



REFLEXIÓN

<https://doi.org/10.22463/issn.0122-820X>

INTERPRETACIÓN DIDÁCTICA DE LA TEORÍA DE GRUPOS APLICADA EN CRISTALES

V. H. Sierra^a, C. A. Aguirre^b, J. Barba-Ortega^{c*}

Grupo de Física Teórica y Desarrollo de Software, Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá D.C., Colombia. 

Grupo de Física Mesoscópica, Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C., Colombia. 

Recibido el 23 de Julio de 2017; Aprobado el 02 de Diciembre de 2017.

INTERPRETACIÓN DIDÁCTICA DE LA TEORÍA DE GRUPOS APLICADA EN CRISTALES

PALABRAS CLAVE

Simetría, Hamiltoniano, Teoría de grupos.

La determinación del Hamiltoniano de una molécula o un cristal puede llegar a ser un problema muy complicado; sin embargo, las consideraciones de simetría sobre el problema pueden llegar a simplificarlo de manera sustancial. Razón por la cual, es pertinente buscar el mayor número de simetrías de un cristal. En este punto, se realza la importancia de la teoría de grupos como herramienta de cálculo, pues a través de ésta, se sintetizan todas las propiedades del cristal: las rotaciones, las inversiones y las reflexiones. Empero, el estudio realizado por muchos libros acerca de esta temática es demasiado confuso y complicado para los estudiantes de Licenciatura en Física, debido a la naturaleza abstracta del método de la teoría, y las relaciones que éste tiene con el Hamiltoniano. Lo anterior, motiva la realización de un estudio didáctico, así como detallado de los principios que rigen el uso del método. Además, se ilustra a través de un ejemplo detallado para el caso de un cristal ortorrómbico, procediendo a establecer los isomorfismos entre el álgebra utilizada en la teoría de grupos y la correspondiente representación de matrices, que permita efectuar la reducción del Hamiltoniano y los cálculos correspondientes.

KEYWORDS

Symmetry, Hamiltonian, Group Theory.

DIDACTIC INTERPRETATION OF GROUP THEORY APPLIED IN CRYSTALS

The determination of the Hamiltonian of a molecule or a crystal can become a very complicated problem. However, considerations of symmetry of the problem may make it simpler. Therefore it is relevant seek the greatest number of symmetries of a crystal. At this point, it highlights the importance of group theory as a tool for calculation, then, through it synthesizes all of these properties of the crystal, like the rotations, inversions and reflections. However, the study present in many books on this subject is too confusing and complicated for the students of Bachelor in Physics, because of the abstract nature of theoretical method and the relationship it has with the Hamiltonian. This one motivates the realization of a didactic study, as well as detailed principles governing the use of the method. Also, a detailed example is present for the case of an orthorhombic crystal, proceeding to establish the isomorphism between the algebra used in group theory and the corresponding matrix representation, permitting a reduction in the Hamiltonian and the calculations.

PALABRAS - CHAVE

Simetria, hamiltoniana, teoria dos grupos.

INTERPRETAÇÃO DIDÁTICA DA TEORIA DO GRUPO APLICADA EM CRISTAIS

A determinação do Hamiltoniano de uma molécula ou cristal pode se tornar um problema muito complicado; No entanto, considerações de simetria sobre o problema podem simplificá-lo substancialmente. Pelo que, é pertinente procurar o maior número de simetrias de um cristal. Nesse ponto, enfatiza-se a importância da teoria dos grupos como ferramenta de cálculo, pois através dela todas as propriedades do cristal são sintetizadas: rotações, inversões e reflexões. No entanto, o estudo de muitos livros sobre este assunto é muito confuso e complicado para os estudantes de graduação em Física, por causa da natureza abstrata do método da teoria, e a relação que tem com o hamiltoniano. O exposto, motiva a realização de um estudo didático, bem como detalha os princípios que regem o uso do método. Além disso, é ilustrada através de um processo detalhado de um cristal ortorrómbico, prosseguir para estabelecer a isomorfismo entre álgebra utilizado na teoria de grupos e a representação correspondente de matrizes, permitindo a redução do exemplo Hamiltoniano e cálculos.

