις εξής έξι διεργασίες συμμετρίας:

$$\widehat{C}_6^1, \widehat{C}_6^2, \widehat{C}_6^3, \widehat{C}_6^4, \widehat{C}_6^5, \widehat{C}_6^6$$

ή ισοδύναμα

$$\widehat{E}, \widehat{C}_6^1, \widehat{C}_6^2, \widehat{C}_6^3, \widehat{C}_6^4, \widehat{C}_6^5.$$

Παρατηρούμε ότι οι διεργασίες  $C_n$  είναι ομάδες. Συγκεκριμένα είναι οι κυκλικές ομάδες τάξης  $n$ , οι οποίες περιγράφονται γεωμετρικά από κανονικά  $n - \gamma\omega\nu\alpha$ . Έτσι λοιπόν, η κυκλική ομάδα τάξης 4 αποτελείται από τις στροφές (κατά 90) ενός τετραγώνου στο επίπεδο, η κυκλική ομάδα τάξης 6 από στροφές (κατά 60) ενός κανονικού εξαγώνου κτλ[14, κεφ 1<sup>ο</sup>, 2<sup>ο</sup>].

### 5.2.2 Ανάκλαση και επίπεδα συμμετρίας

Θεωρούμε ένα σημείο  $P$  στον χώρο και ένα επίπεδο  $\sigma$ . Κατοπτρική ανάκλαση ή απλώς ανάκλαση είναι μία διεργασία  $\hat{\sigma}$ , η οποία έχει ως αποτέλεσμα να μεταφέρει το σημείο  $P$  σε ένα σημείο  $P'$ . Έστω  $P(x_0, y_0, z_0)$  και επίπεδο  $\sigma$  επίπεδο κάθετο στον άξονα  $z$  (κατακόρυφος άξονας). Τότε οι συντεταγμένες του  $x_0$  και  $y_0$  παραμένουν αμετάβλητες, ενώ η συντεταγμένη  $z_0$  αλλάζει πρόσημο. Γράφουμε:

$$\hat{\sigma} P(x_0, y_0, z_0) = P'(x_0, y_0, -z_0).$$

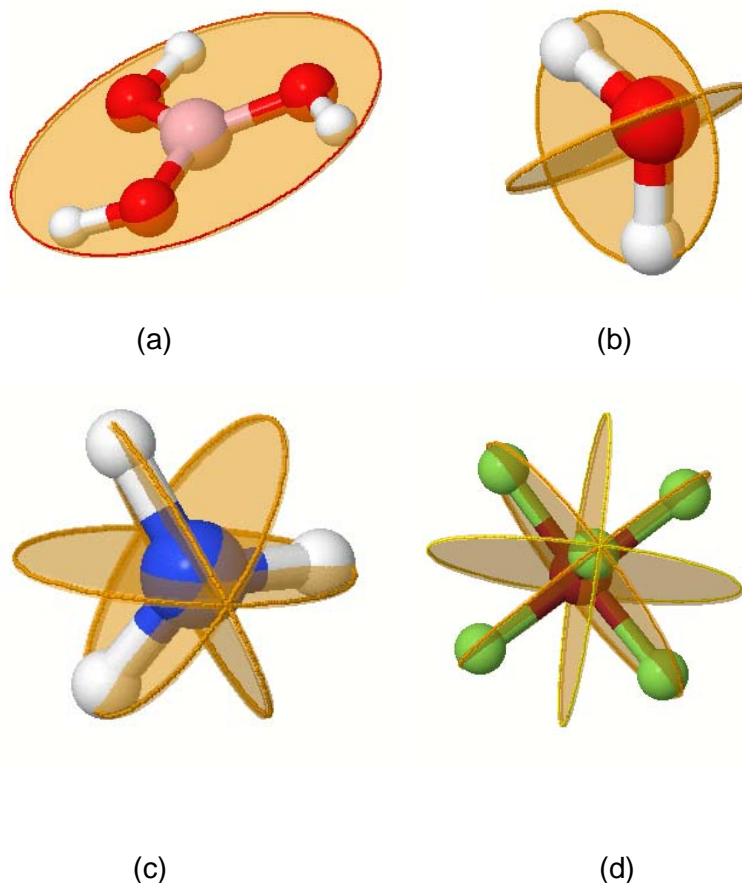
Εφαρμόζοντας τη διεργασία  $\hat{\sigma}$  διαδοχικά στα σημεία ενός αντικειμένου (μόριο, κρύσταλλος κτλ.) και το αντικείμενο επανέλθει στην αρχική του θέση, τότε λέμε ότι το αντικείμενο διαθέτει επίπεδο συμμετρίας  $\sigma$ .

Ένα επίπεδο συμμετρίας, αν υπάρχει, πάντα τέμνει τα τμήματα που συνδέουν τα ίδια άτομα στο μέσο, και είναι κάθετο σε αυτά τα τμήματα. Ένα επίπεδο μόριο πάντα έχει επίπεδο συμμετρίας (Εικόνα 5.2.2.1a). Επίσης, ένα μόριο ή κρύσταλλος μπορεί να έχει παραπάνω από ένα επίπεδα συμμετρίας (Εικόνα 5.2.2.1b-d) και ένα γραμμικό μόριο έχει άπειρα επίπεδα συμμετρίας. Η διεργασία ανάκλασης, επαναλαμβανόμενη, επαναφέρει το αντικείμενο στην αρχική του κατάσταση. Έτσι, λαμβάνουμε:

$$\hat{\sigma}^2 = \hat{E}, \hat{\sigma}^3 = \hat{\sigma}, \dots \text{ κτλ.}$$

Η παρουσία ενός επιπέδου συμμετρίας συνεπάγεται μόνον μία διεργασία συμμετρίας  $\hat{\sigma}$ .

Η ύπαρξη ενός επιπέδου συμμετρίας επιβάλλει κάποιους περιορισμούς στον αριθμό και στην θέση των ατόμων σε έναν κρύσταλλο ή ένα μόριο. Συγκεκριμένα ο αριθμός των ίδιων ατόμων (ή ιόντων) που δεν βρίσκονται στο ίδιο επίπεδο πρέπει να είναι άρτιος και το μοναδικό άτομο (ή ιόν) διαφορετικού τύπου πρέπει πάντα να βρίσκεται σε ένα επίπεδο συμμετρίας.



Εικόνα 5.2.2.1: Επίπεδα συμμετρίας των (α) βορικού οξέος, (β) νερού, (γ) αμμωνίας και (δ) πενταφθοριούχου βρωμίου [16] .

### 5.2.3 Περιστροφική ανάκλαση και άξονες περιστροφικής ανάκλασης

Η περιστροφική ανάκλαση είναι μία διεργασία η οποία επιτυγχάνεται σε δύο στάδια: μία στροφή  $\hat{C}(\varphi)$  γύρω από έναν άξονα  $C$  κατά γωνία  $\varphi$  και μία ανάκλαση  $\hat{\sigma}$  σε ένα επίπεδο κάθετο στον άξονα  $C$ .

Θεωρούμε ένα σημείο  $A_1$  στον χώρο και στο στρέφουμε κατά γωνία  $\varphi$  γύρω από έναν άξονα  $C$ . Έτσι λαμβάνουμε ένα σημείο  $A_2$ :

$$\hat{C}(\varphi)A_1 = A_2.$$

Έπειτα το σημείο  $A_2$  ανακλάται μέσω της διεργασίας  $\hat{\sigma}$  και λαμβάνουμε το σημείο  $A_3$ :

$$\hat{\sigma}A_2 = A_3.$$

Η διεργασία της περιστροφικής ανάκλασης κατά γωνία  $\varphi$  συμβολίζεται με  $\hat{S}(\varphi)$ . Αν η γωνία  $\varphi$  ισούται με  $2\pi/n$ , τότε την περιστροφική ανάκλαση την συμβολίζουμε με  $\hat{S}_n$  και τον άξονα περιστροφικής ανάκλασης με  $S_n$  [14, κεφ 1<sup>ο</sup>, 2<sup>ο</sup>].

Παρατηρήσεις:

1. Αν αλλάξουμε την ακολουθία των διεργασιών  $\hat{C}(\varphi)$  και  $\hat{\sigma}$ , προκύπτει το ίδιο αποτέλεσμα (η ιδιότητα αυτή ισχύει επειδή οι παραπάνω διεργασίες είναι αβελιανές ομάδες).
2. Στις περιπτώσεις εκείνες όπου ένας κρύσταλλος ή μόριο έχει στοιχεία συμμετρίας άξονα  $C_n$  και επίπεδο  $\sigma$ , τότε έχει και άξονα περιστροφικής ανάκλασης  $S_n$ . Αντιθέτως, αν ένα μόριο ή κρύσταλλος έχει άξονα περιστροφικής ανάκλασης, τότε δεν έχει υποχρεωτικά άξονα  $C_n$  και επίπεδο  $\sigma$  συμμετρίας.

Εκτελώντας  $m$  φορές την περιστροφική ανάκλαση σε ένα αντικείμενο λαμβάνουμε:

$$\begin{aligned}\hat{S}_n^m &= \hat{C}_n \hat{\sigma} \dots \hat{C}_n \hat{\sigma} \quad \text{ή} \\ \hat{S}_n^m &= \hat{C}_n \dots \hat{C}_n \hat{\sigma} \dots \hat{\sigma} \quad \text{ή} \\ \hat{S}_n^m &= \hat{C}_n^m \hat{\sigma}^m.\end{aligned}$$

Επειδή άρτιος αριθμός ανακλάσεων επιστρέφει κάθε σημείο στην αρχική του θέση έχουμε:

$$\hat{\sigma}^m = \begin{cases} \hat{E} & \text{αν } m \text{ άρτιος,} \\ \hat{\sigma} & \text{αν } m \text{ περιττός} \end{cases}$$

Όταν ο αριθμός  $m$  των περιστροφικών ανακλάσεων είναι περιττός λαμβάνουμε:

$$\hat{S}_n^n = \hat{C}_n^n \hat{\sigma} = \hat{E} \hat{\sigma} = \hat{\sigma},$$

Και άρα το μόριο ή ο κρύσταλλος έχει επίπεδο συμμετρίας  $\sigma$ .

Συνεχίζοντας, εκτελούμε άλλη μία περιστροφική ανάκλαση, λαμβάνουμε:

$$\hat{S}_n^{n+1} = \hat{S}_n \hat{S}_n^n = \hat{S}_n \hat{E} \hat{\sigma} = \hat{S}_n \hat{\sigma} = \hat{C}_n \hat{\sigma}^2 = \hat{C}_n \hat{E} = \hat{C}_n.$$

Συνεπώς, μία περιστροφική ανάκλαση περιττής τάξης συνεπάγεται την ύπαρξη άξονα συμμετρίας  $C_n$  και επιπέδου συμμετρίας  $\sigma$ .

Ο μικρότερος αριθμός διεργασιών  $\hat{S}_n$ , που πρέπει να κάνει ένα μόριο ή ένας κρύσταλλος προκειμένου να επιστρέψει στην αρχική του θέση είναι  $2n$ :

$$\hat{S}_n^{2n} = \hat{C}_n^{2n} \hat{\sigma}^{2n} = \hat{E}.$$

Οι παραπάνω παρατηρήσεις έχουν ως αποτέλεσμα ότι για  $n$  περιττό αριθμό ο άξονας  $S_n$  είναι συναφής με  $2n$  περιστροφικές ανακλάσεις. Για παράδειγμα ένας άξονας  $S_3$  αποτελείται από 6 διεργασίες:

$$\hat{S}_3^1, \hat{S}_3^2 = \hat{C}_3^2, \hat{S}_3^3 = \hat{\sigma}, \hat{S}_3^4 = \hat{C}_3^1, \hat{S}_3^5 = \hat{C}_3^2\hat{\sigma}, \hat{S}_3^6 = \hat{E}.$$

Θεωρώντας τώρα άξονα  $S_n$  με  $n$  άρτιο, λαμβάνουμε ότι  $\hat{S}_n^n = \hat{E}$ , αφού ο άξονας  $C_n$  και το επίπεδο  $\sigma$  δεν είναι στοιχεία συμμετρίας. Για παράδειγμα, ο άξονας  $S_6$  μας δίνει 6 διεργασίες συμμετρίας:

$$\hat{S}_6^1, \hat{S}_6^2 = \hat{C}_6^2\hat{\sigma}^2 = \hat{C}_3^1, \hat{S}_6^3 = \hat{C}_6^3\hat{\sigma}^3 = \hat{C}_2^1\hat{\sigma} = \hat{S}_2, \hat{S}_6^4 = \hat{C}_3^2, \hat{S}_6^5, \hat{S}_6^6 = \hat{E}.$$

Στο σημείο αυτό πρέπει να σημειωθεί ότι η παραπάνω ακολουθία διεργασιών περιλαμβάνει και τις διεργασίες  $\hat{C}_3^1, \hat{C}_3^2, \hat{E}$  που παράγονται από τον άξονα περιστροφής  $C_3$  (ο λόγος που συμβαίνει αυτό είναι ότι η ομάδα στροφών  $C_3$  είναι υποομάδα της ομάδας περιστροφικών ανακλάσεων  $S_3$ ). Δηλαδή, η ύπαρξη άξονα περιστροφικής ανάκλασης  $S_n$  για άρτιο  $n$ , επιβάλλει την ύπαρξη άξονα περιστροφής  $C_{n/2}$ .

