Teoria de grupos aplicada a moléculas e sólidos - PGF5261

Grupos e tensores aplicados à ciência dos materiais - 4300409

Lucy V. C. Assali

Instituto de Física
Universidade de São Paulo

Aula 2 – 24/03

1º Semestre/2023

Teoria de grupos: definições

Elementos Conjugados e Classes

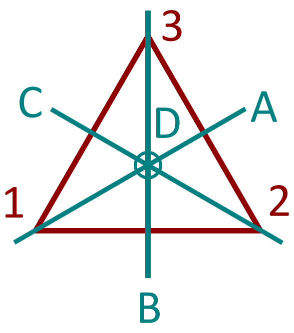
Seja $A \in \mathbb{G} \Rightarrow B \in \mathbb{G}$ é chamado conjugado de A se $\exists\ X \in \mathbb{G}$ com $B = XAX^{-1}$ (B é a *transformação de semelhança* de A por X)

Propriedades:

1. Cada elemento é o seu próprio conjugado (reflexiva);
2. Se A é conjugado de B, então B é conjugado de A (simétrica);
3. Se A é conjugado de B e de C, então B e C são conjugados entre si (transitiva).

$$\Longrightarrow A = XCX^{-1} \Rightarrow C = X^{-1}AX; B = YCY^{-1} = (XY^{-1})^{-1}A(XY^{-1})$$

Exemplo:



$$A \equiv A^{-1};\ B \equiv B^{-1}; C \equiv\ C^{-1};\ F \equiv D^{-1}; D \equiv F^{-1}$$

$$\left.\begin{aligned} BAB^{-1} &= BD = C \\ CAC^{-1} &= CF = B \\ DAD^{-1} &= DAF = DC = B \\ FAF^{-1} &= FAD = FB = C \end{aligned}\right\}$$

a partir de A chega-se sempre a B ou C (são sempre os mesmos 3 elementos)

$\Rightarrow$ ***A*, *B* e *C* são elementos conjugados**

	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
A	A	E	D	F	B	C
B	B	F	E	D	C	A
C	C	D	F	E	A	B
D	D	C	A	B	F	E
F	F	B	C	A	E	D

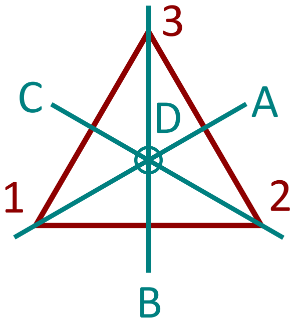
Teoria de grupos: definições

Elementos Conjugados e Classes

Para um dado $A \in \mathbb{G}$, o conjunto de todos os elementos conjugados $\mathbb{C} = \{XAX^{-1}: X \in \mathbb{G}\}$ é chamado *classe:*

- E é sua própria classe
- Grupos abelianos: cada elemento é sua própria classe: $XAX^{-1} = AXX^{-1} = A \;\; \forall A, X \; \in \mathbb{G}$
- Cada $B \in \mathbb{G}$ pertence a uma única classe $\Longrightarrow$ decompor $\mathbb{G}$ em classes

Exemplo:



	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
A	A	E	D	F	B	C
B	B	F	E	D	C	A
C	C	D	F	E	A	B
D	D	C	A	B	F	E
F	F	B	C	A	E	D

$\Rightarrow \{E\}$ é uma classe de ordem 1

$\Rightarrow \{A, B, C\}$ é uma classe de ordem 3

$\Rightarrow \{D, F\}$ é uma classe de ordem 2

Se a ordem h do grupo é um número primo:

- não existem subgrupos próprios
- deve ser um grupo cíclico

$\Rightarrow$ As ordens de todas as classes de qualquer grupo são fatores inteiros da ordem do grupo, que pode ser fatorado em classes:

$$\mathbb{G} = \mathbb{E} \cup \; \mathbb{C}_1 \cup \mathbb{C}_2 \; \ldots$$

Lucy V. C. Assali

Teoria de grupos: definições

Subgrupos e Cosets (conjuntos complementares)

» Seja $\mathbb{S} \subset \mathbb{G}$ um subgrupo de $\mathbb{G} \mid \mathbb{S} = \{E, S_1, S_2, \dots, S_{g-1}\}$, $X \in \mathbb{G}$ e $X \notin \mathbb{S} \implies$ os conjuntos $X\mathbb{S} \equiv \{XS : S \in \mathbb{S}\}$ e $\mathbb{S}X \equiv \{SX : S \in \mathbb{S}\}$ são chamados *coset à esquerda* de $\mathbb{S}$ e *coset à direita* de $\mathbb{S}$, respectivamente, e não contêm nenhum elemento comum com $\mathbb{S}$.