* Autor para correspondencia.

Correo electrónico: jjbarbao@unal.edu.co (Jose Jose Barba Ortega).

La revisión por pares es responsabilidad de la Universidad Francisco de Paula Santander, Este es un artículo bajo la licencia CC BY-NC-ND (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

Introducción

El presente artículo muestra una aplicación de la teoría de grupos al estado sólido, al estudiar el Hamiltoniano bajo una perspectiva atómica. Para realizar este procedimiento, se muestran las características principales de un cristal ortorrómbico (C. O.) en la sección 2. Luego se estudian las operaciones de simetrías del cristal, cómo estas conforman un grupo y se añade la tabla de operaciones del grupo en la sección 3. En la siguiente sección se brindan algunos elementos matemáticos importantes, relacionadas el concepto de clase y algunos isomorfismos con el álgebra lineal. En la última sección, se habla del concepto de representación reducida y cómo ésta establece condiciones que ayudan en la simplificación sustancial del Hamiltoniano por su estrecha relación con la simetría del sistema.

El cristal ortorrómbico (C. O.)

Cuando se analiza la principal característica que diferencia al estado sólido de la materia, con los demás estados, se tiene en cuenta el espaciado y organización de los átomos de la sustancia. Por lo tanto, la información de cómo es ésta organización, debe aclarar la explicación de propiedades o comportamientos del material.

Dado el poco espacio entre átomos, las fuerzas electrostáticas se hacen apreciables para estos, reduciendo el desorden del sistema. Igualmente, es de indicar, que no todas las sustancias están conformadas de los mismos componentes químicos; sus organizaciones pueden variar considerablemente, sin embargo, casi todos los sólidos poseen una organización particular, denominada cristal, en tal sentido:

“Un cristal se compone de átomos dispuestos en un modelo que se repite periódicamente en las tres dimensiones” [1]

Como la estructura del cristal parece ser la misma a lo largo del material, se puede pensar que el cristal es un “ladrillo” con el cual se construye un material. A este concepto de cristal, también se le suele llamar también, red cristalina [2], los cuales pueden ser de distintos tamaños y formas de estos “ladrillos”. En general, las diferencias no radican en los componentes de la red, sino en la longitud y ángulos que forman las aristas de sus lados a los que se les denomina ejes primitivos a1, a2 y a3 [3]. Uno de estos cristales, es el C. O. en el cual, a pesar de que los ángulos formados por sus lados son de 90°, sus lados son diferentes.

Las simetrías de un C. O.

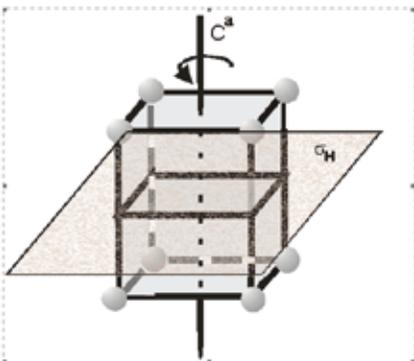


Fig. 1. Un cristal ortorrómbico formado por átomos iguales en sus esquinas, tres ejes de rotación C_2 y tres planos de reflexión.

El C. O. presenta los siguientes tipos de simetría:

Operación de identidad: [5]: Consiste simplemente en dejar al cristal en la posición inicial.

Eje de simetría de orden n: Para el C. O. existen tres C_2 , perpendiculares a las caras del cristal y denotados en la figura por C_2^a , C_2^b , C_2^c . El orden 2 significa que sólo admite la rotación de 0° y 180°.

Plano de simetría: En el C. O. se encuentran tres planos de simetría, dos verticales σ_v y uno horizontal σ_h , todos paralelos a dos caras del cristal.

Centro de simetría: El centro del cristal coincide con un centro de simetría.

