Algumas Aplicações de Teoria de Grupos à Cristalografia Topológica

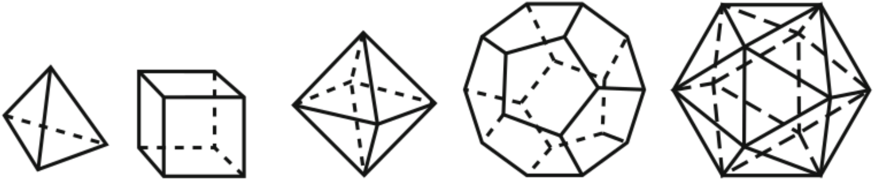
(Grupo Reticulado)

Gabriel Trindade
N° USP: 10289061

Sumário

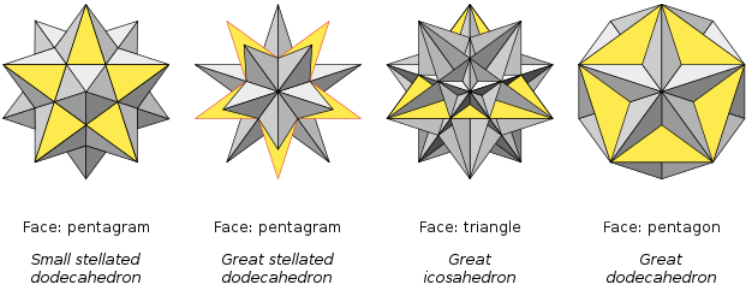
Introdução

- Cristais são os sólidos mais estáveis;
- Pitágoras e os cristais (V A.C.).
  - Poliedros Regulares Convexos nos *Elementos*



Introdução

- Kepler, Poinsot e os poliedros estrelados (XVII D.C. - XIX).
- Teoria de Grupos é aplicada à cristalografia. (XIX D.C.).
- Max von Laue e os raios-X (1912).
- Abordagem por meio de grafos (1950).



Preliminares

- Dada uma relação de equivalência $\sim$ sobre um conjunto X, definimos o espaço quociente de X por $\sim$:

$$X/\sim := \{[a] \mid a \in X\}$$

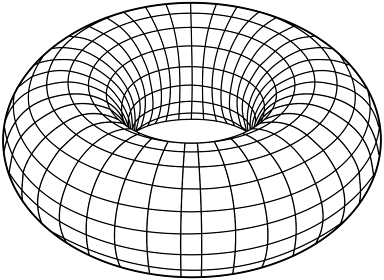
O grande problema

Prove que:

$$\mathbb{R}^d/\mathbb{Z}^d \simeq \mathbb{T}^d$$

- Definimos o torus d-dimensional como:

$$\mathbb{T}^d = \underbrace{S^1 \wedge S^1 \wedge \cdots \wedge S^1}_{\text{d fatores}}$$



- Seja $\mathcal{B} = \{a_i\},\ i = 1, 2, \cdots, d$ base de $\mathbb{R}^d$. Definimos o Grupo Reticulado L como o grupo aditivo:

$$L := \{k_1 a_1 + k_2 a_2 + \cdots + k_d a_d \mid k_1, k_2, \cdots, k_d \in \mathbb{Z}\}$$

$$L := \{k a_i \mid k \in \mathbb{Z}^n, i = 1, 2, \cdots, d\}$$

- L atua em $\mathbb{R}^d$ pela translação:

$$x \mapsto x + \sigma \qquad (\sigma \in L, x \in \mathbb{R}^d)$$

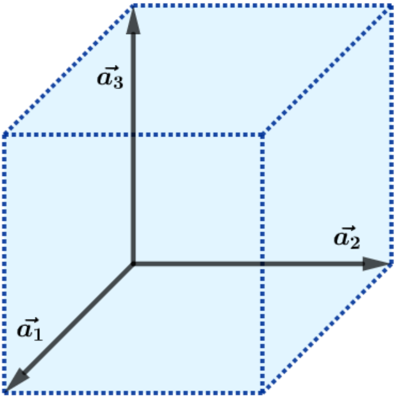
- Assim, L translada todos os pontos de $\mathbb{R}^d$ para o domínio fundamental D_L:

$$D_L = \{t_1 a_1 + t_2 a_2 + \cdots + t_d a_d \mid 0 \leq t_i < 1, i = 1, 2, \cdots, d\}$$