» Se $\mathbb{S}$ contém g elementos, então cada coset também contém g elementos.

» Em geral, cosets não são grupos pois se $X \notin \mathbb{S}$, o coset $X\mathbb{S}$ não tem o elemento identidade: suponha $\exists\, S \in \mathbb{S}$ com $XS = E \in X\mathbb{S} \Rightarrow S = X^{-1} \in \mathbb{S} \Rightarrow X = S^{-1} \in \mathbb{S}$, contrariando a hipótese.

» Se $X' \in X\mathbb{S}$, então $X'\mathbb{S} = X\mathbb{S} \implies$ cada $X' \in X\mathbb{S}$ pode ser utilizado para definir o coset $X\mathbb{S}$.

» Dois cosets à esquerda (à direita) de um subgrupo $\mathbb{S}$ são iguais ou distintos.

» Podemos decompor o grupo $\mathbb{G}$ em cosetes: $\mathbb{G} = \mathbb{S} \cup X\mathbb{S} \cup Y\mathbb{S} \cup \cdots \quad X, Y \notin \mathbb{S}$

» Seja h a ordem de $\mathbb{G}$ e g a ordem de $\mathbb{S} \subset \mathbb{G} \implies \dfrac{h}{g} \in \mathbb{N}$

- A ordem de um grupo finito é um múltiplo inteiro das ordens de seus subgrupos.
- Se h primo $\Rightarrow \{E\}, \mathbb{G}$ são os únicos subgrupos (impróprios)
  $\Rightarrow \mathbb{G}$ é cíclico

Lucy V.C. Assali

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

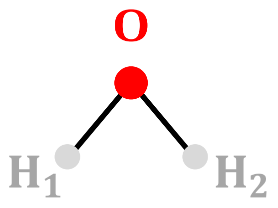
Classificação de sistemas moleculares ou centros de defeitos (impurezas) em materiais

Operação de simetria ⇒ mover simultaneamente os pontos (átomos) do espaço de modo que a configuração geométrica final seja indistinguível da original (antes da aplicação da operação de simetria), ou seja, é uma ação que mantém a molécula inalterada: rotações, reflexões, inversões, ...

Elemento de simetria ⇒ ente abstrato geométrico com relação ao qual se efetua uma ou mais operações de simetria, ou seja, que permite definir uma operação: ponto, reta ou plano

Moléculas ⟹ Consideramos os átomos como "pontos", "ligados rigidamente" entre si, etiquetáveis e indistinguíveis ($\mathrm{H_1} \equiv \mathrm{H_2} \equiv \cdots \equiv \mathrm{H_N}$; $\mathrm{C_1} \equiv \mathrm{C_2}$) ou distinguíves ($\mathrm{H} \neq \mathrm{C}$)

Exemplos:



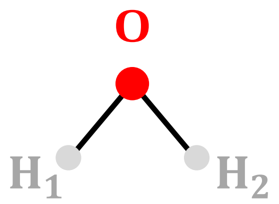
água

etileno

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

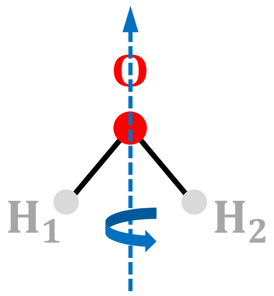
Classificação de sistemas moleculares ou centros de defeitos (impurezas) em materiais

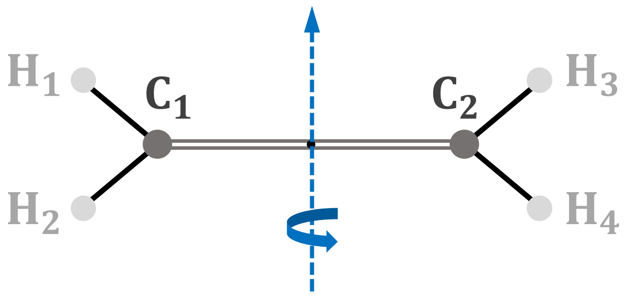
Exemplos:



água

etileno





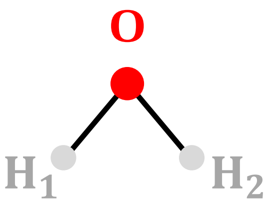
rotação ao redor de um eixo (reta)