Eje alternante de simetría de orden n [6]: En el C. O. se encuentran tres de estos ejes, cada uno asociado a un eje y plano de simetría perpendicular y son denotados por S_2^a , S_2^b y S_2^c .

Sin embargo, dos de estos ejes alternados S_2^b y S_2^c (Los relacionados con C_2^b y C_2^c), generan una configuración que puede ser obtenida mediante otras operaciones de simetría. Estas operaciones poseen algunas propiedades especiales. Por ejemplo, supóngase la operación de centro de simetría i . Para el C. O. esta operación es igual a la operación de simetría de eje alternante con respecto a C_2 , y puede ser obtenida al aplicar dos operaciones de simetría consecutivamente, de la manera:

$$C_2^a \otimes \sigma_h = S_2^a$$

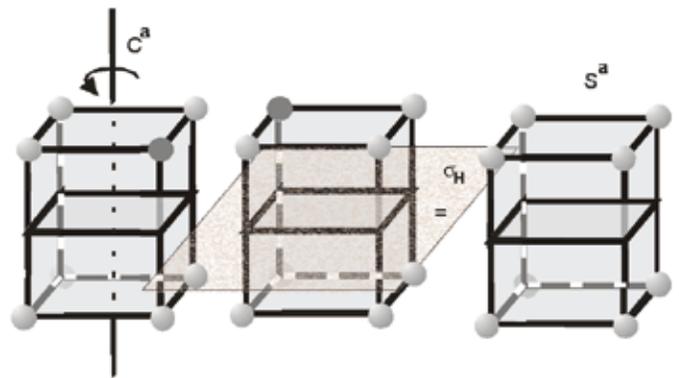


Fig. 2. Resultante de dos operaciones de simetría consecutivas.

Donde \otimes se utiliza para especificar una operación binaria, ya que, en verdad no sabemos el significado matemático de realizar una operación de simetría seguida de la otra (bien podría ser una suma o una multiplicación). En tal sentido, muchas de las operaciones de simetría pueden obtenerse al aplicarse dos operaciones de simetría consecutivamente.

Se muestra a continuación la *tabla de Caley* de las operaciones de simetría del C. O.

3	E	C^a	C^b	C^c	σ_h	σ^a	σ^b	S_a
E	E	C^a	C^b	C^c	σ_h	σ^a	σ^b	S_a
C^a	C^a	E	C^c	C^b	S^a	σ^b	σ^a	σ_h
C^b	C^b	C^c	E	C^a	σ^b	S^a	σ_h	σ^a
C^c	C^c	C^b	C^a	E	σ^a	σ_h	S^a	σ^b
σ_h	σ_h	S^a	σ^b	σ^a	E	C^c	C^b	C^a
σ^a	σ^a	σ^b	S^a	σ_h	C^c	E	C^a	C^b
σ^b	σ^b	σ^a	σ_h	S^a	C^b	C^a	E	C^c
S^a	S^a	σ_h	σ^a	σ^b	C^a	C^b	C^c	E

C^a Op. de Rotación. **σ_h** Op. De reflexión horizontal
σ^a Op. De reflexión vertical **S^a** eje de rotación alternado.

Tabla No. 1 Tabla de Caley del C. O.

Se observa que al tener estos ocho elementos, se esta considerando todas las operaciones de simetría posibles del sistema (se recuerda que $S = i$). Entonces, el conjunto de operaciones de simetría forma un grupo, pues, cumple con las propiedades de un grupo, tal y como se explica a continuación:

Es cerrado bajo la operación definida. En nuestro ejemplo, ninguna combinación de operaciones da como resultado una operación que no estuviera en la tabla.

Cumple la propiedad asociativa: Es claro ver que los elementos de esta tabla cumplen con la propiedad.

Posee un elemento neutro: En el cristal en cuestión es la operación identidad.

Existencia de elemento opuesto: Que para el caso del cristal es la misma operación de simetría.

Además, debido a que la tabla de adición es simétrica respecto a la diagonal entonces el grupo es conmutativo o Abelianio [7].