#### 5.2.4 Κέντρο Συμμετρίας

Μία πολύ σημαντική υποπερίπτωση της περιστροφικής ανάκλασης είναι αυτή, του άξονα  $2^{16}$  τάξης  $S_2$ , της διεργασίας  $\hat{S}_2 = \hat{C}_2\hat{\sigma}$ . Θεωρώντας ένα σημείο  $P$  στον χώρο λαμβάνουμε, έπειτα από εφαρμογή της διεργασίας  $\hat{S}_2$ :

$$\hat{S}_2 P(x_0, y_0, z_0) = P'(-x_0, -y_0, -z_0).$$

Η καταχρηστική ανάκλαση  $\hat{S}_2$  καλείται αναστροφή ως προς το κέντρο των αξόνων  $O$  και συμβολίζεται με  $\hat{I}$ . Ο άξονας  $S_2$  τάξης 2 συμβολίζεται με  $I$  και το σημείο  $O$  ονομάζεται κέντρο αναστροφής (συμμετρίας) [14, κεφ 1<sup>ο</sup>, 2<sup>ο</sup>].

#### 5.2.5 Σύνοψη

Στις παραγράφους 5.2.1 έως και 5.2.4 αναφέρουμε τα στοιχεία συμμετρίας και τις αντίστοιχες διεργασίες συμμετρίας (Πίνακας 5.2.5.1), που χρειάζονται για τον προσδιορισμό της συμμετρίας των κρυστάλλων. Σε αρκετά βιβλία, εκτός από τις 4 αυτές διεργασίες συμμετρίας, αναφέρεται και μία πέμπτη, η ταυτοτική διεργασία.

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

*Πίνακας 5.2.5.1: Τα 4 στοιχεία συμμετρίας και οι αντίστοιχες διεργασίες.*



## 5.3 Σύνθεση διεργασιών συμμετρίας

### 5.3.1 Σύνθεση – Αντιμεταθετικότητα

Ένας κρύσταλλος μπορεί να έχει παραπάνω από ένα στοιχεία συμμετρίας και άρα παραπάνω από μία διεργασίες συμμετρίας. Στο σημείο αυτό θα εξετάσουμε πως επιδρούν δύο διεργασίες συμμετρίας όταν δρουν διαδοχικά σε έναν κρύσταλλο.

Έστω  $X, Y$  δύο στοιχεία συμμετρίας και  $\hat{X}, \hat{Y}$  οι αντίστοιχες διεργασίες συμμετρίας ενός κρυστάλλου. Συμβολίζουμε με  $\hat{Y}\hat{X}$  το αποτέλεσμα της διαδοχικής δράσης των διεργασιών  $\hat{X}$  και  $\hat{Y}$ . Η εφαρμογή των διεργασιών γίνεται από αριστερά προς τα δεξιά, δηλαδή στο παράδειγμα  $\hat{Y}\hat{X}$ , πρώτα εφαρμόζεται η διεργασία  $\hat{X}$  και μετά η  $\hat{Y}$ .

Οι διεργασίες  $\hat{Y}\hat{X}$  ονομάζεται σύνθεση ή γινόμενο των διεργασιών  $\hat{X}, \hat{Y}$  και η αντίστοιχη πράξη μεταξύ τους πολλαπλασιασμός. Το πρώτο παράδειγμα σύνθεσης διεργασιών είδαμε την περιστροφική ανάκλαση  $\hat{S}_n$ , ως γινόμενο περιστροφής  $\hat{C}_n$  και ανάκλασης  $\hat{\sigma}$ . Επίσης διαπιστώσαμε ότι το αποτέλεσμα του γινομένου είναι ανεξάρτητο από την σειρά της εφαρμογής των διεργασιών:

$$\hat{S}_n = \hat{C}_n\hat{\sigma} = \hat{\sigma}\hat{C}_n.$$

Συνεχίζοντας με ένα δεύτερο παράδειγμα, θεωρούμε δύο επίπεδα  $\sigma_1, \sigma_2$  κάθετα στο επίπεδο της σελίδας, που σχηματίζουν γωνία  $\varphi$  και ένα σημείο  $A$  που δεν ανήκει στα επίπεδα  $\sigma_1, \sigma_2$ . Θεωρούμε επίσης τις διεργασίες  $\hat{Z}_{21} = \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1, \hat{Z}_{12} = \hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2$  οι οποίες επιδρούν στο σημείο  $A$ .

Η διεργασία  $\hat{Z}_{21} = \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1$  μεταφέρει το σημείο  $A$  σε ένα σημείο  $A_2$ :

$$\hat{\sigma}_1 A = A_1, \hat{\sigma}_2 A_1 = A_2.$$

Η διεργασία  $\hat{Z}_{12} = \hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2$  μεταφέρει το σημείο  $A$  σε ένα σημείο  $B_2$ :

$$\hat{\sigma}_2 A = B_1, \hat{\sigma}_1 B_1 = B_2.$$

Είναι φανερό ότι οδηγηθήκαμε σε διαφορετικό αποτέλεσμα αφού, γενικά είναι  $A_2 \neq B_2$ . Δηλαδή είναι  $\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1 \neq \hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2$ . Στην ειδική περίπτωση όπου η γωνία  $\varphi$  των δύο επιπέδων είναι ορθή, τότε λαμβάνουμε  $A_2 = B_2$  και άρα  $\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1 = \hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2$ .

Αν για δύο διεργασίες ισχύει  $\hat{Y}\hat{X} = \hat{X}\hat{Y}$  τότε λέγονται αντιμεταθετικές.

Όλα τα ζεύγη αντιμεταθετικών διεργασιών είναι τα εξής:

1. Δύο διαδοχικές περιστροφές  $\hat{C}(\varphi_1)$  και  $\hat{C}(\varphi_2)$  γύρω από έναν άξονα:

$$\hat{C}(\varphi_1)\hat{C}(\varphi_2) = \hat{C}(\varphi_2)\hat{C}(\varphi_1) = \hat{C}(\varphi_1 + \varphi_2).$$

2. Δύο διαδοχικές περιστροφές γύρω από κάθετους άξονες  $C_2$ .

3. Δύο ανακλάσεις σε δύο κάθετα επίπεδα.
4. Μία περιστροφική ανάκλαση. Αποτελείται από μία περιστροφή και μία ανάκλαση σε ένα επίπεδο κάθετο στον άξονα περιστροφής.
5. Μία περιστροφή  $\hat{C}(\varphi)$  γύρω από άξονα  $C$  και αναστροφή ως προς κέντρο συμμετρίας ενός σημείου του άξονα  $C$ :
 
$$\hat{C}(\varphi)\hat{I} \equiv \hat{C}(\varphi)\hat{\sigma}\hat{C}_2 = \hat{I}\hat{C}(\varphi).$$
6. Μία ανάκλαση σε ένα επίπεδο και αναστροφή ως προς κέντρο συμμετρίας ενός σημείου που ανήκει στο επίπεδο.

### 5.3.2 Αντίστροφη διεργασία

Στην παράγραφο αυτή αναλύεται η έννοια της αντίστροφης διεργασίας.

Έστω οι διεργασίες  $\hat{X}, \hat{Y}$ . Η  $\hat{Y}$  λέγεται αντίστροφη διεργασία της  $\hat{X}$  αν  $\hat{Y}\hat{X} = \hat{E}$  και συμβολίζεται με  $\hat{X}^{-1}$  [14, κεφ 1<sup>ο</sup>, 2<sup>ο</sup>].

#### Παραδείγματα:

1. Ισχύει  $\hat{C}_3^{-1} = \hat{C}_3^2$ , αφού  $\hat{C}_3^1\hat{C}_3^2 = \hat{C}_3^3 = \hat{E}$ .
2. Η αντίστροφη διεργασία μίας περιστροφής είναι:  $(\hat{C}_n^m)^{-1} = \hat{C}_n^{n-m}$ ,  
αφού  $\hat{C}_n^m\hat{C}_n^{n-m} = \hat{C}_n^{m+n-m} = \hat{C}_n^n = \hat{E}$ .
3. Μερικές φορές ισχύει  $\hat{X}^{-1} = \hat{X}$ , για παράδειγμα η διεργασία ανάκλασης  $\hat{\sigma}$ . Είναι  $\hat{\sigma}^{-1} = \hat{\sigma}$ , αφού  $\hat{\sigma}\hat{\sigma} = \hat{E}$ .

Τέλος σημειώνουμε την ακόλουθη ιδιότητα που ισχύει για γινόμενο  $n$  διεργασιών:

$$(\hat{X}_1\hat{X}_2 \dots \hat{X}_n)^{-1} = \hat{X}_1^{-1} \dots \hat{X}_2^{-1}\hat{X}_n^{-1}.$$

## 5.4 Συσχέτιση Στοιχείων Συμμετρίας

Μέχρι τώρα παρουσιάσαμε μερικές ιδιότητες των στοιχείων συμμετρίας. Στην παράγραφο αυτή θα ασχοληθούμε με το πρόβλημα της εύρεσης όλων των συμμετριών ενός κρυστάλλου. Μια πρώτη προσέγγιση στη λύση του προβλήματος

αυτού είναι η εύρεση όλων εκείνων των διεργασιών, οι οποίες, έπειτα από την εφαρμογή τους σε έναν κρύσταλλο, τον φέρνουν στην αρχική του θέση. Μία διαφορετική προσέγγιση, βασίζεται στο γεγονός ότι πολλά στοιχεία συμμετρίας είναι συσχετισμένα μεταξύ τους. Είναι φανερό ότι αν  $X$  και  $Y$  είναι στοιχεία συμμετρίας, με αντίστοιχες διεργασίες  $\hat{X}$  και  $\hat{Y}$ , τότε υπάρχουν το λιγότερο δύο ακόμα διεργασίες συμμετρίας:  $\hat{Z}_1 = \hat{X}\hat{Y}$  και  $\hat{Z}_2 = \hat{Y}\hat{X}$ . Μερικά νέα στοιχεία συμμετρίας μπορεί να αντιστοιχούν σε αυτές τις διεργασίες. Έχουμε αναφέρει παρόμοια περίπτωση διεργασίας σε προηγούμενη παράγραφο, όταν θεωρήσαμε την περιστροφική ανάκλαση ως γινόμενο διεργασιών. Στις παραγράφους που ακολουθούν επεκτείνεται αυτή η συζήτηση [14, κεφ 1<sup>ο</sup>, 2<sup>ο</sup>].

### 5.4.1 Συσχέτιση Αξόνων Συμμετρίας

Για να γίνει πιο κατανοητό το περιεχόμενο της παραγράφου αυτής θα ξεκινήσουμε με ένα παράδειγμα. Θεωρούμε έναν κρύσταλλο, ο οποίος έχει έναν άξονα  $C_3(z)$  και έναν άξονα  $C_2 \perp C_3$  στο επίπεδο  $\sigma(xy)$ . Η διεργασία  $\hat{C}_2$  μεταφέρει το σημείο  $A$  στο  $A_1$ . Το σημείο  $A$  βρίσκεται «πάνω» (συμβολίζουμε με  $\odot$ ) από το επίπεδο  $xy$ , ενώ το σημείο  $A_1$  βρίσκεται «κάτω» (συμβολίζουμε με  $\otimes$ ) από το επίπεδο  $xy$ . Η διεργασία  $\hat{C}_3$  μεταφέρει το σημείο  $A_1$  στο  $A_2$ . Με λίγα λόγια έχουμε τις εξής πράξεις:

$$\hat{C}_3(z)\hat{C}_2A = A_2.$$

Στο σημείο αυτό, σημειώνουμε ότι η διεργασία περιστροφής  $\hat{C}_2'$  γύρω από τον άξονα  $C_2'$ , ο οποίος σχηματίζει γωνία  $\frac{2\pi}{3}$  με τον  $C_2$ , οδηγεί στο ίδιο αποτέλεσμα:

$$C_2'A = A_2.$$

Συνεπώς, οι διεργασίες  $\hat{C}_3(z)\hat{C}_2$  και  $C_2'$  είναι ισοδύναμες. Είναι  $\hat{C}_3(z)\hat{C}_2 = C_2'$ .

Με άλλα λόγια, τα στοιχεία συμμετρίας  $C_3(z)$  και  $C_2$  επιβάλλουν την ύπαρξη του άξονα  $C_2'$ . Η ύπαρξη του άξονα  $C_2''$  αποδεικνύεται με παρόμοιο τρόπο.

Γενικεύοντας, ένας άξονας  $C_n$  και ένας  $C_2 \perp C_n$  δημιουργούν  $n - 1$  άξονες  $C_2$  σε επίπεδο  $\sigma$  ( $\sigma \perp C_n$ ), με τους άξονες  $C_2$  να τέμνουν ο ένας τον άλλον υπό γωνία  $\pi/n$ . Καθένας από τους άξονες  $C_2$  μπορεί να δημιουργηθεί εφαρμόζοντας την διεργασία  $\hat{C}_n$  σε κάποιον από τους υπόλοιπους άξονες. Γράφουμε:

$$\hat{C}_3C_2 = C_2'', \quad \hat{C}_3C_2' = C_2, \quad \hat{C}_3C_2'' = C_2'.$$

Περαιτέρω ανάλυση είναι σκόπιμο να γίνει στην περίπτωση όπου ο αριθμός  $n$  είναι άρτιος. Θεωρούμε, για παράδειγμα, τους άξονες  $C_4(z)$  και  $C_2 \perp C_4$ . Η περιστροφή  $\hat{C}_4(z)$  μετατοπίζει τον άξονα  $C_2$  στον άξονα  $C_2'$  και μία δεύτερη περιστροφή  $\hat{C}_4(z)$  μετατοπίζει τον  $C_2$  στον άξονα  $C_2''$  με αντίθετη κατεύθυνση περιστροφής.