Lucy V.C. Assali

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

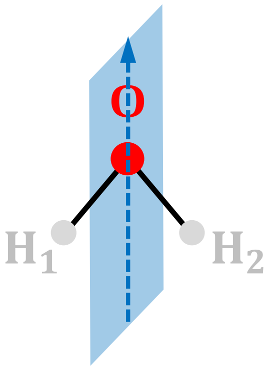
Classificação de sistemas moleculares ou centros de defeitos (impurezas) em materiais

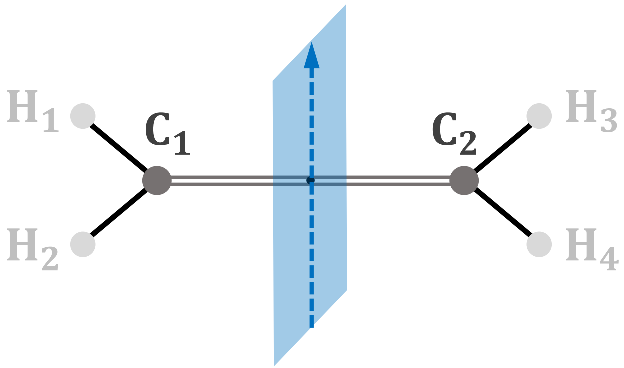
Exemplos:



água

etileno





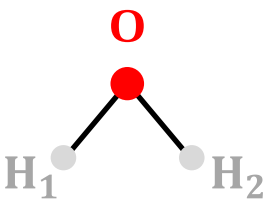
reflexão em um plano

Lucy V. C. Assali

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

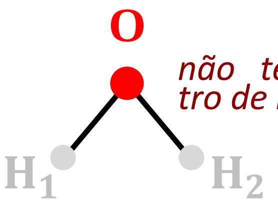
Classificação de sistemas moleculares ou centros de defeitos (impurezas) em materiais

Exemplos:

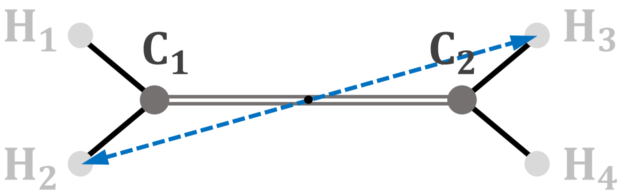


água

etileno



não tem centro de inversão



inversão através de um centro (ponto)

Lucy V.C. Assali

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Sistemas moleculares (finitos): elementos de simetria e operações

Elemento	*Operação*	*Resultado*
Plano de Simetria	Reflexão no plano	plano $(x, y) \Rightarrow$ objeto em $z \rightarrow -z$
Centro de Simetria (centro de inversão)	Inversão através de um centro (origem)	objeto em $(x, y, z) \rightarrow (-x, -y, -z)$
Eixo próprio	Rotação ao redor do eixo	Eixo $\hat{e}$: $(2\pi)/n$ em torno de $\hat{e}$
Eixo impróprio	Roto-reflexão (rotação seguida de reflexão)	Eixo $\hat{e}$: $(2\pi)/n$ em torno de $\hat{e}$ + reflexão no plano $\perp$ ao eixo de rotação

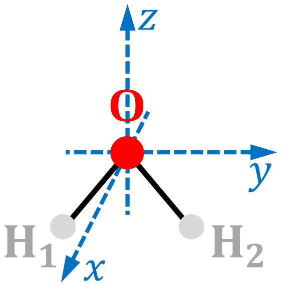
Lucy V.C. Assali

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Sistemas moleculares (finitos): elementos de simetria e operações

Exemplos:

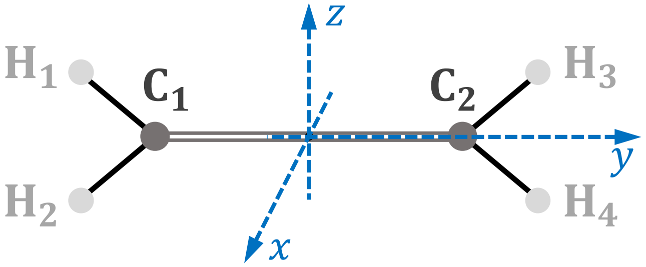
Água



- Reflexão no plano xz $\Longrightarrow \mathrm{H}_1 \longleftrightarrow \mathrm{H}_2$
- Reflexão no plano yz $\Longrightarrow$ nenhum átomo sai do lugar
- Não centro-simétrica
- Rotação própria $(2\pi)/2$ em torno de z $\Longrightarrow \mathrm{H}_1 \longleftrightarrow \mathrm{H}_2$
- Rotação própria $(4\pi)/2$ em torno de z $\Longrightarrow$ nada (identidade)
- Sem eixo impróprio