Algunos elementos matemáticos adicionales

Para entender la relación de la simetría y la energía del sistema, se hace necesario transformar la información obtenida en la sección anterior a una forma matricial. Para hacer esto se tiene que tener en cuenta dos conceptos, en primer lugar lo relacionado con clase, lo cual indica que: Sean P y Q dos miembros de un grupo. Se dice que son miembros de una misma clase si se hallan relacionados por la ecuación:

$$Q = X^{-1}PX$$

Donde X es cualquier miembro del grupo, incluyendo los propios P y Q [5]. Dado que el grupo del C. O. es conmutativo el grupo posee ocho clases.

El siguiente concepto importante es el concepto de *representación del grupo irreducible* [5]. éste permite ver que algunos elementos matemáticos, pueden comportarse de la misma manera que los elementos de la tabla 1.

Un ejemplo de esto son matrices diagonales de 3x3, cuyos elementos diagonal sólo pueden ser 1 ó -1, si se realiza la multiplicación de matrices habitual, es decir, filas por columnas, se obtiene nuevamente una matriz que cumple con las características iniciales; para ilustrar, las matrices asociadas a la operación expuesta en (1) son:

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

Sin embargo, esta no es la única representación posible; existen otros elementos en los cuales se puede plantear un isomorfismo [7], es decir, una correspondencia biunívoca entre los elementos de la tabla de Caley y otros elementos matemáticos. En teoría de grupos, existen dos tipos de representaciones: *las representaciones reductibles*, las cuales son las representaciones más compactas y que no están compuestas, para saber cuántas representaciones reductibles tendrá un grupo, se utiliza el siguiente teorema:

El número de representaciones irreducibles de un grupo finito es igual al número de clases p [8].

Entonces, el grupo posee ocho representaciones reductibles. A parte de la *representación habitual inexacta* [5], podemos plantear la siguiente representación Γ_2 :

$$E = C^a = C^b = C^c = 1 \quad (4)$$

$$\sigma_h = \sigma^a = \sigma^b = S^a = 1 \quad (5)$$

Esa representación cumple con la tabla de Caley y no hay una representación más simple con la que se pueda escribir la representación. En cambio la expuesta en (3), puede escribirse como:

$$\sigma_v = \begin{pmatrix} \Gamma_1(\sigma_v) & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma_1(\sigma_v) & 0 \\ 0 & 0 & \Gamma_2(\sigma_v)1 \end{pmatrix} \quad (6)$$

Se sabe que existen ocho representaciones reductibles en el sistema, pero ¿cómo son las dimensiones de las representaciones?, ¿cuál será el orden de las matrices de representación? En ese orden de ideas, se encontró que existen dos representaciones de dimensión 1: la inexacta y la expuesta en las ecuaciones (5) y (6). Si se analiza el siguiente teorema:

La suma de los cuadrados de las dimensiones d_γ de las representaciones irreducibles de un grupo finito es igual al orden del grupo [8]:

$$\sum_{\gamma=1}^p d_\gamma^2 = g \quad (7)$$

Dado que el orden del grupo es 8, no queda más opción que las dimensiones de las representaciones irreducibles sean unidimensionales.

En este punto, se tiene toda la información matemática que se emplea para determinar la forma del Hamiltoniano. Hay que tener en cuenta que, aunque hay ocho representaciones irreducibles, pero solo hay cuatro diferentes, una representación estará escrita de la manera:

$$\Gamma = 2\Gamma^1 + 2\Gamma^2 + 2\Gamma^3 + 2\Gamma^4 \quad (8)$$

Esta ecuación es un resultado útil, extraído de la teoría de grupos. Aquí Γ^1 es un tipo de representación irreducibles.