- Todo ponto p em $\mathbb{R}^d$ pode ser visto como um vetor escrito da forma:

$$p = \sum_{n=1}^{d}(k_i + r_i)a_i$$

$$k_i \in \mathbb{Z}, r_i \in \mathbb{R}^d,\ \ i = 1, 2, \cdots, d$$



- A representação de cada p em D_L é única?
- Sim!
- Todo ponto de $\mathbb{R}^n$ possui representante em D_L?
- Claro!
- Pela decomposição de $\mathbb{R}$ em $\mathbb{Z}$: $0 \leq r_i < 1$

- A representação de cada p em D_L é única?
- Sim!
- Todo ponto de $\mathbb{R}^n$ possui representante em D_L?
- Claro!
- Pela decomposição de $\mathbb{R}$ em $\mathbb{Z}$: $0 \leq r_i < 1$

- A representação de cada p em D_L é única?
- Sim!
- Todo ponto de $\mathbb{R}^n$ possui representante em D_L?
- Claro!
- Pela decomposição de $\mathbb{R}$ em $\mathbb{Z}$: $0 \leq r_i < 1$

- A representação de cada p em D_L é única?
- Sim!
- Todo ponto de $\mathbb{R}^n$ possui representante em D_L?
- Claro!
- Pela decomposição de $\mathbb{R}$ em $\mathbb{Z}$: $0 \leq r_i < 1$

- A representação de cada p em D_L é única?
- Sim!
- Todo ponto de $\mathbb{R}^n$ possui representante em D_L?
- Claro!
- Pela decomposição de $\mathbb{R}$ em $\mathbb{Z}$: $0 \leq r_i < 1$

- Espaço órbita:

$$\mathbb{R}^d/L = \{\sigma.x \mid \sigma \in L, x \in \mathbb{R}^d\}$$

- $\mathbb{R}^d/L$ é o conjunto das classes de equivalência sobre a relação de equivalência $\sim$:

$$\sim: \; x \sim y \Leftrightarrow x - y = k.a_i \qquad (\forall\ x, y \in \mathbb{R}^d, \forall\ k \in \mathbb{Z}^d)$$

$$\mathbb{R}^d/L = \{[x] \mid x \sim y,\ \forall x, y \in \mathbb{R}^d\}$$

- $\mathbb{R}^d/L$ tem estrutura de grupo aditivo:
  1. $[x] + [y] = [z] \in \mathbb{R}^n/L$
  2. $([x] + [y]) + [z] = [x] + ([y] + [z])$
  3. $[0] = 0.x$,
  4. $[-x] := -k.a_i \Rightarrow [-x] + [x] = 0$

- $\mathbb{R}^d/L$ tem estrutura de grupo quociente:
  1. L é um grupo normal?
  2. (Claro!) $x + \sigma + (-x) = \sigma \in L$, $\forall\, x \in \mathbb{R}^d$, $\forall\, \sigma \in L$.
  3. $\mathbb{R}^d/L$ é o conjunto dos cosets de L em $\mathbb{R}^d$?
  4. (Sim!) $x.\sigma \in \mathbb{R}^d$ possui representante em D_L, $\forall\, x \in \mathbb{R}^d$, $\forall\, \sigma \in L$.

- $\mathbb{R}^d/L$ tem estrutura de grupo quociente:
  1. L é um grupo normal?
  2. (Claro!) $x + \sigma + (-x) = \sigma \in L, \ \forall \ x \in \mathbb{R}^d, \ \forall \ \sigma \in L$.
  3. $\mathbb{R}^d/L$ é o conjunto dos cosets de L em $\mathbb{R}^d$?
  4. (Sim!) $x.\sigma \in \mathbb{R}^d$ possui representante em $D_L, \ \forall \ x \in \mathbb{R}^d, \ \forall \ \sigma \in L$.

- $\mathbb{R}^d/L$ tem estrutura de grupo quociente:
  1. L é um grupo normal?
  2. (Claro!) $x + \sigma + (-x) = \sigma \in L,\ \forall\ x \in \mathbb{R}^d,\ \forall\ \sigma \in L$.
  3. $\mathbb{R}^d/L$ é o conjunto dos cosets de L em $\mathbb{R}^d$?
  4. (Sim!) $x.\sigma \in \mathbb{R}^d$ possui representante em $D_L,\ \forall\ x \in \mathbb{R}^d,\ \forall\ \sigma \in L$.