Οι άξονες  $C_4, C_2, C_2'$  δεν αποτελούν το ολοκληρωμένο σύνολο των στοιχείων συμμετρίας. Είναι εύκολο να διαπιστώσουμε ότι η ύπαρξη των αξόνων  $C_4$  και  $C_2$  συνεπάγεται την ύπαρξη των αξόνων  $C_2^{(1)}$  και  $C_2^{(2)}$ . Είναι αδύνατον να μετατοπίσουμε το ζεύγος αξόνων  $C_2, C_2'$  στο ζεύγος  $C_2^{(1)}, C_2^{(2)}$  αντίστοιχα μέσω περιστροφικής διεργασίας  $\hat{C}_4(z)$ . Το παραπάνω παράδειγμα, μας υποδεικνύει έναν γενικό ισχυρισμό, η σημαντικότητα του οποίου θα γίνει σαφέστερη στα κεφάλαια που ακολουθούν. Όταν ο αριθμός  $n$  είναι περιττός, η περιστροφή  $\hat{C}_n$  μετατοπίζει όλους τους  $n$  οριζόντιους άξονες  $C_2$ , από τον έναν στον άλλον. Όταν ο αριθμός  $n$  είναι άρτιος, οι άξονες  $C_2$  διαχωρίζονται σε δύο σύνολα και είναι αδύνατον να μεταφερθούν  $C_2$  άξονες, οι οποίοι ανήκουν σε διαφορετικά σύνολα, στην αρχική τους κατάσταση, χρησιμοποιώντας μόνο τις διεργασίες περιστροφής  $\hat{C}_n^m$ .

Έτσι λοιπόν, δεν μπορούν όλα τα σύνολα στοιχείων συμμετρίας να παίξουν τον ρόλο των στοιχείων συμμετρίας ενός κρυστάλλου. Για παράδειγμα, δεν υπάρχουν κρύσταλλοι, οι οποίοι να έχουν μόνο άξονες  $C_3$  και  $C_2 \perp C_3$ , αφού η παρουσία των αξόνων  $C_3$  και  $C_2$  επιβάλλει την ύπαρξη δύο επιπλέον αξόνων  $C_2$ .

#### 5.4.2 Συσχέτιση Αξόνων και Επιπέδων Συμμετρίας

Συνεχίζοντας την διαδικασία συσχέτισης των στοιχείων συμμετρίας θεωρούμε μερικές σημαντικές περιπτώσεις που είναι απαραίτητες για τον προσδιορισμό των στοιχείων συμμετρίας ενός κρυστάλλου.

(1) Ένας άξονας  $C_n$  και ένα επίπεδο που τέμνει τον άξονα, εμφανίζει, ως αποτέλεσμα,  $n - 1$  επίπεδα που τέμνονται ανά δύο με γωνία  $\pi/n$ . Δίνουμε ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα. Θεωρούμε έναν άξονα  $C_3$  και ένα επίπεδο  $\sigma_1$ . Είναι φανερό ότι:  $\hat{C}_3 A = A'$  και  $\hat{\sigma}_1 A' = A''$ . Από την άλλη πλευρά, έχουμε:  $\hat{\sigma}_2 A = A''$ . Άρα λαμβάνουμε:  $\hat{C}_3 \hat{\sigma}_1 = \hat{\sigma}_2$ . Η σχέση αυτή μας δείχνει την ύπαρξη ενός επιπέδου συμμετρίας  $\sigma_2$ . Ομοίως, συμπεραίνουμε ότι υπάρχει και ένα άλλο επίπεδο συμμετρίας  $\sigma_3$ . Τα επίπεδα συμμετρίας  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$  συμπίπτουν μέσω περιστροφών  $\hat{C}_3$ . Το συμπέρασμα αυτό ισχύει για κάθε άξονα  $C_n$  με  $n$  περιττό αριθμό. Όταν ο  $n$  είναι άρτιος, τα επίπεδα  $\sigma$  διαχωρίζονται σε δύο υποσύνολα και είναι αδύνατον να

συμπέσουν δύο επίπεδα που ανήκουν σε διαφορετικά υποσύνολα, μέσω περιστροφών  $\hat{C}_n^m$ .

(2) Άς θεωρήσουμε ένα άξονα  $C_n(z)$  και  $n$  άξονες  $C_2$  κάθετους στον  $C_n$ . Υποθέτουμε ότι ο κρύσταλλος έχει ένα οριζόντιο επίπεδο συμμετρίας  $\sigma(xy)$ , το οποίο περιλαμβάνει άξονες  $C_2$ . Μπορούν όλα τα προαναφερθέντα στοιχεία συμμετρίας να αποτελέσουν ένα πλήρες σύνολο; Για να απαντήσουμε στο ερώτημα αυτό, πρέπει να εξετάσουμε όλα τα δυνατά γινόμενα διεργασιών  $\hat{C}_n\hat{\sigma}$  και  $\hat{C}_2\hat{\sigma}$  και να προσδιορίσουμε, αν υπάρχουν, νέα στοιχεία συμμετρίας. Δίνουμε ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα για  $n = 3$ . Θεωρώντας έναν άξονα  $C_3(z)$ , τρεις άξονες  $C_2$  και ένα επίπεδο  $\sigma(xy)$ . Θα εξετάσουμε το γινόμενο  $\hat{C}_2\hat{\sigma}(x, y)$ . Η διεργασία  $\hat{C}_2\hat{\sigma}(x, y)$  μεταφέρει το σημείο  $A$  στο  $A''$ . Από την άλλη πλευρά, η ανάκλαση  $\hat{\sigma}$ , διαμέσου του κάθετου επιπέδου  $\sigma$ , η οποία περιλαμβάνει τους άξονες  $C_2$  και  $C_3$ , οδηγεί στο ίδιο αποτέλεσμα:

$$\hat{\sigma}A = A'', \quad \hat{\sigma} = \hat{C}_2\hat{\sigma}(x, y).$$

Η ύπαρξη των επιπέδων συμμετρίας  $\sigma'$  και  $\sigma''$  αποδεικνύεται με παρόμοιο τρόπο. Συνεπώς, η παρουσία ενός άξονα  $C_n$  και ενός επιπέδου κάθετου στον άξονα αυτόν και έχοντας  $n$  το πλήθος άξονες  $C_2$ , συνεπάγεται την ύπαρξη  $n$  επιπλέον  $\sigma$  επιπέδων, τα οποία περιλαμβάνουν τους άξονες  $C_n$  και  $C_2$ .

## 5.5 Ισοδύναμα Στοιχεία Συμμετρίας και Άτομα

Στην παράγραφο 5.4 είδαμε ότι η επίδραση των διεργασιών συμμετρίας σε μερικά στοιχεία συμμετρίας, προκαλούν στο να συμπέσουν το ένα στο άλλο. Για παράδειγμα, η επίδραση της διεργασίας περιστροφής  $\hat{C}_3$  σε τρεις άξονες  $C_2$ , με την προϋπόθεση ότι  $C_3 \perp C_2$ , προκαλεί στο να συμπέσουν ο ένας άξονας  $C_2$  στον άλλον [14, κεφ 1<sup>ο</sup>, 2<sup>ο</sup>].

**Ορισμός 5.5.1 (συζυγή στοιχεία συμμετρίας):** Έστω δύο στοιχεία συμμετρίας  $A$  και  $B$  και μία διεργασία συμμετρίας  $\hat{X}$ , η οποία ανήκει στην ίδια ομάδα διεργασιών με τις διεργασίες  $\hat{A}$  και  $\hat{B}$ . Αν το στοιχείο  $A$  μετασχηματιστεί στο στοιχείο  $B$ , μέσω της διεργασίας  $\hat{X}$ , τότε λέμε ότι το στοιχείο  $A$  είναι συζυγές με το στοιχείο  $B$ . Στην περίπτωση αυτή γράφουμε:  $B = \hat{X}A$ .

### **Πόρισμα 5.5.2:**

Έστω  $A$  και  $B$  δύο στοιχεία συμμετρίας. Τότε αν το  $A$  είναι συζυγές με το  $B$ , τότε και το  $B$  είναι συζυγές με το  $A$ .

### **Απόδειξη:**

Από τον ορισμό των συζυγών στοιχείων συμμετρίας λαμβάνουμε:

$$B = \hat{X}A \Rightarrow A = \hat{X}^{-1}B \quad (\text{η διεργασία } \hat{X}^{-1} \text{ ανήκει στην ίδια ομάδα με την διεργασία } \hat{X}).$$

Το παραπάνω πόρισμα μας υποδεικνύει ότι η συζυγία των στοιχείων συμμετρίας είναι αμοιβαία.

**Ορισμός 5.5.3 (ισοδύναμα στοιχεία συμμετρίας):** Δύο στοιχεία συμμετρίας που είναι αμοιβαία συζυγή ονομάζονται ισοδύναμα.

**Θεώρημα 5.5.4:** Έστω τρία στοιχεία συμμετρίας:  $A, B$  και  $C$ , και έστω το  $A$  συζυγές με το  $B$  και  $C$ , μέσω των διεργασιών συμμετρίας  $\hat{X}$  και  $\hat{Y}$  αντίστοιχα, τότε η διεργασία  $\hat{Z} = \hat{Y}\hat{X}^{-1}$  μεταφέρει στο στοιχείο  $B$  στο  $C$ .

**Απόδειξη:** Είναι  $\hat{X}A = B$  και  $\hat{Y}A = C$ . Λαμβάνουμε:  $\hat{Z}B = \hat{Y}\hat{X}^{-1}B = \hat{Y}A = C$ .

Άτομα του ίδιου στοιχείου που μπορούν να ταυτιστούν το ένα με το άλλο, έπειτα από μία διεργασία συμμετρίας, ονομάζονται ισοδύναμα.

Το σύνολο των στοιχείων συμμετρίας ενός κρυστάλλου, μπορεί να διαχωριστεί σε σύνολα ισοδύναμων ατόμων και τα άτομα ή τα ιόντα που περιλαμβάνονται σε έναν κρύσταλλο μπορούν να διαχωριστούν σε σύνολα από ισοδύναμα άτομα ή ισοδύναμα ιόντα.

## **5.6 Συζυγείς Διεργασίες Συμμετρίας – Κλάσεις**

**Ορισμός 5.6.1 (συζυγείς διεργασίες συμμετρίας):** Έστω δύο διεργασίες συμμετρίας  $\hat{A}$  και  $\hat{B}$ , που ανήκουν στην ίδια ομάδα συμμετρίας. Αν υπάρχει διεργασία συμμετρίας  $\hat{C}$  στην ομάδα ίδια ομάδα τις  $\hat{A}$  και  $\hat{B}$  και ισχύει:  $\hat{A} = \hat{C}\hat{B}\hat{C}^{-1}$ , τότε λέμε ότι η διεργασία  $\hat{A}$  είναι συζυγής με την διεργασία  $\hat{B}$ .

Η χρήση ίδιας ορολογίας με αυτής της προηγούμενης παραγράφου είναι σκόπιμη.

Θα δείξουμε στην συνέχεια ότι τα συζυγή στοιχεία συμμετρίας οδηγούν στις συζυγείς διεργασίες συμμετρίας.

**Πόρισμα 5.6.2 (ιδιότητες συζυγών διεργασιών συμμετρίας):**

Έστω  $A, B, C$  διεργασίες συμμετρίας.

- (a) Αν  $A$  συζυγής με τη  $B$ , τότε η  $B$  συζυγής με την  $A$ .
- (b) Κάθε διεργασία συμμετρίας είναι αυτοσυζυγής.
- (c) Αν  $A$  συζυγής με την  $B$  και η  $B$  συζυγής με την  $C$ , τότε η  $A$  είναι συζυγής με την  $C$  (μεταβατική ιδιότητα).
- (d) Δύο συζυγείς διεργασίες έχουν την ίδια τάξη.

Οι παραπάνω ιδιότητες μας επιτρέπουν να μιλάμε για σύνολα αμοιβαία συζυγείς ομάδες διεργασιών. Οι πλήρεις συλλογές από αμοιβαία συζυγείς ομάδες διεργασιών λέγονται κλάσεις.

Προκειμένου να διαχωρίσουμε το σύνολο των διεργασιών συμμετρίας μίας ομάδας συμμετρίας σε κλάσεις, παίρνουμε όλες τις διεργασίες συμμετρίας  $\hat{A}$  και λαμβάνουμε το γινόμενο  $\hat{X}\hat{A}\hat{X}^{-1}$ , για κάθε άλλη διεργασία  $\hat{X}$  που ανήκει στην ομάδα. Για να γίνει πιο κατανοητή η διαδικασία διαχωρισμού, δίνουμε ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα στη συνέχεια.

Ας θεωρήσουμε την ομάδα συμμετρίας  $C_{4v}$ . Η ομάδα αυτή αποτελείται από έναν άξονα  $C_4$  και τέσσερα επίπεδα,  $2\sigma_v$  και  $2\sigma_d$  (διαγώνιοι), κάθετα στο επίπεδο της σελίδας. Για να καθορίσουμε τις κλάσεις, είναι βολικό να κατασκευάσουμε τον πίνακα της ομάδας [14,κεφ 1<sup>ο</sup>,2<sup>ο</sup>].