4 elementos de simetria

Etileno (eteno)



- Reflexão no plano xy $\Longrightarrow \mathrm{H}_1 \leftrightarrow \mathrm{H}_2\,;\ \mathrm{H}_3 \leftrightarrow \mathrm{H}_4$
- Reflexão no plano xz $\Longrightarrow \mathrm{C}_1 \leftrightarrow \mathrm{C}_2\,;\ \mathrm{H}_1 \leftrightarrow \mathrm{H}_3\,;\ \mathrm{H}_2 \leftrightarrow \mathrm{H}_4$
- Reflexão no plano yz $\Longrightarrow$ nenhum átomo sai do lugar
- Centro-simétrica $\Longrightarrow \mathrm{C}_1 \leftrightarrow \mathrm{C}_2\,;\ \mathrm{H}_1 \leftrightarrow \mathrm{H}_4\,;\ \mathrm{H}_3 \leftrightarrow \mathrm{H}_2$
- Rotação própria $(2\pi)/2$ em torno de z $\Longrightarrow \mathrm{C}_1 \leftrightarrow \mathrm{C}_2\,;\ \mathrm{H}_1 \leftrightarrow \mathrm{H}_3\,;\ \mathrm{H}_2 \leftrightarrow \mathrm{H}_4$
- Rotação própria $(2\pi)/2$ em torno de y $\Longrightarrow \mathrm{H}_1 \leftrightarrow \mathrm{H}_2\,;\ \mathrm{H}_3 \leftrightarrow \mathrm{H}_4$
- Rotação própria $(2\pi)/2$ em torno de x $\Longrightarrow \mathrm{C}_1 \leftrightarrow \mathrm{C}_2\,;\ \mathrm{H}_2 \leftrightarrow \mathrm{H}_3\,;\ \mathrm{H}_1 \leftrightarrow \mathrm{H}_4$
- Rotação própria $(4\pi)/2$ em torno de x ou y ou z $\Longrightarrow$ nada (identidade)
- Sem eixo impróprio

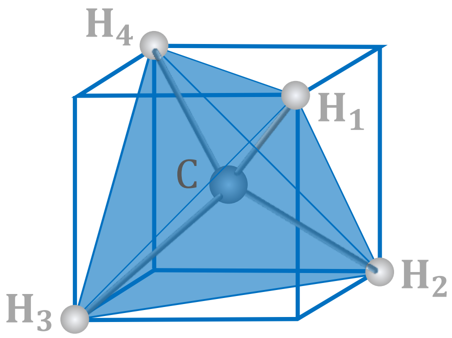
8 elementos de simetria

Lucy V. C. Assali

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Sistemas moleculares (finitos): elementos de simetria e operações