- $\mathbb{R}^d/L$ tem estrutura de grupo quociente:
  1. L é um grupo normal?
  2. (Claro!) $x + \sigma + (-x) = \sigma \in L, \ \forall\ x \in \mathbb{R}^d, \ \forall\ \sigma \in L$.
  3. $\mathbb{R}^d/L$ é o conjunto dos cosets de L em $\mathbb{R}^d$?
  4. (Sim!) $x.\sigma \in \mathbb{R}^d$ possui representante em $D_L, \ \forall\ x \in \mathbb{R}^d, \ \forall\ \sigma \in L$.

Afirmação

L é isomorfo aos inteiros n-dimensionais $\mathbb{Z}^n$.

Prova:

Passo 1: Dado $x \in \mathbb{Z}$, existe ϕ :

$$\begin{aligned} \phi : \quad & \mathbb{Z}^d \rightarrow L \\ & k \mapsto k.a_i \end{aligned}$$

Tome $k_1, k_2 \in \mathbb{Z}^d$.

$$\phi(k_1 + k_2) = (k_1 + k_2).a_1 = k_1.a_i + k_2.a_i = \phi(k_1) + \phi(k_2)$$

ϕ é homomorfismo linear entre $\mathbb{Z}^d$ e L.

Passo 2: Mostrar que ϕ é injetiva.

$$0 = \phi(k) - \phi(k) = \phi(k) + \phi(-k) = \phi(k - k) = \phi(0)$$
$$\Rightarrow ker\ \phi = 0$$

Logo, ϕ é injetiva.

Tome $k_1, k_2 \in \mathbb{Z}^d$.

$$\phi(k_1 + k_2) = (k_1 + k_2).a_1 = k_1.a_i + k_2.a_i = \phi(k_1) + \phi(k_2)$$

ϕ é homomorfismo linear entre $\mathbb{Z}^d$ e L.

Passo 2: Mostrar que ϕ é sobrejetora.

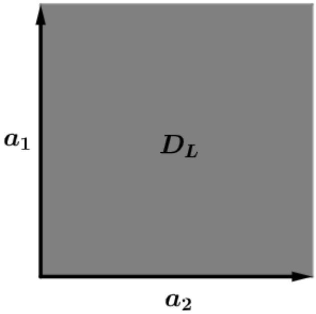
$$Im\ \phi = \{k.a_i\} = \left\{ \sum_{n=1}^{d} (k_i.a_i) \right\} = L$$

Logo, ϕ é sobrejetora.

$$\therefore L \simeq \mathbb{Z}^d$$

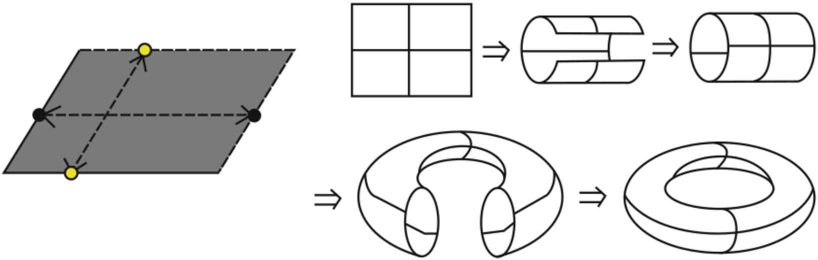
- O que significa D_L?
- Para $d = 2$, D_L é o espaço quociente de $\mathbb{R}^2$ por $\mathbb{Z}^d$:

$$\mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2 = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1\}$$



Grupo Reticulado

Torus bidimensional

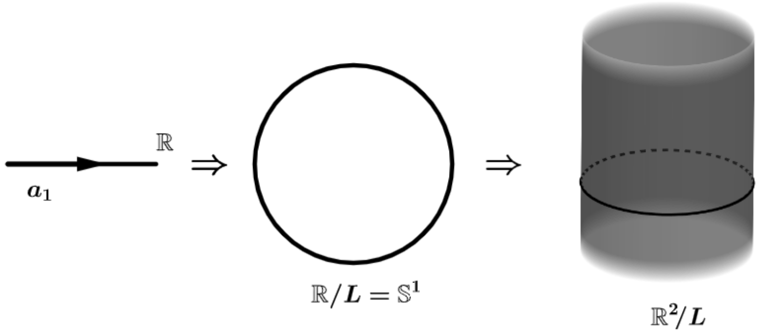


- Assim, D_L é o espaço quociente torus unidimensional.