Η ταυτοτική διεργασία παράγει μία κλάση τάξης 1. Ας θεωρήσουμε την διεργασία  $\hat{C}_4$ . Υπολογίζουμε όλα τα γινόμενα της μορφής  $\hat{X}\hat{C}_4\hat{X}^{-1}$ :

$$\begin{aligned} \hat{E}\hat{C}_4\hat{E}^{-1} &= \hat{C}_4, \\ \hat{C}_4\hat{C}_4\hat{C}_4^{-1} &= \hat{C}_4, \\ \hat{C}_2\hat{C}_4\hat{C}_2^{-1} &= \hat{C}_4, \\ \hat{C}_4^3\hat{C}_4(\hat{C}_4^3)^{-1} &= \hat{C}_4, \\ \hat{\sigma}_v\hat{C}_4(\hat{\sigma}_v)^{-1} &= \hat{\sigma}_v\hat{C}_4\hat{\sigma}_v = \hat{C}_4^3, \\ \hat{\sigma}_v'\hat{C}_4(\hat{\sigma}_v')^{-1} &= \hat{C}_4^3, \end{aligned}$$

$$\hat{\sigma}_d \hat{C}_4 (\hat{\sigma}_d)^{-1} = \hat{C}_4^3,$$

$$\hat{\sigma}_d' \hat{C}_4 (\hat{\sigma}_d')^{-1} = \hat{C}_4^3.$$

Συνεπώς, οι διεργασίες  $\hat{C}_4$  και  $\hat{C}_4^3$  αποτελούν μία κλάση τάξης 2.

Συνεχίζοντας την ίδια διαδικασία και με τις υπόλοιπες διεργασίες της ομάδας  $C_{4v}$ , λαμβάνουμε τις εξής κλάσεις:

$$\{\hat{E}\}, \{\hat{C}_4, \hat{C}_4^3\}, \{\hat{\sigma}_v, \hat{\sigma}_v'\}, \{\hat{\sigma}_d, \hat{\sigma}_d'\}.$$

Στο σημείο αυτό θα κάνουμε μερικές πολύ σημαντικές παρατηρήσεις:

(a) Οι κλάσεις διεργασιών συμμετρίας δεν είναι υποομάδες της ομάδας συμμετρίας που μελετάμε.

(b) Αν η ομάδα που μελετάμε είναι αβελιανή, τότε κάθε διεργασία αποτελεί κλάση.

Στο παραπάνω παράδειγμα είναι  $\hat{\sigma}_d \hat{\sigma}_v = \hat{C}_4^3 \neq \hat{C}_4 = \hat{\sigma}_v \hat{\sigma}_d$ , συνεπώς η ομάδα  $C_{4v}$  δεν είναι αβελιανή.

## 5.7 Κανόνες για τον καθορισμό των Κλάσεων

Στην προηγούμενη παράγραφο αναλύσαμε μία μέθοδο, που χρησιμεύει στο να καθορίσουμε τις κλάσεις μίας ομάδας συμμετρίας. Η μέθοδος που συζητήσαμε είναι εφαρμόσιμη για κάθε ομάδα συμμετρίας χώρου. Όμως, υπάρχει και ευκολότερη διαδικασία για τον ίδιο σκοπό. Για να προσδιορίσουμε το γινόμενο διεργασιών  $\hat{B} = \hat{X}\hat{A}\hat{X}^{-1}$ , δεν είναι ανάγκη να πάρουμε όλες τις διεργασίες  $\hat{X}$  που ανήκουν στην ομάδα συμμετρίας. Η διεργασία  $\hat{X}$  μπορεί να προσδιοριστεί ως εξής, από το ακόλουθο κανόνα:

$\hat{X}$  είναι μία διεργασία η οποία μεταφέρει το στοιχείο  $A$  στο στοιχείο  $B$ .

Άς εφαρμόσουμε τον παραπάνω κανόνα για την ομάδα συμμετρίας  $C_{4v}$ . Οι δύο ανακλάσεις  $\hat{\sigma}_v$  και  $\hat{\sigma}_v'$  αποτελούν μία κλάση, αφού είναι:

$$\hat{C}_4 \hat{\sigma}_v \hat{C}_4^{-1} = \hat{\sigma}_v'.$$

Από την άλλη πλευρά, η σχέση  $\hat{C}_4 \sigma_v = \sigma_v'$ , ισχύει για τα επίπεδα  $\sigma_v$  και  $\sigma_v'$ .

Συνεπώς, αν διαφορετικά επίπεδα συμμετρίας ταυτίζονται έπειτα από στροφή, τότε οι διεργασίες ανάκλασης ανήκουν στην ίδια κλάση. Επίσης, επειδή δεν υπάρχει διεργασία στην  $C_{4v}$ , η οποία να μεταφέρει το επίπεδο  $\sigma_v$  στο  $\sigma_d$ , οι ανακλάσεις  $\hat{\sigma}_v$  και  $\hat{\sigma}_d$  ανήκουν σε διαφορετικές κλάσεις. Υπάρχουν και αντίστοιχοι κανόνες για τους



μετασχηματισμούς στροφής. Στροφές ίδιας γωνίας γύρω από ισοδύναμους άξονες ανήκουν στην ίδια κλάση και έχουν την ίδια τάξη.

Αν ισχύει:

$$\hat{X}C(1) = C(2),$$

τότε ισχύει

$$\hat{C}(2) = \hat{X}\hat{C}(1)\hat{X}^{-1},$$

όπου  $\hat{C}(1)$  και  $\hat{C}(2)$  είναι στροφές γύρω από τους άξονες 1 και 2, γωνίας  $\varphi$ .

Ο διαχωρισμός των διεργασιών που ανήκουν σε μία ομάδα συμμετρίας σε κλάσεις, έχει ως αποτέλεσμα να μειώνει τον χρόνο εύρεσης των ισοδύναμων στοιχείων συμμετρίας. Τα ισοδύναμα στοιχεία συμμετρίας σχετίζονται με τις αντίστοιχες διεργασίες που ανήκουν στις ίδιες κλάσεις. Οι στροφές  $\hat{C}_n^m$  και  $\hat{C}_n^{-m}$ , (κατά την ίδια γωνία  $(2\pi/n)m$ , αλλά σε διαφορετικές κατευθύνσεις) ανήκουν στην ίδια κλάση μόνο αν η ομάδα συμμετρίας περιέχει μία διεργασία η οποία αντιστρέφει την κατεύθυνση του άξονα περιστροφής. Τέτοιες διεργασίες είναι η ανάκλαση  $\hat{\sigma}_v$  στο επίπεδο που βρίσκεται ο άξονας  $C_n$  και η στροφή  $\hat{C}_2$  γύρω από τον κάθετο άξονα  $C_2$ . Με άλλα λόγια ισχύουν οι ακόλουθες σχέσεις:

$$\hat{C}_n^{-m} = \hat{\sigma}_v \hat{C}_n^m (\hat{\sigma}_v)^{-1} \text{ και } \hat{C}_n^{-m} = \hat{C}_2 \hat{C}_n^m (\hat{C}_2)^{-1}.$$

Τα παραπάνω επιχειρήματα, μας οδηγούν στην σύνταξη κανόνων για τον προσδιορισμό των κλάσεων σε μία ομάδα συμμετρίας:

- (a) Δύο στροφές, κατά την ίδια γωνία, γύρω από διαφορετικούς άξονες, ανήκουν στην ίδια κλάση, αν υπάρχει διεργασία η οποία να φέρει σε ταύτιση τους άξονες.
- (b) Δύο στροφές  $\hat{C}_n^m$  και  $\hat{C}_n^{-m}$ , γύρω από τον ίδιο άξονα, ανήκουν στην ίδια κλάση, αν υπάρχει επίπεδο  $\sigma_v$  κάθετο στον άξονα ή οριζόντιος άξονας  $C_2$ . Στην περίπτωση αυτή ο  $C_n$  άξονας ονομάζεται δίπλευρος άξονας.
- (c) Δύο ανακλάσεις ανήκουν στην ίδια κλάση αν υπάρχει διεργασία που να φέρει τα αντίστοιχα επίπεδα σε ταύτιση.
- (d) Οι διεργασίες  $\hat{E}$  και  $\hat{I}$  αποτελούν κλάσεις.

## 5.8 Ομάδες Σημείου στον χώρο

### 5.8.1 Οι ομάδες στροφής $C_n$

Οι ομάδες  $C_n$  αποτελούνται από στροφές  $\hat{C}_n^m$ , γύρω από έναν άξονα  $C_n$ , τάξης  $n$ . Κρύσταλλοι με συμμετρία  $C_n$  δεν έχουν άλλα στοιχεία συμμετρίας, όπως επίπεδα η κέντρο συμμετρίας. Η ομάδα  $C_n$  είναι κυκλική και όλες οι διεργασίες  $\hat{C}_n^m$  είναι αντιμεταθετικές, επομένως κάθε διεργασία αποτελεί και μία κλάση της ομάδας  $C_n$  [14, κεφ 1<sup>ο</sup>, 2<sup>ο</sup>].

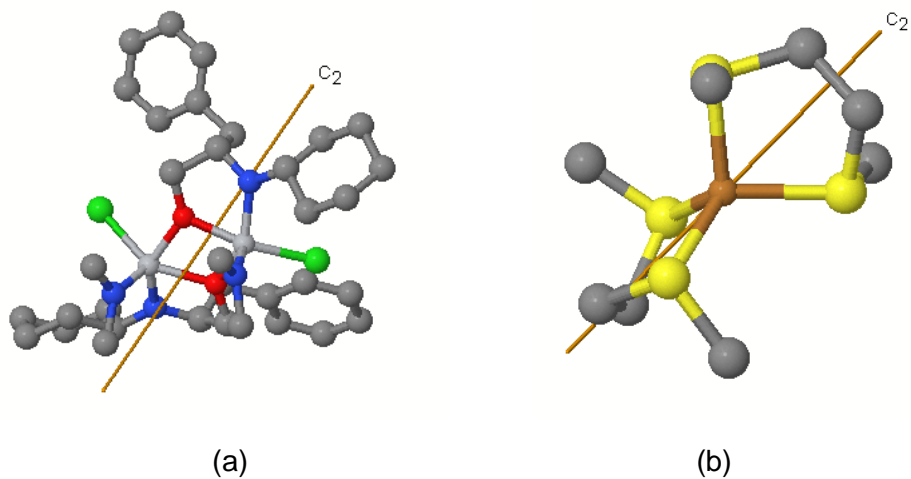
Η ομάδα  $C_1$  αποτελείται μόνο από την ταυτοτική διεργασία  $\hat{C}_1 = \hat{E}$ . Η συμμετρία αυτή έχει την μικρότερη δυνατή τάξη (Εικόνα 5.8.1.1).

Η ομάδα  $C_2$  αποτελείται από δύο διεργασίες,  $\hat{C}_2$  και  $\hat{E}$  (Εικόνα 5.8.1.2).

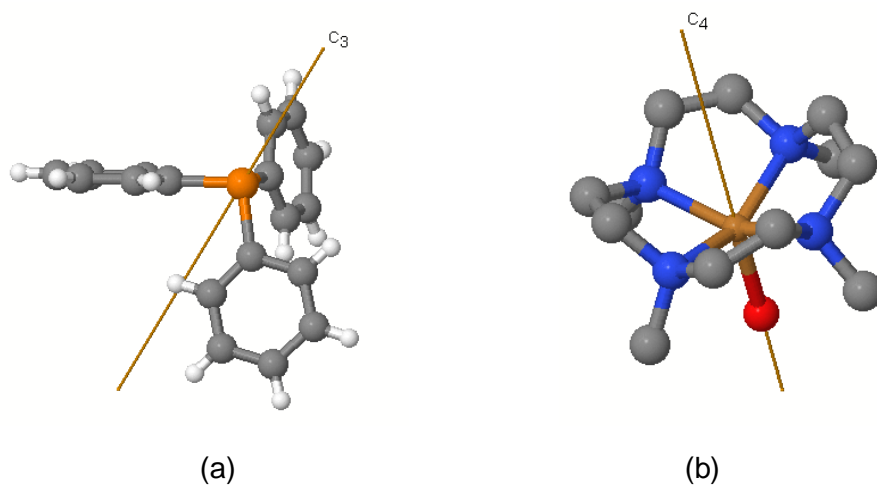
Η ομάδα  $C_3$  αποτελείται από τρεις διεργασίες,  $\hat{C}_3$ ,  $\hat{C}_3^2$  και  $\hat{E}$  (Εικόνα 5.8.1.3 (a)).

Η ομάδα  $C_4$  αποτελείται από τέσσερις διεργασίες,  $\hat{C}_4$ ,  $\hat{C}_4^2$ ,  $\hat{C}_4^3$  και  $\hat{E}$  (Εικόνα 5.8.1.3 (b)).

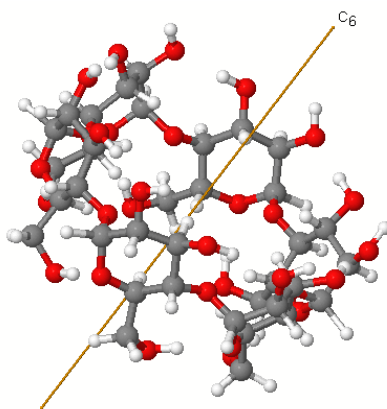
Η ομάδα  $C_6$  αποτελείται από έξι διεργασίες,  $\hat{C}_6$ ,  $\hat{C}_6^2$ ,  $\hat{C}_6^3$ ,  $\hat{C}_6^4$ ,  $\hat{C}_6^5$ ,  $\hat{E}$  (Εικόνα 5.8.1.4).