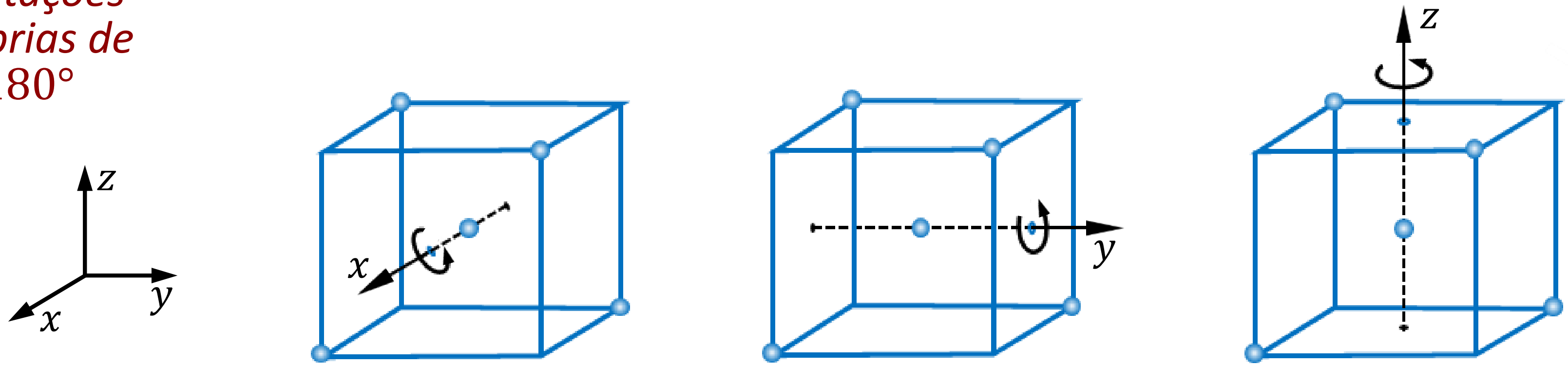
Metano



Os átomos de H se arranjam nos vértices de um tetraedro regular, com o átomo de C no centro do tetraedro.

Não tem centro de inversão (origem do sistema de coordenadas no átomo de C). Existem vários eixos de rotações, próprias e impróprias, e planos de reflexão.

3 rotações próprias de 180°



- Rotação própria de $(2\pi)/2$ em torno de x $\Rightarrow H_3 \leftrightarrow H_1;\ H_2 \leftrightarrow H_4$
- Rotação própria de $(2\pi)/2$ em torno de y $\Rightarrow H_1 \leftrightarrow H_2;\ H_3 \leftrightarrow H_4$
- Rotação própria de $(2\pi)/2$ em torno de z $\Rightarrow H_1 \leftrightarrow H_4;\ H_2 \leftrightarrow H_3$

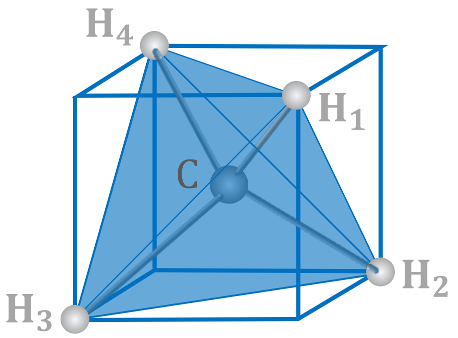
Lucy V. C. Assali

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

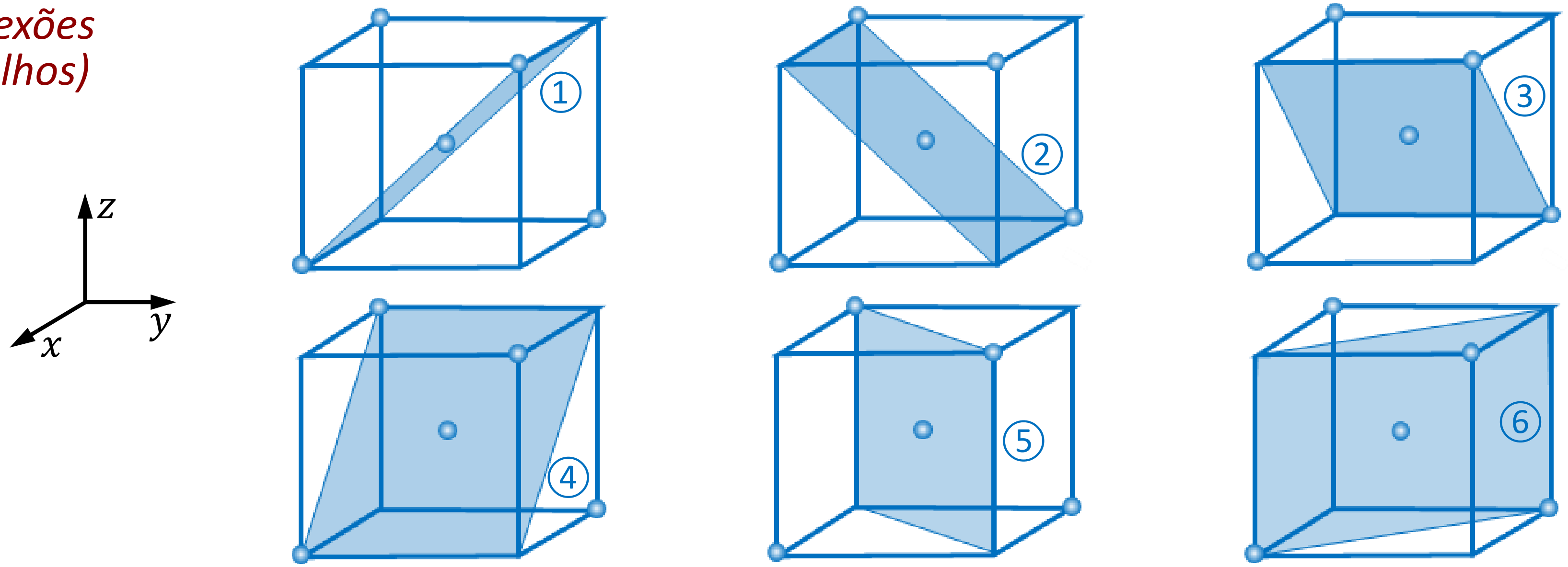
Sistemas moleculares (finitos): elementos de simetria e operações

Metano

Não tem centro de inversão (origem do sistema de coordenadas no átomo de C).



