Apêndice C

Teoria de Grupos de Espaço

Operações de simetria (rotações, espelhamentos e translações) que deixam o espaço tridimensional invariante compõe o chamado grupo de espaço [3]. Considere que essa operação é descrita por $\{\Gamma_\alpha, \tau\}$ tal que temos as seguintes operações:

$$\begin{aligned} \{\varepsilon|0\} &= \text{identidade} \\ \{\alpha|0\} &= \text{rotações puras ou mais geral operações de grupo de ponto} \\ \{\varepsilon|\tau\} &= \text{translações puras por um vetor } \vec{\tau}. \end{aligned}$$

Podemos relacionar o operador $\{\alpha|\tau\}$ para o grupo de espaço com uma transformação de coordenadas

$$\{\alpha|\tau\}\vec{r} = \vec{r'} = \overleftrightarrow{\alpha} \cdot \vec{r} + \vec{\tau} \tag{C.1}$$

onde $\overleftrightarrow{\alpha}$ denota a matriz transformação para rotações e $\vec{\tau}$ denota uma transformação de translação.

Definição: O resultado da multiplicação de dois elementod do grupo de espaço é:

$$\{\beta|\tau'\}\{\alpha|\tau\} = \{\beta\alpha|\beta\tau + \tau'\} \tag{C.2}$$

onde $\{\alpha|\tau\}$ é o primeiro operador do grupo de espaço e $\{\beta|\tau'\}$ é o segundo.

Prova: A multiplicação de dois operadores do grupo de espaço é dada por:

$$\begin{aligned} \{\beta|\tau'\}\{\alpha|\tau\} &= \overleftrightarrow{\beta} \cdot \left[\overleftrightarrow{\alpha} \cdot \vec{r} + \vec{\tau}\right] + \vec{\tau'} \\ &= \overleftrightarrow{\beta} \cdot \overleftrightarrow{\alpha} \cdot \vec{r} + \overleftrightarrow{\beta} \cdot \vec{\tau} + \vec{\tau'} \\ &= \{\beta\alpha|\beta\tau + \tau'\} \end{aligned}$$

Usando os resultados desta definição de multiplicação de operadores do grupos de espaço podemos escrever:

$$\{\alpha|\tau\}\{\beta|\tau'\} = \overleftrightarrow{\alpha} \cdot \overleftrightarrow{\beta} \cdot \vec{r} + \overleftrightarrow{\alpha} \cdot \vec{\tau}' + \vec{\tau} \tag{C.3}$$

de modo que a comutação destes operadores implica em:

$$\overleftrightarrow{\alpha} \cdot \overleftrightarrow{\beta} = \overleftrightarrow{\beta} \cdot \overleftrightarrow{\alpha} \qquad \text{and} \qquad \overleftrightarrow{\beta} \cdot \vec{\tau} + \vec{\tau}' = \overleftrightarrow{\alpha} \cdot \vec{\tau}' + \vec{\tau} \tag{C.4}$$

o que não é geralmente válido. Concluímos, por tanto, que embora simples translações comutem umas com as outras, geralmente operações de grupo de espaço não comutam.

Definição: A inversa de $\{\alpha|\tau\}$ é dada por:

$$\{\alpha|\tau\}^{-1} = \{\alpha^{-1}|-\alpha^{-1}\tau\} \tag{C.5}$$

Prova: Usando a definição proposta acima podemos realizar a seguinte operação:

$$\{\alpha|\tau\}\{\alpha|\tau\}^{-1} = \{\alpha\alpha^{-1}|\alpha(-\alpha^{-1}\tau) + \tau\} = \{\varepsilon|0\} \tag{C.6}$$

que prova a definição para $\{\alpha|\tau\}^{-1}$.

Uma vez especificada a operação $\{\varepsilon|0\}$, as regras de multiplicação, e as regras para a operação inversa, e verificando que a lei da associatividade se aplica, vemos que os elementos $\{\alpha|\tau\}$ **formam um grupo** como definido na Introdução.

Definição: A representação matricial para o operador do grupo de espaço é

$$\{\alpha|\tau\} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \vec{\tau} & \overleftrightarrow{\alpha} \end{pmatrix} \tag{C.7}$$

onde 1 é um número, 0 denota uma linha de três zeros, $\vec{\tau}$ é um vetor coluna, e $\overleftrightarrow{\alpha}$ e uma matriz de rotação (3×3). Introduzindo a base:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \vec{r} \end{pmatrix}$$

onde 1 é um número e $\vec{r}$ é um vetor coluna consistindo, por exemplo, de

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix},$$

a ação de um operador de grupo de espaço no sistema de coordenadas pode ser escrito como

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \vec{\tau} & \overleftrightarrow{\alpha} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ \vec{r} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \vec{\tau} + \overleftrightarrow{\alpha} \cdot \vec{r} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \vec{r}' \end{pmatrix}. \tag{C.8}$$

Teorema: A matriz da Eq. C.7 forma uma representação para o operador do grupo de espaço $\{\alpha|\tau\}$.

Prova: Para provar que a matriz da Eq. C.7 é uma represntação do operador do grupo de estado $\{\alpha|\tau\}$, escrevemos as transformações de multiplicação e inversa. A multiplicação das duas matrizes leva a

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \vec{\tau}' & \overleftrightarrow{\beta} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \vec{\tau} & \overleftrightarrow{\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \vec{\tau}' + \overleftrightarrow{\beta} \cdot \vec{\tau} & \overleftrightarrow{\beta} \cdot \overleftrightarrow{\alpha} \end{pmatrix} \tag{C.9}$$

que produz outra operação de simetria do grupo espacial

$$\{\beta|\tau'\}\{\alpha|\tau\} = \{\beta\alpha|\beta\tau + \tau'\}. \tag{C.10}$$

Usando a Eq. C.9 podemos escrever o produto das matrizes representação de $\{\alpha|\tau\}$ com a do operador inversa $\{\alpha|\tau\}^{-1}$ para se obter

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\overleftrightarrow{\alpha}^{-1} \cdot \vec{\tau} & \overleftrightarrow{\alpha}^{-1} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \vec{\tau} & \overleftrightarrow{\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix}, \tag{C.11}$$

mostrando assim que

$$\{\alpha|\tau\}^{-1}\{\alpha|\tau\} = \{\varepsilon|0\}. \tag{C.12}$$