Εικόνα 5.8.1.2: Μόρια με συμμετρία  $C_2$ : (a) διμερές τιτάνιο, (b) bis(dth)copper(I)



Εικόνα 5.8.1.3: Μόριο συμμετρίας  $C_3$  και  $C_4$  αντίστοιχα: (a) τριφαινυλοφωσφίνη, (b) tetra-aza cooper(II)



Εικόνα 5.8.1.4: Μόριο συμμετρίας  $C_6$ : α-κυκλοδεξτρίνη

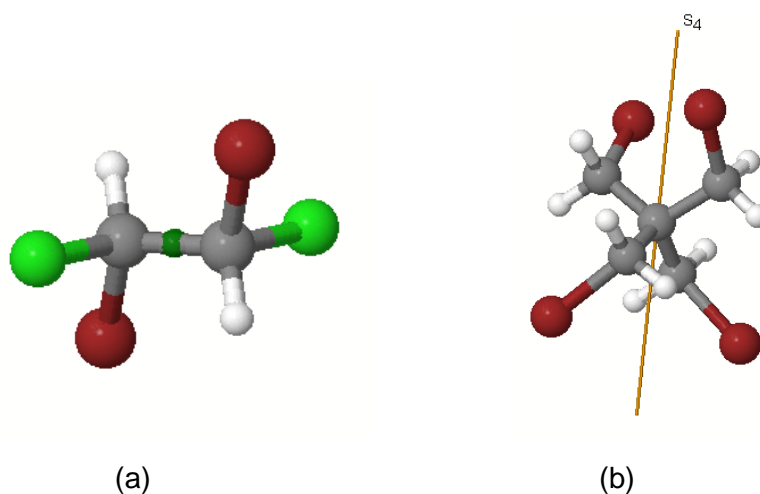
### 5.8.2 Οι ομάδες στροφοκατοπτρισμού $S_{2n}$

Οι ομάδες  $S_{2n}$  αποτελούνται από όλες τις περιστροφικές ανακλάσεις άρτιας τάξης. Η ομάδα  $S_{2n}$  δεν περιέχει περιστροφικές ανακλάσεις περιπτής τάξης, αφού η αντίστοιχη διεργασία δεν είναι ένα νέο στοιχείο συμμετρίας. Όλες οι ομάδες  $S_{2n}$  είναι κυκλικές και, επομένως κάθε διεργασία αποτελεί και μία κλάση [14, κεφ 1<sup>ο</sup>, 2<sup>ο</sup>].

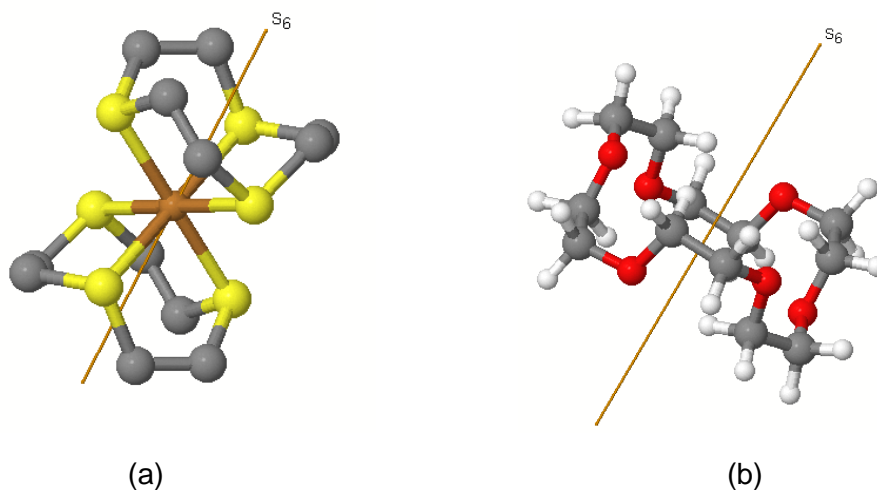
Η ομάδα  $S_2$  αποτελείται από δύο διεργασίες:  $\hat{E}$  και  $\hat{I}$ . Ονομάζεται ομάδα με κέντρο συμμετρίας και συμβολίζεται με  $C_i$  (Εικόνα 5.8.2.1 (a)).

Η ομάδα  $S_4$  αποτελείται από τέσσερις διεργασίες:  $\hat{E}$ ,  $\hat{C}_2$ ,  $\hat{S}_4$ ,  $\hat{S}_4^3$  (Εικόνα 5.8.2.1 (b)).

Η ομάδα  $S_6$  αποτελείται από έξι διεργασίες:  $\hat{E}$ ,  $\hat{C}_3$ ,  $\hat{C}_3^2$ ,  $\hat{I}$ ,  $\hat{C}_3^2\hat{\sigma}_h \equiv \hat{S}_6^5$  και  $\hat{S}_6$  (Εικόνα 5.8.2.2).



Εικόνα 5.8.2.1: Μόρια συμμετρίας  $C_i$  και  $S_4$  αντίστοιχα: (a) 1,2 διχλωρο - 1,2 διβρωμο αιθανιο, (b) τετράβρωμο - νέο πεντάνιο.



Εικόνα 5.8.2.2: Μόρια συμμετρίας  $S_6$ : (a) *bis(9-ane-S3)cooper(II)* , (b) *18-crown-6*.

### 5.8.3 Οι ομάδες $C_{nh}$

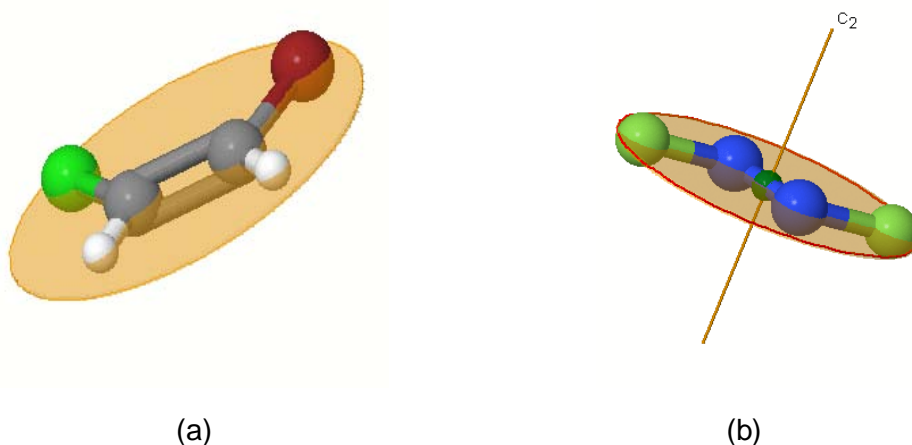
Οι ομάδες  $C_{nh}$  αποτελούνται από άξονες συμμετρίας  $C_n$  και ένα επίπεδο συμμετρίας  $\sigma_h$  κάθετο στον άξονα. Αναλυτικότερα, αποτελούνται από  $2n$  διεργασίες:  $n$  στροφές και  $n$  περιστροφικές ανακλάσεις. Αν το  $n$  είναι άρτιος, η ομάδα  $C_{nh}$  περιέχει κέντρο συμμετρίας.

Η ομάδα  $C_{1h}$  αποτελείται από δύο διεργασίες:  $\hat{E}$  και  $\hat{\sigma}_h$ . Συμβολίζεται με  $C_s$ . Στην ομάδα αυτή έχουμε μόνο επίπεδα συμμετρίας (Εικόνα 5.8.3.1 (a)).

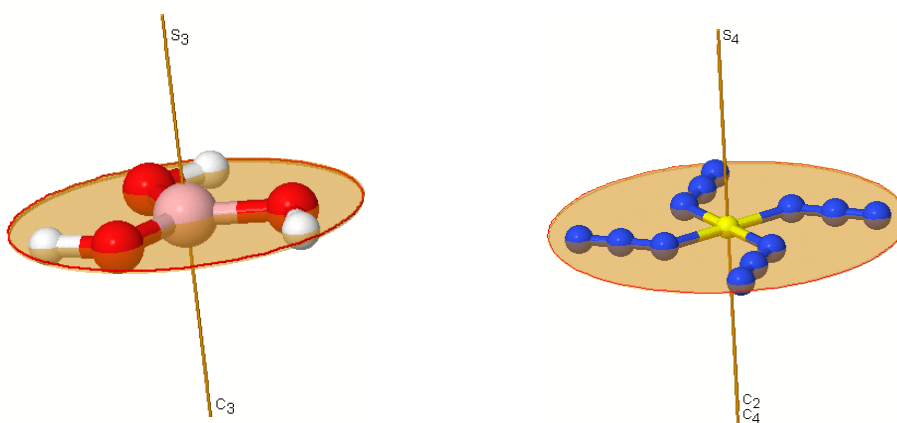
Η ομάδα  $C_{2h}$  αποτελείται από τέσσερις διεργασίες:  $\hat{E}$ ,  $\hat{\sigma}_h$ ,  $\hat{C}_2$ ,  $\hat{I}$  (Εικόνα 5.8.3.1 (b)).

Η ομάδα  $C_{3h}$  αποτελείται από έξι διεργασίες:  $\hat{E}$ ,  $\hat{C}_3$ ,  $\hat{C}_3^2$ ,  $\hat{\sigma}_h$ ,  $\hat{S}_3$ ,  $\hat{S}_3^5$  (Εικόνα 5.8.3.2 (a)).

Η ομάδα  $C_{4h}$  αποτελείται από οκτώ διεργασίες:  $\hat{E}$ ,  $\hat{C}_4$ ,  $\hat{C}_4^2$ ,  $\hat{C}_4^3$ ,  $\hat{I}$ ,  $\hat{\sigma}_h$ ,  $\hat{S}_4$ ,  $\hat{S}_4^3$  (Εικόνα 5.8.3.2 (b)).



Εικόνα 5.8.3.1: Μόρια συμμετρίας  $C_s$  και  $C_{2h}$  αντίστοιχα: (a) 1 χλώρο-2 βρώμο αιθένιο, (b) δίφθορο-διαζίνη [16].



Εικόνα 5.8.3.2: Μόρια συμμετρίας  $C_{3h}$  και  $C_{4h}$  αντίστοιχα: (a) βορικό οξύ, (b) tetraazidocooper(II).

### 5.8.4 Οι ομάδες $C_{nv}$

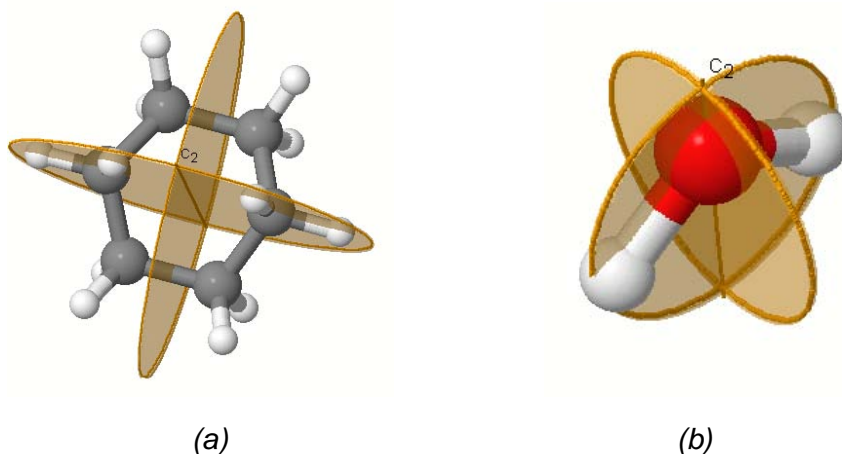
Οι ομάδες  $C_{nv}$  αποτελούνται από έναν άξονα  $C_n$  και ένα επίπεδο ανάκλασης  $\sigma_v$ . Ο άξονας  $C_n$  και το επίπεδο  $\sigma_v$  δημιουργούν επιπλέον στοιχεία συμμετρίας, τα οποία είναι  $n - 1$  επίπεδα παράλληλα με τον άξονα, τα οποία διχοτομούνται σε γωνία  $\pi/n$ . Αναλυτικότερα, οι ομάδες  $C_{nv}$  αποτελούνται από  $2n$  διεργασίες:  $n$  στροφές  $\hat{C}_n^m$  και  $n$  ανακλάσεις  $\hat{\sigma}_v$ . Επίσης, ο άξονας  $C_n$  είναι δίπλευρος. Για περιπτώ  $n$  ( $n = 2k + 1$ ), όλες οι ανακλάσεις συνιστούν μία κλάση. Οι στροφές  $\hat{C}_n^m$  και  $\hat{C}_n^{-m}$  είναι συζυγείς διεργασίες και αποτελούν  $k$  το πλήθος κλάσεις. Η ταυτοτική διεργασία είναι μία κλάση μόνη της. Συνεπώς, οι ομάδες  $C_{2k+1,v}$  έχουν  $k + 2$  κλάσεις. Όταν ο  $n$  είναι

άρτιος, οι ανακλάσεις διαχωρίζονται σε δύο κλάσεις, και άρα οι ομάδες  $C_{2k,v}$  έχουν  $k + 3$  κλάσεις.