6 reflexões (espelhos)



- Reflexão no plano (1) $\Longrightarrow H_2 \leftrightarrow H_4$
- Reflexão no plano (3) $\Longrightarrow H_3 \leftrightarrow H_4$
- Reflexão no plano (5) $\Longrightarrow H_2 \leftrightarrow H_3$
- Reflexão no plano (2) $\Longrightarrow H_1 \leftrightarrow H_3$
- Reflexão no plano (4) $\Longrightarrow H_1 \leftrightarrow H_2$
- Reflexão no plano (6) $\Longrightarrow H_1 \leftrightarrow H_4$

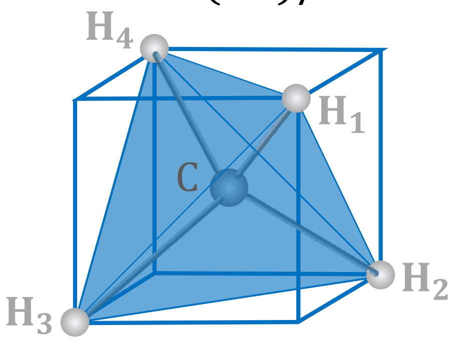
Lucy V. C. Assali

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

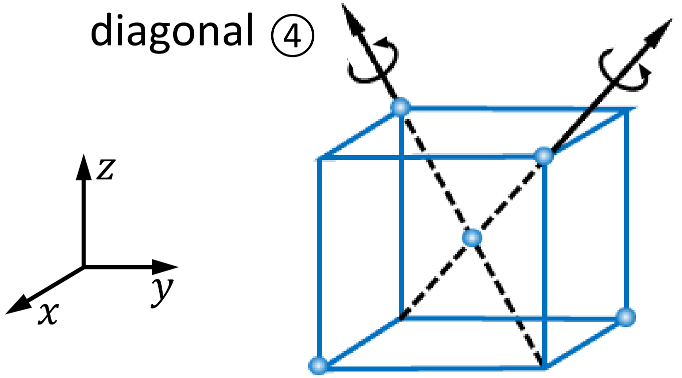
Sistemas moleculares (finitos): elementos de simetria e operações

<u>Metano</u>

➢ Rotações próprias de $(2\pi)/3$ e $[2(2\pi)]/3$, em torno dos eixos definidos pelas 4 diagonais do cubo (ou de $(2\pi)/3$ nos dois sentidos dos 4 eixos ≡ 8 eixos).



8 rotações próprias de 120°



8 rotações próprias de 120°

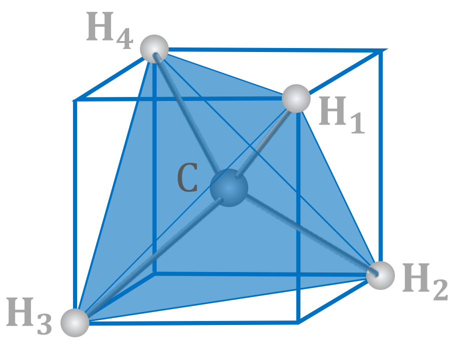
- Diagonal ① > eixo (111): $H_2 \rightarrow H_4;\ H_4 \rightarrow H_3; H_3 \rightarrow H_2$
  > eixo (-1-1-1): $H_2 \rightarrow H_3;\ H_3 \rightarrow H_4; H_4 \rightarrow H_2$
- Diagonal ④ > eixo (-1-11): $H_1 \rightarrow H_3;\ H_3 \rightarrow H_2; H_2 \rightarrow H_1$
  > eixo (11-1): $H_1 \rightarrow H_2;\ H_2 \rightarrow H_3; H_3 \rightarrow H_1$
- Diagonal ③ > eixo (1-1-1): $H_1 \rightarrow H_4;\ H_4 \rightarrow H_2; H_2 \rightarrow H_1$
  > eixo (-111): $H_1 \rightarrow H_2;\ H_2 \rightarrow H_4; H_4 \rightarrow H_1$
- Diagonal ② > eixo (-11-1): $H_1 \rightarrow H_3;\ H_3 \rightarrow H_4; H_4 \rightarrow H_1$
  > eixo (1-11): $H_1 \rightarrow H_4;\ H_4 \rightarrow H_3; H_3 \rightarrow H_1$