$$\therefore \mathbb{R}^d / \mathbb{Z}^d = \mathbb{T}^d \;\blacksquare$$

- $\mathbb{T}^d$ herda propriedades de $\mathbb{R}^d$:
  1. É um grupo abeliano com a soma herdada de $\mathbb{R}^d$.
  2. É uma variedade orientável.
  3. Se L é o grupo gerado por $a_1,\ a_2,\cdots,\ a_s,\ s < d$, então $\mathbb{R}^d/L$ é o cilindro de d-dimensional.

- Caso $s = 1$ e $d = 2$:



- Generalizando:

$$C^d = \mathbb{T}^s \wedge \mathbb{R}^{(d-s)}$$

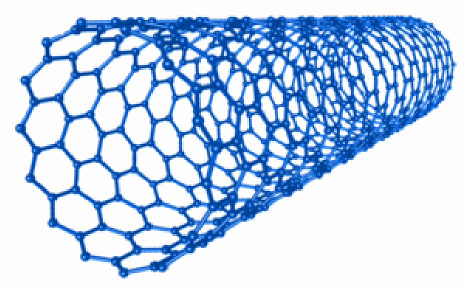
- Dado $\mathbb{Z}^+$ e $a \in \mathbb{Z}$, definimos:

$$\mathbb{Z}a := \{n \in \mathbb{Z} \mid n = a.k, \ \forall \ k \in \mathbb{Z}\}$$

- Note que $\mathbb{Z}a$ é subgrupo de Z^+.

$$\mathbb{R}^2/\mathbb{Z}a = \left\{(x, y, z) \mid x^2 + y^2 = \frac{\|a\|}{4\pi}\right\}$$

- $\mathbb{R}^2/\mathbb{Z}a$ é modelo para nanotubos de carbono.
  - Material mais rígido;
  - Semicondutores ao longo do eixo tubular;
  - Condutores balísticos ao longo do eixo;
  - Isolantes térmicos na direção contra-diretriz.



Grupo Linear Geral

$$GL(n,\mathbb{C}) = \{M \text{ matriz } n \times n \mid det(M) \neq 0\}$$

Grupo Unitário

$$U(n,\mathbb{C}) = \{M \in GL(n,\mathbb{C}) \mid M.M^* = I\}$$

- Dado $M \in U(n,\mathbb{C})$:

$$\begin{aligned} \phi: \quad & U(n,\mathbb{C}) \to \mathbb{T} \\ & M \mapsto e^{i.det(M)} \end{aligned}$$

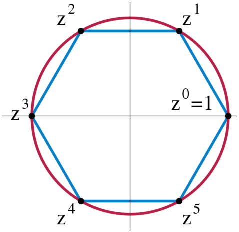
- ϕ é homomorfismo entre $U(1,\mathbb{C})$ e $\mathbb{T}$.

$$\begin{aligned} \phi(M_1 + M_2) \quad & = e^{i.\{det(M_1)+det(M_2)\}} \\ & = e^{i.det(M_1)}.e^{i.det(M_2)} \\ & = \phi(M_1).\phi(M_2) \end{aligned}$$

- ϕ leva cada $M \in U(1, \mathbb{C})$ para o círculo unitário no plano complexo.

$$
\begin{array}{lcl}
e^{i.\theta} \in \mathbb{T} & \xrightarrow{\text{conjugado}} & e^{-i.\theta} \\
[e^{i.\theta}] \in U(1, \mathbb{C}) & \xrightarrow{\text{adjunta}} & [e^{-i.\theta}]
\end{array}
$$

- Tomando o torus unidimensional $\mathbb{T}$ sobre o corpo dos complexos $(\mathbb{C}/\mathbb{Z})$.
- $\mathbb{T}$ é o grupo circular.
  - É subgrupo de $\mathbb{C}^{\times}$.
  - $\mathbb{T}$ aparece na quebra espontânea de simetria (no Mecanismo de Higgs e na quebra de simetria rotacional).
  - Contém todas as raízes da unidade como subgrupo.