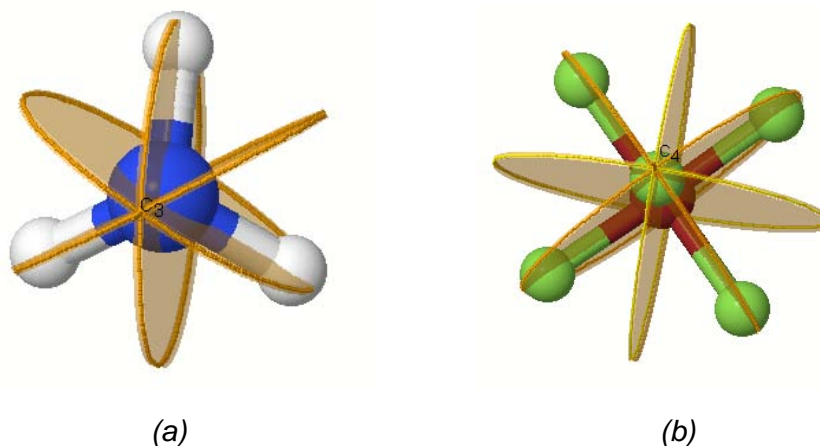
Η ομάδα  $C_{2v}$  αποτελείται από έναν άξονα  $C_2$  και δύο κάθετα επίπεδα συμμετρίας  $\sigma_v$  και  $\sigma_v'$ . Δηλαδή αποτελείται από τέσσερις διεργασίες:  $\hat{E}$ ,  $\hat{C}_2$ ,  $\hat{\sigma}_v$  και  $\hat{\sigma}_v'$ . Επίσης, οι ανακλάσεις  $\hat{\sigma}_v$  και  $\hat{\sigma}_v'$  ανήκουν στην ίδια κλάση, αφού τα αντίστοιχα επίπεδα είναι ισοδύναμα. Άρα, η  $C_{2v}$  έχει τρεις κλάσεις:  $\hat{E}$ ,  $\hat{C}_2$ ,  $2\hat{\sigma}_v$  (Εικόνα 5.8.4.1 (a),(b)).

Η ομάδα  $C_{3v}$  αποτελείται από έναν άξονα  $C_3$  και τρία επίπεδα συμμετρίας  $\sigma_v$ ,  $\sigma_v'$ ,  $\sigma_v''$  και έχει έξι διεργασίες συμμετρίας:  $\hat{E}$ ,  $\hat{C}_3$ ,  $\hat{C}_3^2$ ,  $\hat{\sigma}_v$ ,  $\hat{\sigma}_v'$ ,  $\hat{\sigma}_v''$ , οι οποίες διαχωρίζονται σε τρεις κλάσεις:  $2\hat{C}_3$  και  $3\hat{\sigma}_v$ . Ο άξονας  $C_3$  είναι δίπλευρος (σε αντίθεση με τους αντίστοιχους άξονες των ομάδων  $C_3$  και  $C_{3h}$ ) και τα επίπεδα συμμετρίας ισοδύναμα (Εικόνα 5.8.4.2 (a)).

Η ομάδα  $C_{4v}$  αποτελείται από οκτώ διεργασίες:  $\hat{E}$ ,  $\hat{C}_4$ ,  $\hat{C}_2$ ,  $\hat{C}_4^3$ ,  $\hat{\sigma}_v$ ,  $\hat{\sigma}_v'$ ,  $\hat{\sigma}_d$ ,  $\hat{\sigma}_d'$  οι οποίες διαχωρίζονται σε πέντε κλάσεις:  $\hat{E}$ ,  $2\hat{C}_4$ ,  $\hat{C}_2$ ,  $2\hat{\sigma}_v$ ,  $2\hat{\sigma}_d$  (Εικόνα 5.8.4.2 (b)).



Εικόνα 5.8.4.1: Μόρια συμμετρίας  $C_{2v}$ : (a) κυκλοεξάνιο, (b) νερό.



Εικόνα 5.8.4.2: Μόρια συμμετρίας  $C_{3v}$  και  $C_{4v}$  αντίστοιχα: (a) αμμωνία, (b) πενταβρωμιούχος φωσφόρος.

### 5.8.5 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  $\pi/n$ . Οι διεδρικές ομάδες δεν έχουν επίπεδα συμμετρίας. Η ομάδα  $D_1$  είναι ισομορφική με την  $C_2$ , επομένως δεν θα καταμετρηθεί ξεχωριστά. Τέλος, σε όλες τις ομάδες  $D_n$  ο άξονας  $C_n$  είναι δίπλευρος και οι οριζόντιοι άξονες είναι ισοδύναμοι για περιττό  $n = 2k + 1$ , ενώ διαχωρίζονται σε δύο σύνολα αν  $n = 2k$  είναι άρτιο. Οι ομάδες  $D_{2k}$  έχουν  $k + 3$  κλάσεις, ενώ οι ομάδες  $D_{2k+1}$  έχουν  $k + 2$  [14, κεφ 1<sup>ο</sup>, 2<sup>ο</sup>].

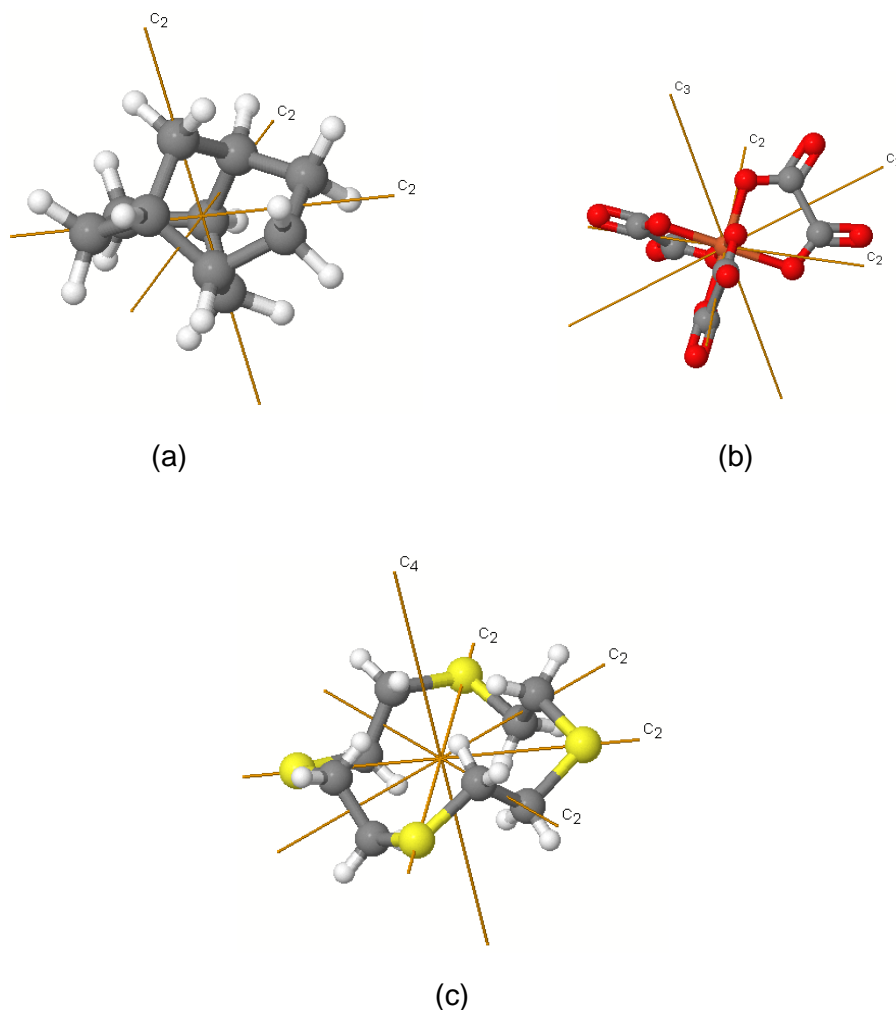
Η ομάδα  $D_2$  περιλαμβάνει τέσσερις διεργασίες:  $\hat{E}, \hat{C}_2, \hat{C}'_2, \hat{C}''_2$ . Δεν υπάρχει διεργασία που να ταυτίζει τους αντίστοιχους άξονες, συνεπώς κάθε διεργασία είναι και μία κλάση (Εικόνα 5.8.5.1 (a)).

Η ομάδα  $D_3$  περιλαμβάνει έξι διεργασίες:  $\hat{E}, \hat{C}_2, \hat{C}'_2, \hat{C}''_2, \hat{C}_3, \hat{C}_3^2$ . Ο άξονας  $C_3$  είναι δίπλευρος και άρα οι διεργασίες  $\hat{C}_3, \hat{C}_3^2$  αποτελούν μία κλάση. Συνολικά, αυτή η ομάδα έχει τρεις κλάσεις:  $\hat{E}, 3\hat{C}_2, 2\hat{C}_3$  (Εικόνα 5.8.5.1 (b)).

Η ομάδα  $D_4$  περιλαμβάνει οκτώ διεργασίες, οι οποίες διαχωρίζονται σε 5 κλάσεις:

$$\hat{E}, 2\hat{C}_4, \hat{C}_2, 2\hat{C}'_2, 2\hat{C}''_2 \text{ (Εικόνα 5.8.5.1 (c)).}$$





Εικόνα 5.8.5.1: Μόρια συμμετρίας  $D_2$ ,  $D_3$ ,  $D_4$  αντίστοιχα: (a) *twistane*, (b) *tris(oxalato)iron(III)*, (c) *tetrathiacyclododecane*.

### 5.8.6 Οι ομάδες $D_{nh}$

Οι ομάδες  $D_{nh}$  προκύπτουν από τις ομάδες  $D_n$ , προσθέτοντας ένα οριζόντιο επίπεδο ανάκλασης  $\sigma_h$  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  $\sigma_v$ , 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  $\sigma_h$  και  $n$  περιστροφικές ανακλάσεις  $\hat{C}_n^m \hat{\sigma}_h$ .

Οι ομάδες  $D_{nh}$  έχουν τις διπλές κλάσεις από τις  $D_n$ . Για περιττό  $n$ , οι ανακλάσεις συνιστούν μία κλάση, ενώ για άρτιο  $n$  σχηματίζουν δύο κλάσεις. Οι περιστροφικές ανακλάσεις είναι  $\hat{C}_n^m \hat{\sigma}_h$  είναι συζυγείς ανά ζεύγη. Επίσης, ομάδα  $D_{nh}$  με άρτια τάξη, έχει κέντρο συμμετρίας.

Η ομάδα  $D_{2h}$  σχηματίζεται από την  $D_2$  προσθέτοντας ένα οριζόντιο επίπεδο ανάκλασης  $\sigma_h$ . Λαμβάνουμε τις οκτώ διεργασίες, καθεμία εκ των οποίων είναι και μία κλάση:

$$\hat{E}, \hat{C}_2(x), \hat{C}_2(y), \hat{C}_2(z), \hat{\sigma}_h, \hat{I}, \hat{\sigma}_v(xz), \hat{\sigma}_v(yz) \text{ (Εικόνα 5.8.6.1(a))}.$$

Η ομάδα  $D_{2h}$  μπορεί να γραφεί και ως καρτεσιανό γινόμενο των  $D_2$  και  $C_s$ :

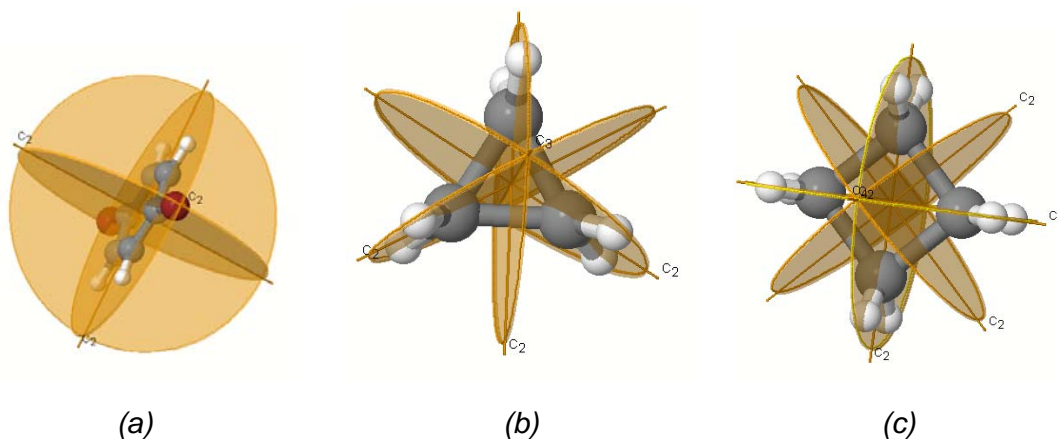
$$D_{2h} = D_2 \times C_s.$$

Η ομάδα  $D_{3h}$  είναι το καρτεσιανό γινόμενο  $D_3 \times C_s$ . Οι δώδεκα διεργασίες της ομάδας  $D_{3h}$  διαχωρίζονται σε 5 κλάσεις, ενώ παρατηρούμε και την μη ύπαρξη κέντρου συμμετρίας. Οι κλάσεις είναι:

$$\hat{E}, \hat{\sigma}_h, 2\hat{C}_3, 2\hat{S}_3, 3\hat{C}_2', 3\hat{\sigma}_v \text{ (Εικόνα 5.8.6.1(b))}.$$

Η ομάδα  $D_{4h}$  περιλαμβάνει δεκαέξι διεργασίες του καρτεσιανού γινομένου  $D_4 \times C_s$ , οι οποίες κατανέμονται σε δέκα κλάσεις:

$$\hat{E}, 2\hat{C}_4, \hat{C}_2, 2\hat{C}_2', \hat{\sigma}_h, 2\hat{\sigma}_v, 2\hat{\sigma}_d, 2\hat{S}_4, \hat{I} \text{ (Εικόνα 5.8.6.1(c))}.$$



Εικόνα 5.8.6.1: Μόρια συμμετρίας  $D_{2h}$ ,  $D_{3h}$ ,  $D_{4h}$  αντίστοιχα: (a) *p*-διβρωμο-βενζόλιο, (b) κυκλοπροπάνιο, (c) κυκλοβουτάνιο.