Lucy V. C. Assali

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

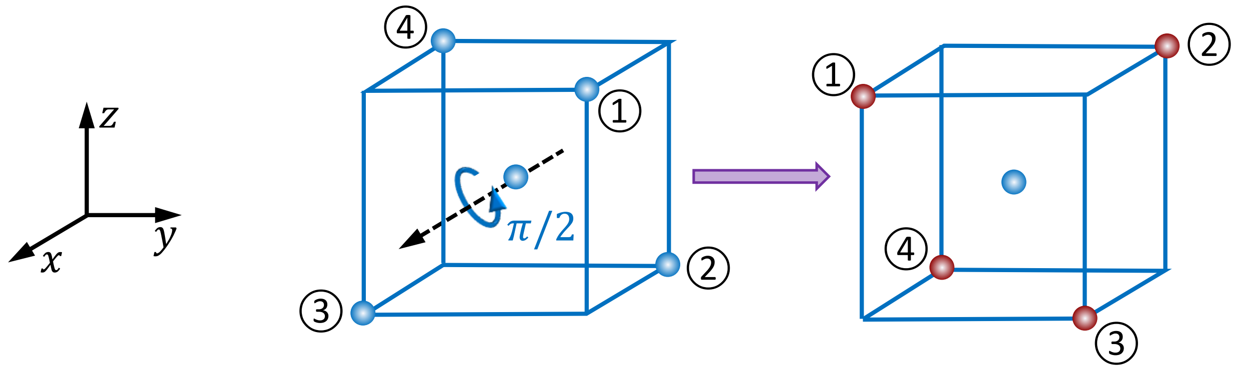
Sistemas moleculares (finitos): elementos de simetria e operações

Metano

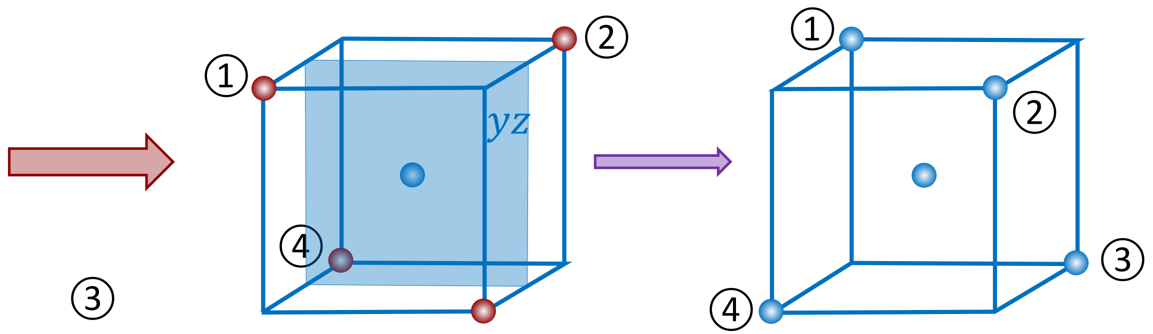


Rotações impróprias:

Exemplo: rotação de $(2\pi)/4$ em torno de x



+ reflexão no plano $(yz) \Longrightarrow \mathrm{H}_1 \rightarrow \mathrm{H}_4;\ \mathrm{H}_2 \rightarrow \mathrm{H}_1; \mathrm{H}_3 \rightarrow \mathrm{H}_2;\ \mathrm{H}_4 \rightarrow \mathrm{H}_3$