En estado sólido, una forma de encontrar el Hamiltoniano del sistema es a través de el método de *Ritz*[8, 9], el cual consiste en proponer funciones que permitan hallar la energía del sistema, al hacer esto la energía del sistema esta dado por:

$$\det |H_{ij} - \lambda S_{ij}| = 0 \quad (9)$$

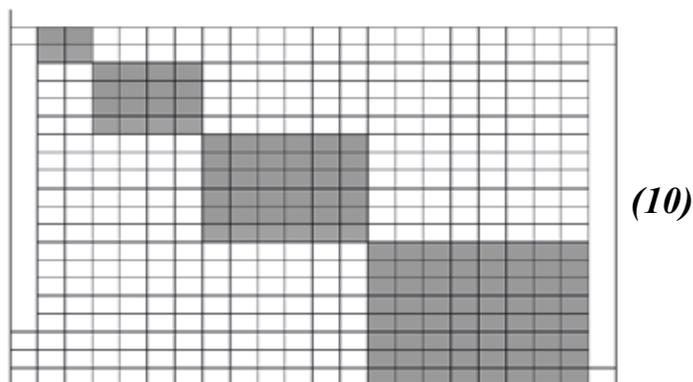
Donde s_{ij} son integrales de solapamiento [5] y el determinante es conocido como el determinante secular [8]. El operador Hamiltoniano es simétrico si existen simetrías en el sistema, y sus elementos fuera de la diagonal se hacen iguales a las integrales de solapamiento.

Para saber que elementos sobreviven en el determinante (9), se puede utilizar (8), que aporta como es el degeneramiento del sistema, dado por los supra-índices de la ecuación. Entonces, el determinante estará conformado por dos funciones no degeneradas, dos que están dos, tres y cuatro veces degeneradas, respectivamente.

Por lo tanto; al conformar la matriz para el determinante, esta poseerá veinte filas y veinte columnas, entonces, el determinante secular tendrá la forma mostrada en la ecuación (10), donde los espacios sombreados son las componentes de la matriz que son diferentes de cero.

CONCLUSIONES

En el presente trabajo se realizó un análisis de las operaciones de simetría de un C. O., luego, con estas operaciones de simetrías se planteó una tabla de Caley y se comprobó que estas son un grupo. Posteriormente se buscaron isomorfismos con el álgebra de matrices y se encontraron las representaciones irreducibles asociadas al grupo. Por último, con estos resultados se establecieron relaciones con las funciones que determinan la energía del sistema, y con esta información, se realizó una simplificación sustancial del determinante secular del sistema:



Se observa que hay un reducción significativa en el grado de dificultad del determinante secular, pues ya se eliminan el 70 % de sus componentes, lo cual demuestra la utilidad de poseer la información de las operaciones de simetría del sistema y toda la información que aporta la teoría de grupos. Lo que le demuestra al estudiante la importancia de la teoría de grupos en la relación de los aspectos físicos del sistema

Referencias

- [1] C. S: Barret, Structure of metals, 2da ed. New York, McGraw Hill, 1952, 1 p.
- [2] Kittel, Charles, Introducción a la física del estado sólido, 3ra ed., España, Editorial Reverte, 1997.
- [3] Ver la referencia 2, pag 7.
- [4] Sands, Donald, Introducción a la cristalografía, 1ra ed. España, Editorial Reverte, 1993, pag 14.
- [5] Nussbaum, Allen, Teoría de grupos aplicada para químicos, físicos e ing, 1ra ed. España, Editorial Reverte, 1974, pag 3, 9,
- [6] Levine Ira N., Química Cuántica, 5ta ed. Madrid, PEARSON EDUCACIÓN S. A. 2001, pag 340.
- [7] P. S. Alexandroff, Introducción a la teoría de grupos, 2da ed. Buenos Aires, Editorial U. de Buenos Aires pag 16 – 17.
- [8] L. Mariot, Group theory and solid state physics. 1ra ed. Englewood Cliffs, Prentice-Hall, 1962. pag 23
- [9] Fernando Duran-Flórez1, Miryam Rincón-Joya, José Barba-Ortega,, Revista Respuestas. Volumen 21, Numero 2 de 2016 Pag 6-12.