### 5.8.7 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  $\hat{C}_2'\hat{\sigma}_d$ .

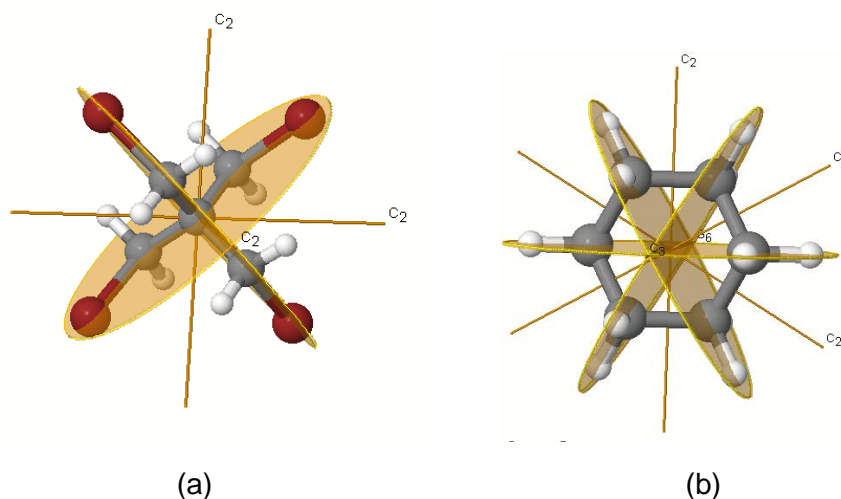
Στην γενική περίπτωση, οι ομάδες  $D_{nd}$  άρτιας τάξης ( $n = 2k$ ), αποτελούνται από  $2k + 3$  το πλήθος κλάσεις, ενώ για  $n = 2k + 1$  λαμβάνουμε  $2k + 4$  κλάσεις. Στην δεύτερη περίπτωση συμπεριλαμβάνεται και η ύπαρξη κέντρου συμμετρίας.

Η ομάδα  $D_{2d}$  λαμβάνεται από την  $D_2$  προσθέτοντας και την περιστροφική ανάκλαση  $\hat{C}_2'\hat{\sigma}_d$ . Οι διεργασίες  $\hat{S}_4$  και  $\hat{S}_4^3$  ανήκουν στην ίδια κλάση. Οι οκτώ διεργασίες της  $D_{2d}$  διαχωρίζονται σε πέντε κλάσεις:

$$\hat{E}, \hat{C}_2, 2\hat{S}_4, 2\hat{C}_2', 2\hat{\sigma}_d \text{ (Εικόνα 5.8.7.1(a))}.$$

Η ομάδα  $D_{3d}$  αντιμετωπίζεται ανάλογα. Οι δώδεκα διεργασίες της, διαχωρίζονται σε έξι κλάσεις:

$$\hat{E}, 2\hat{S}_6, 2\hat{C}_3, \hat{I}, 3\hat{C}_2', 3\hat{\sigma}_d \text{ (Εικόνα 5.8.7.1(b))}.$$



Εικόνα 5.8.7.1: Μόρια συμμετρίας  $D_{2d}$ ,  $D_{3d}$  αντίστοιχα: (a) τετράβρωμο νεοπεντάνιο, (b) κυκλοεξάνιο.

### 5.8.8 Οι κυβικές ομάδες ( $T, T_d, T_h, O, O_h$ )

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.

Η ομάδα  $T$  έχει ως στοιχεία συμμετρίας τους άξονες ενός κανονικού τετραέδρου. Οι κορυφές του κανονικού τετραέδρου, ταυτίζονται με τις μη γειτονικές κορυφές ενός κύβου. Η ομάδα  $T$  έχει δώδεκα διεργασίες που διαχωρίζονται σε 4 κλάσεις:

$$\hat{E}, 4\hat{C}_3, 4\hat{C}_3^2, 3\hat{C}_2 \text{ (Εικόνα 5.8.8.1(a))}.$$

Η ομάδα  $T_h$  είναι το καρτεσιανό γινόμενο  $T \times C_i$  (Εικόνα 5.8.8.1(b)).

Η ομάδα  $T_d$  παράγεται από την ομάδα  $T$  αν προσθέσουμε έξι  $\sigma_d$  επίπεδα, (καθένα από τα οποία τέμνει τους άξονες  $C_3$  και  $C_2$ ), καθώς και τρεις άξονες περιστροφικής ανάκλασης  $S_4$  (οι οποίοι ταυτίζονται με τους  $C_2$  άξονες περιστροφής). Η ομάδα αυτή έχει 24 διεργασίες διαχωριζόμενες σε 5 κλάσεις:

$$\hat{E}, 8\hat{C}_3, 6\hat{\sigma}_d, 6\hat{S}_4, 3\hat{C}_2 \text{ (Εικόνα 5.8.8.1(c))}.$$

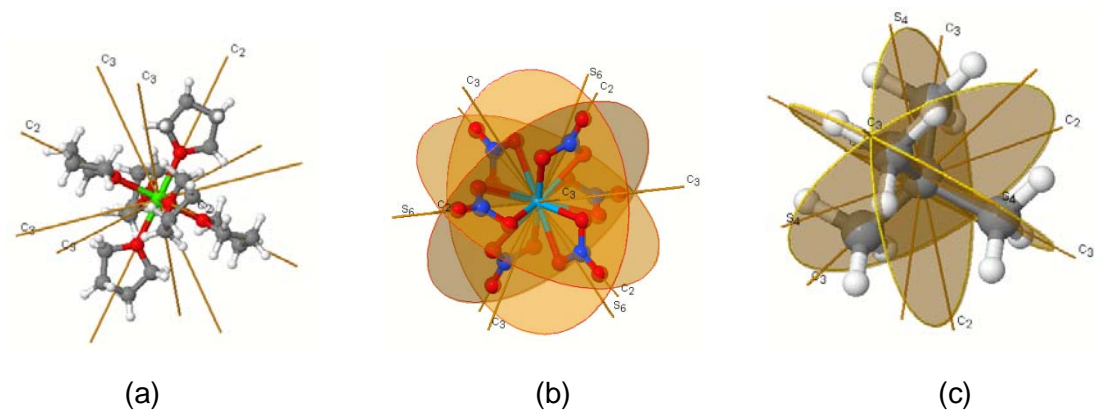
Η ομάδα  $O$  αποτελείται από τις διεργασίες συμμετρίας του κύβου ή του κανονικού οκταέδρου (βλ. εικόνες παραγράφου 2.2). Οι 24 διεργασίες διαχωρίζονται σε 5 κλάσεις:

$$\hat{E}, 8\hat{C}_3, 6\hat{C}_2, 6\hat{C}_4, 3\hat{C}_4^2 \text{ (Εικόνα 5.8.8.2(a))}.$$

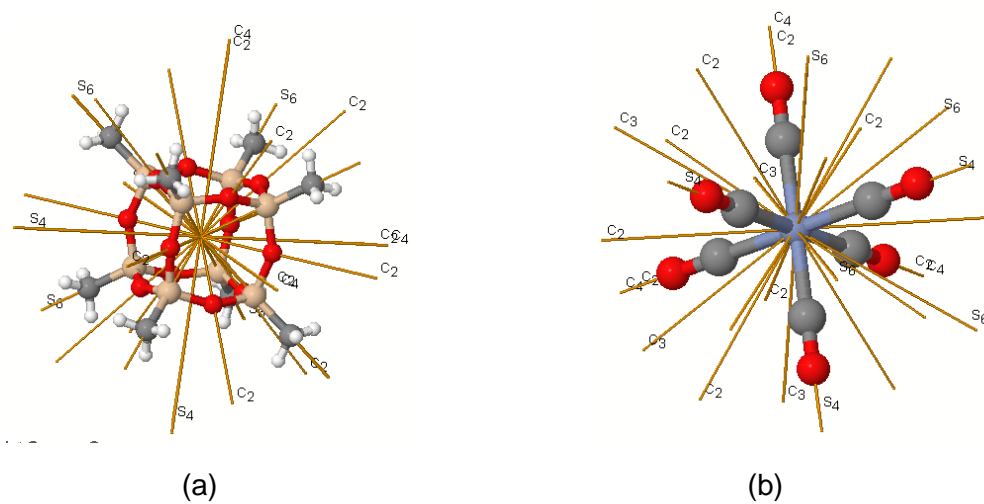
Η ομάδα  $O_h$  είναι το καρτεσιανό γινόμενο  $O \times C_i$ . Η συμμετρία είναι η ίδια με ενός κύβου ή οκταέδρου. Σε σχέση με την ομάδα  $O$ , εδώ έχουμε τις διπλάσιες διεργασίες (48), οι οποίες διαχωρίζονται σε 10 κλάσεις:

$$\hat{E}, 8\hat{C}_3, 6\hat{C}_2, 6\hat{C}_4, 3\hat{C}_4^2, \hat{I}, 6\hat{S}_4, 8\hat{S}_6, 3\hat{\sigma}_h, 6\hat{\sigma}_d \text{ (Εικόνα 5.8.8.2(b))}.$$

Η ομάδα  $O_h$  διαθέτει την μεγαλύτερη σε τάξη συμμετρία που είναι δυνατόν να υπάρχει σε έναν κρύσταλλο [14, κεφ 1<sup>ο</sup>, 2<sup>ο</sup>].



Εικόνα 5.8.8.1: Μόρια συμμετρίας  $T$ ,  $T_h$  και  $T_d$  αντίστοιχα: (a)  $[Ca(THF)_6]^{2+}$ , (b)  $Th(NO_3)_6^{2-}$ , (c) νεοπεντάνιο .



Εικόνα 5.8.8.2: Μόρια συμμετρίας  $O$ ,  $O_h$  αντίστοιχα: (a)  $Si_8O_{12}(CH)_3$ , (b)  $Cr(CO)_6$ .

## 5.9 Κρυσταλλογραφικές Ομάδες Σημείων

Σε αντίθεση με τα μόρια, οι κρύσταλλοι δεν μπορούν έχουν άξονες συμμετρίας  $C_5$ ,  $C_7$ ,  $C_8$  κτλ. Αυτό προκύπτει από τον κρυσταλλογραφικό περιορισμό (βλ. παράγραφο 3.1). Μόνο 32 ομάδες σημείων ικανοποιούν αυτόν τον περιορισμό. Η κατανομή των των ομάδων σημείων στα κρυσταλλικά συστήματα φαίνεται στον ακόλουθο πίνακα (Πίνακας 5.10.1) [14, κεφ 1<sup>ο</sup>, 2<sup>ο</sup>].

Πίνακας 5.10.1

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

## 5.10 Κανόνες για τον προσδιορισμό συμμετρίας κρυστάλλων

Στόχος αυτής της παραγράφου είναι να καταγραφεί ένα σύνολο κανόνων, σύμφωνα με τους οποίους να προσδιορίζεται η ομάδα σημείου για έναν κρύσταλλο, ανάλογα με τα στοιχεία συμμετρίας που το χαρακτηρίζουν [14, κεφ 1<sup>ο</sup>, 2<sup>ο</sup>]. Συγκεκριμένα:

**Βήμα 1<sup>ο</sup>:** Ψάχνουμε άξονα συμμετρίας  $C_n$  με την ψηλότερη δυνατή τάξη. Αν υπάρχει μοναδικός άξονας συμμετρίας  $C_n$ , συνεχίζουμε στο βήμα 2. Αν ο κρύσταλλος έχει τρεις άξονες συμμετρίας  $C_4$ , τότε ανήκει σε μία από τις  $O_h, O$ . Αν έχει τέσσερις άξονες συμμετρίας  $C_3$  τότε ανήκει σε μία από τις  $T$  (δεν υπάρχουν επίπεδα συμμετρίας και κέντρο συμμετρίας),  $T_h$  (υπάρχει κέντρο συμμετρίας),  $T_d$  (υπάρχουν έξι επίπεδα συμμετρίας και τρεις άξονες περιστροφικής ανάκλασης  $S_4$ ).

**Βήμα 2<sup>ο</sup>:** Αν ο κρύσταλλος έχει έναν και μόνο άξονα συμμετρίας  $C_n$ , προσδιορίζουμε αν υπάρχουν  $n$  το πλήθος άξονες  $C'_2$  κάθετοι στον άξονα  $C_n$ . Αν υπάρχουν τέτοιοι άξονες, τότε ο κρύσταλλος ανήκει σε μία από τις διεδρικές ομάδες. Αν δεν υπάρχουν επιπλέον στοιχεία συμμετρίας, τότε ανήκει στην  $D_n$ . Αν υπάρχουν οριζόντια επίπεδα συμμετρίας, τότε ανήκει στην  $D_{nh}$ . Αν δεν υπάρχουν οριζόντια επίπεδα συμμετρίας και υπάρχουν κάθετα, τότε ανήκει στην  $D_{nv}$ .

**Βήμα 3<sup>ο</sup>:** Αν ένας κρύσταλλος έχει έναν κατακόρυφο άξονα, αλλά όχι οριζόντιους  $C'_2$  άξονες περιστροφής, είναι αναγκαίο να προσδιορίσουμε την ύπαρξη ή την μη ύπαρξη αξόνων περιστροφικής ανάκλασης  $S_{2n}$ . Αν δεν υπάρχουν άξονες περιστροφικής ανάκλασης, ο κρύσταλλος ανήκει στην  $C_n$ . Αν υπάρχουν επιπλέον οριζόντια ή κάθετα επίπεδα συμμετρίας τότε ανήκει στις  $C_{nh}$  ή  $C_{nd}$  αντίστοιχα.