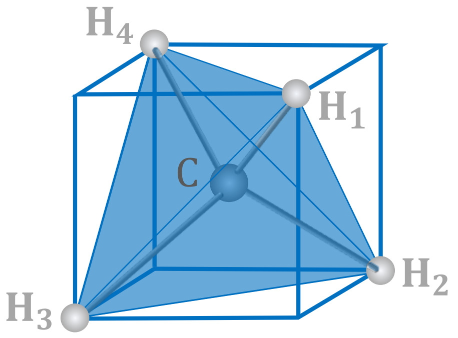


Lucy V.C. Assali

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

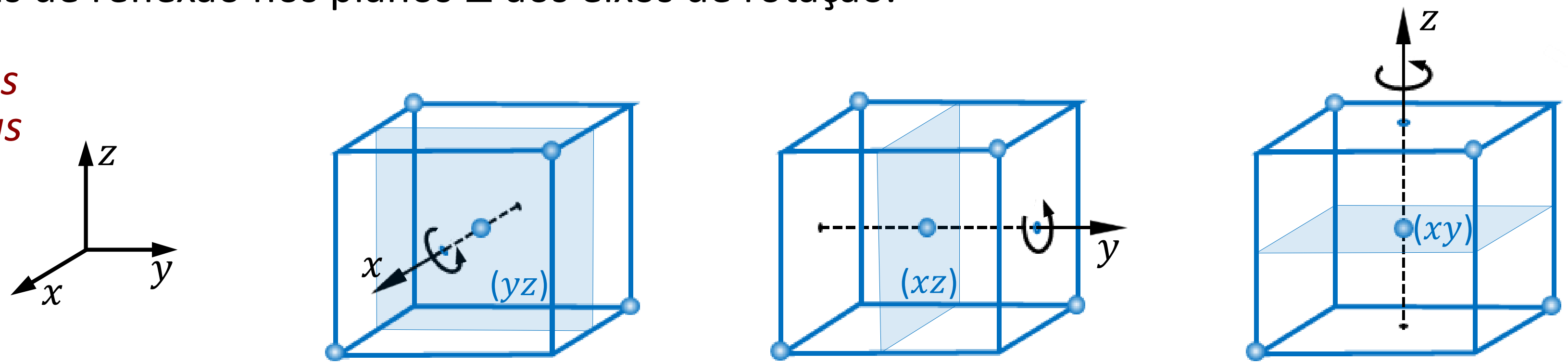
Sistemas moleculares (finitos): elementos de simetria e operações

Metano



- Rotações impróprias de $\pm(2\pi)/4$, ou de $(2\pi)/4$ e $[2(2\pi)]/4$, em torno dos eixos cartesianos x, y e z (ou de $(2\pi)/4$ nos dois sentidos dos 3 eixos cartesianos $\equiv$ 6 eixos), seguidas de reflexão nos planos $\perp$ aos eixos de rotação.

6 rotações impróprias de 90°



- Direção x > eixo (100) $+(yz)$: $H_1 \rightarrow H_4$; $H_2 \rightarrow H_1$; $H_3 \rightarrow H_2$; $H_4 \rightarrow H_3$
  > eixo (-100) $+(yz)$: $H_1 \rightarrow H_2$; $H_2 \rightarrow H_3$; $H_3 \rightarrow H_4$; $H_4 \rightarrow H_1$

- Direção y > eixo (010) $+(xz)$: $H_1 \rightarrow H_3$; $H_2 \rightarrow H_4$; $H_3 \rightarrow H_2$; $H_4 \rightarrow H_1$
  > eixo (0-10) $+(xz)$: $H_1 \rightarrow H_4$; $H_2 \rightarrow H_3$; $H_3 \rightarrow H_1$; $H_4 \rightarrow H_2$

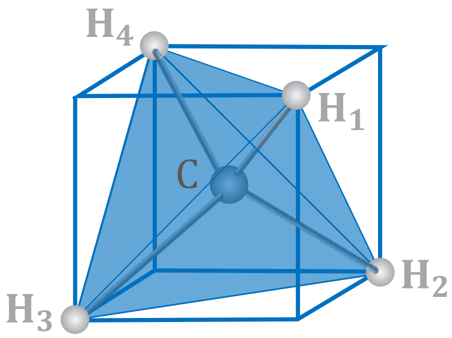
- Direção z > eixo (001) $+(xy)$: $H_1 \rightarrow H_2$; $H_2 \rightarrow H_4$; $H_3 \rightarrow H_1$; $H_4 \rightarrow H_3$
  > eixo (00-1) $+(xy)$: $H_1 \rightarrow H_3$; $H_2 \rightarrow H_1$; $H_3 \rightarrow H_4$; $H_4 \rightarrow H_2$

Lucy V. C. Assali

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Sistemas moleculares (finitos): elementos de simetria e operações

Metano



$$\underbrace{\text{3 rotações próprias de } 180° + \text{6 reflexões (espelhos)} + \text{8 rotações próprias de } 120° + \text{6 rotações impróprias de } 90° + \text{identidade}}_{\text{24 elementos de simetria}}$$