**Βήμα 4<sup>ο</sup>:** Αν ο κρύσταλλος έχει μόνο ένα επίπεδο συμμετρίας ανήκει στην  $C_s$ , ενώ αν έχει μόνο κέντρο συμμετρίας ανήκει στην  $C_i$ .

# 6

## Στοιχεία Θεωρίας

### Αναπαραστάσεων

#### 6.1 Αναπαραστάσεις Διεργασιών

##### 6.1.1 Η ταυτοτική διεργασία

Ένα σημείο στο χώρο με συντεταγμένες  $(x, y, z)$  που υφίσταται την ταυτοτική διεργασία αναπαρίσταται μέσω του μοναδιαίου πίνακα ως εξής [15, κεφ4<sup>ο</sup>]:

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

##### 6.1.2 Η ανάκλαση σε επίπεδο

Ένα σημείο στο χώρο με συντεταγμένες  $(x, y, z)$  που ανακλάται στα κύρια καρτεσιανά επίπεδα (επίπεδα  $xy, yz, zx$ ) αναπαρίσταται ως εξής [15, κεφ4<sup>ο</sup>]:

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

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



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

### 6.1.3 Η αναστροφή ως προς κέντρο συμμετρίας

Ένα σημείο στο χώρο με συντεταγμένες  $(x, y, z)$  που αναστρέφεται ως προς το κέντρο συμμετρίας  $O(0,0,0)$  αναπαρίσταται ως εξής:

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

### 6.1.4 Η περιστροφή γύρω από άξονα συμμετρίας

Ένα σημείο στο χώρο με συντεταγμένες  $(x, y, z)$  που περιστρέφεται γύρω από έναν άξονα, έστω παράλληλος προς τον  $z'z$  αναπαρίσταται μέσω του πίνακα:

$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ , αφού οι συντεταγμένες κατά τον άξονα  $z'z$  δεν αλλάζουν. Θα βρούμε

τα υπόλοιπα στοιχεία του πίνακα λύνοντας ένα διδιάστατο πρόβλημα.

Έστω σημείο  $P \in \mathbb{R}^2$  με συντεταγμένες  $(x, y)$  [15, κεφ4<sup>ο</sup>]. Το διάνυσμα που αναπαριστά την θέση ενός διανύσματος  $r$  γράφεται:

$$r = xi + yj$$

όπου  $i, j$  τα μοναδιαία διανύσματα κατά μήκος των αξόνων  $x, y$ .

Στρέφουμε τους άξονες κατά γωνία  $\varphi$  και λαμβάνουμε τις σχέσεις::

$$x_2 = x_1 \cos\varphi + y_1 \sin\varphi$$

$$y_2 = -x_1 \sin\varphi + y_1 \cos\varphi$$

Συνεπώς, έχουμε:  $a_{11} = \cos\varphi$ ,  $a_{12} = \sin\varphi$ ,  $a_{21} = -\sin\varphi$ ,  $a_{22} = \cos\varphi$ .

Άρα, ο πίνακας αναπαράστασης περιστροφής (σύμφωνα με τους δείκτες του ρολογιού) γύρω από άξονα παράλληλο προς τον  $z'z$  είναι:

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

### 6.1.5 Η περιστροφική ανάκλαση γύρω από άξονα

Ένα σημείο στο χώρο με συντεταγμένες  $(x, y, z)$  που περιστρέφεται γύρω από έναν άξονα, έστω παράλληλος προς τον  $z'z$ , και στη συνέχεια ανακλάται σε ένα επίπεδο  $xy$ . Η περιστροφική ανάκλαση (σύμφωνα με τους δείκτες του ρολογιού) αναπαρίσταται ως εξής:

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

Οι πίνακες:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \text{ λέγονται και πίνακες μετασχηματισμού.}$$

## 6.2 Αναπαράστασεις Ομάδων Σημείου

Τα στοιχεία συμμετρίας, που έχουν μελετηθεί στην παράγραφο 5.2, αναπαρίσταται από τους πίνακες μετασχηματισμού [15, κεφ4<sup>ο</sup>].

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

Δίνουμε ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα, θεωρώντας την ομάδα σημείου  $C_{2v}$ . Η ομάδα  $C_{2v}$  αποτελείται από τις εξής διεργασίες:

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

Ας θεωρήσουμε ότι ο  $C_2$  άξονας περιστροφής ταυτίζεται με τον  $z'z$ , συνεπώς οι ανακλάσεις  $\sigma_v, \sigma'_v$  θα έχουν επίπεδα ανάκλασης  $xz$  και  $yz$  αντίστοιχα. Οι πίνακες αναπαράστασης των διεργασιών συμμετρίας της ομάδας  $C_{2v}$  είναι:

$$E: \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad C_2: \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \sigma_v: \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \sigma'_v: \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Η παραπάνω ομάδα πινάκων είναι μία αναπαράσταση της ομάδας  $C_{2v}$ . Οι αναπαραστάσεις μίας ομάδας μπορεί να είναι και περισσότερες από μία, όπως για παράδειγμα στην ομάδα που μελετάμε υπάρχουν 4 της μορφής 1, -1:

$$\begin{array}{cccc} E & C_2 & \sigma_v & \sigma'_v \\ \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \end{array}$$

### 6.3 Ανάγωγες και Αναγωγίσιμες Αναπαραστάσεις

Έστω οι πίνακες  $\mathcal{E}, \mathcal{A}, \mathcal{B}, \dots$  οι οποίοι αποτελούν αναπαράσταση μίας ομάδας σημείου. Θεωρώντας ως πίνακα μετασχηματισμού τον πίνακα  $\mathcal{M}$ , λαμβάνουμε ένα νέο σύνολο πινάκων της μορφής:

$$\mathcal{E}' = \mathcal{M}^{-1}\mathcal{E}\mathcal{M}$$

$$\mathcal{A}' = \mathcal{M}^{-1}\mathcal{A}\mathcal{M}$$

$$\mathcal{B}' = \mathcal{M}^{-1}\mathcal{B}\mathcal{M}$$

...

#### **Θεώρημα 6.3.1:**

Αν  $\mathcal{A}, \mathcal{B}$  είναι μία αναπαράσταση μίας ομάδας σημείου, τότε και οι όμοιοι πίνακες  $\mathcal{A}', \mathcal{B}'$  αποτελούν μία άλλη αναπαράσταση της ίδιας ομάδας σημείου.

#### **Απόδειξη:**

Υποθέτουμε ότι  $\mathcal{A}\mathcal{B} = \mathcal{C}$ . Είναι:  $\mathcal{A}'\mathcal{B}' = \mathcal{M}^{-1}\mathcal{A}\mathcal{M}\mathcal{M}^{-1}\mathcal{B}\mathcal{M} = \mathcal{M}^{-1}\mathcal{A}\mathcal{B}\mathcal{M} = \mathcal{C}'$ .

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 (στο σημείο αυτό παρουσιάζουμε το αποτέλεσμα χωρίς απόδειξη):

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

Συνεπώς, ο πολλαπλασιασμός των πινάκων  $\mathcal{A}', \mathcal{B}'$  είναι πολλαπλασιασμός των αντίστοιχων διαγώνιων block πινάκων [15, κεφ4<sup>ο</sup>]. Δηλαδή έχουμε:

$$\mathcal{A}'_1 \mathcal{B}'_1 = \mathcal{C}'_1$$

$$\mathcal{A}'_2 \mathcal{B}'_2 = \mathcal{C}'_2$$

...

$$\mathcal{A}'_n \mathcal{B}'_n = \mathcal{C}'_n$$

**Ορισμός 6.3.2 (διάσταση αναπαράστασης):**

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

**Ορισμός 6.3.3 (αναγωγίσιμη αναπαράσταση):**

Μία αναπαράσταση  $\mathcal{A}$  για την οποία υπάρχει πίνακας μετασχηματισμού  $\mathcal{M}$ , ονομάζεται αναγωγίσιμη (reducible).

**Ορισμός 6.3.4 (ανάγωγη αναπαράσταση):**

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

## 6.4 Το «Μεγάλο Θεώρημα Ορθογωνιότητας»

Οι ιδιότητες των αναπαράστασεων των ομάδων σημείου ενός κρυστάλλου ή μορίου παίζουν κυρίαρχο ρόλο σε προβλήματα θεωρίας δεσμού σθένους, μοριακών τροχιακών, μοριακής δυναμικής και άλλα. Όλες αυτές οι ιδιότητες πηγάζουν από το «Μεγάλο Θεώρημα Ορθογωνιότητας», που σχετίζεται με τα στοιχεία πινάκων των ανάγωγων αναπαράστασεων των ομάδων σημείου [15, κεφ4<sup>ο</sup>].

### Θεώρημα 6.4.1 (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  $\Gamma_i$  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  $\Gamma_i$ , που βρίσκεται στην  $m$  γραμμή και  $n$  στήλη.

Προκειμένου να ερμηνεύσουμε το Μεγάλο Θεώρημα Ορθογωνιότητας θα διασπάσουμε την ισότητα του Θεωρήματος σε τρεις επιμέρους ισοδύναμες ισότητες. Ισοδύναμα γράφουμε:

$$\sum_R \Gamma_i(R)_{mn} \Gamma_j(R)_{mn} = 0, \text{ αν } i \neq j \quad (6.4.1.1)$$

$$\sum_R \Gamma_i(R)_{mn} \Gamma_i(R)_{m'n'} = 0, \text{ αν } m \neq m' \text{ και } n \neq n' \quad (6.4.1.2)$$

$$\sum_R \Gamma_i(R)_{mn} \Gamma_i(R)_{mn} = \frac{h}{l_i} \quad (6.4.1.3)$$

Η εξίσωση (6.4.1.1) σημαίνει ότι δύο διανύσματα από πίνακες διαφορετικών αναπαράστασεων είναι ορθογώνια.

Η εξίσωση (6.4.1.2) σημαίνει ότι δύο διανύσματα από την ίδια αναπαράσταση, αλλά από διαφορετικούς πίνακες είναι ορθογώνια.

Η εξίσωση (6.4.1.3) σημαίνει το τετράγωνο του μήκους οποιουδήποτε διανύσματος ισούται με  $\frac{h}{l_i}$ .

Μερικά σημαντικά πορίσματα είναι τα ακόλουθα.

**Πόρισμα 6.4.2:**

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 6.4.3:**

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

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

**Πόρισμα 6.4.4:**

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

$$\sum_R \chi_i(R) \chi_j(R) = 0, \text{ αν } i \neq j$$

**Πόρισμα 6.4.5:**

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

**Πόρισμα 6.4.6:**

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



# 7

## Βιβλιογραφία

- [1] Τεγόπουλος, Φυτράκης, Μείζον Ελληνικό Λεξικό, 1999, Εκδόσεις Αρμονία
- [2] 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](http://www.chem.auth.gr/content/quantum_lab/sigalas/Symmetry_Lectures.pdf)
- [3] Μ. Σ. Μπουρουσιάν, Χημεία Στερεάς Κατάστασης, 2005, Εκδόσεις Ε.Μ.Π.
- [4] William D. Callister, JR. "Materials Science and Engineering, An introduction", 7<sup>th</sup> edition, John Wiley & Sons Inc.
- [5] "Κρυσταλλογραφία (Crystallography)." [Online] Available: <http://en.wikipedia.org/wiki/Crystallography>.
- [6] Στυλιανού Α. Ανδρεαδάκη, "Εισαγωγή στην Άλγεβρα", 1993, Εκδόσεις Συμμετρία
- [7] Σπύρος Αργυρός, "Σημειώσεις Παραδόσεων Συναρτησιακής Ανάλυσης", 2<sup>η</sup> Έκδοση, Μάιος 2004, Εκδόσεις Ε.Μ.Π.
- [8] Σπύρος Αργυρός, "Σημειώσεις Παραδόσεων Πραγματικής Ανάλυσης", 2<sup>η</sup> Έκδοση, Ιανουάριος 2003, Εκδόσεις Ε.Μ.Π.
- [9] John Fraleigh, "Εισαγωγή στην Άλγεβρα", Π.Ε.Κ. 6<sup>η</sup> Έκδοση
- [10] Frederic Goodman, "Abstract and Concrete Algebra", 1998, Prentice Hall Inc.
- [11] "Linear and Multilinear Algebra", [Online] Available: <http://www.math.niu.edu/~rusin/known-math/index/15-XX.html>
- [12] "Reflection", [Online] Available: <http://mathworld.wolfram.com/Reflection.html>
- [13] "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/>
- [14] Boris S. Tsukerblat, "Group Theory in Chemistry and Spectroscopy", 2006, Dover Publications Inc.
- [15] F. Albert Cotton, "Chemical Applications of Group Theory", 1963, 2<sup>nd</sup> edition, John Wiley and Sons, Inc
- [16] "Συμμετρία (Symmetry Otterbein)." [Online] Available: <http://symmetry.otterbein.edu/gallery/index.html>
- [17] "Συμμετρίες του Κύβου (Symmetries of the Cube" [Online] Available: [http://www.nyu.edu/classes/tuckerman/honors.chem/lectures/lecture\\_20/node1.html](http://www.nyu.edu/classes/tuckerman/honors.chem/lectures/lecture_20/node1.html))
- [18] "Ομάδες Επιπέδου (Wallpaper Groups)" [Online] Available: [http://en.wikipedia.org/wiki/Wallpaper\\_group](http://en.wikipedia.org/wiki/Wallpaper_group)
- [19] "Σημειώσεις Γραμμικής Άλγεβρας (Linear Algebra Notes)" [Online] Available: [http://robotics.cucei.udg.mx/Index\\_files/linearNotes/mat17.pdf](http://robotics.cucei.udg.mx/Index_files/linearNotes/mat17.pdf)