Grafo

Chamamos grafo o par ordenado de conjuntos $X = (V, E)$ tal que $V \cap E = \varnothing$.

$$\begin{array}{lll} i: & E \to V \wedge V & \text{(mapa incidência)} \\ I: & E \to E & \text{(mapa inversão)} \end{array}$$

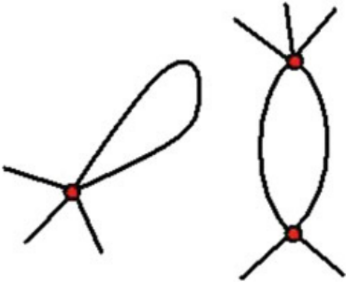
$$\begin{array}{ll} \tau: & V \wedge V \to V \wedge V \\ & (x, y) \mapsto (y, x) \end{array}$$

$$I(I(e)) = I_E \qquad I(e) \neq e \qquad i(I(e)) = \tau(i(e)) \quad \forall\ e \in E$$

Assim: $i(e) = (o(e), t(e))$

$$\begin{array}{lll} o: & E \to V & \text{(origem)} \\ t: & E \to V & \text{(término)} \end{array}$$

- Arestas não orientadas:
  - $e \simeq I(e)$
  - Elementos de $E/\mathbb{Z}_2$



- Dados $X_1 = (V_1, E_1)$ e $X_2 = (V_2, E_2)$, Um morfismo $f : X_1 \to X_2$ é uma correspondência entre os vértices e as arestas, preservando relações de adjacência.
- $f = (f_V, f_E)$

$$f_V : V_1 \to V_2, \quad f_E : E_1 \to E_2$$

- Se f é bijeção, então f é isomorfismo.

$$f^{-1} = (f_V^{-1}, f_E^{-1})$$

- Se $X_1 = X_2, f$ é isomorfismo chamado de automorfismo.

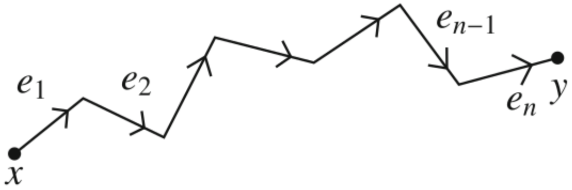
$$\mathrm{Aut}(X) = \{f : X \to X \mid f \text{ é automorfismo}\}$$

- $\mathrm{Aut}(X)$ forma um grupo:
  - Composta de bijeção é bijeção;
  - Composição de bijeção é associativa;
  - Identidade $I = (I_V, I_E)$;
  - Dado f, existe inversa.

- Um caminho em um grafo X é uma sequência de arestas direcionadas:

$$c = (e_1, e_2, \ldots, e_n) \qquad t(e_i) = o(e_{i+1})$$

- $X = (V, E)$ é grafo conexo se, $\forall\, x, y \in V, \exists\, c$ tal que $o(c) = x$ e $t(c) = y$.



- Um grupo G age sobre X quando um homomorfismo de G pertence à $\mathrm{Aut}(X)$.
- Se G age sobre X sem inverter as arestas, temos os espaços órbita para as G-ações:

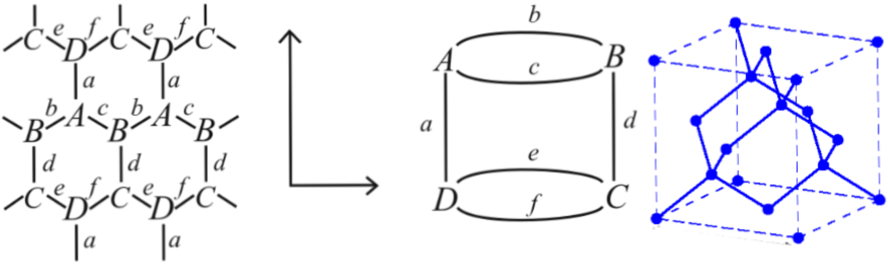
$$E_1 = E/G \qquad V_1 = V/G$$

- $X_1 = (V_1, E_1)$ é chamado grafo quociente.

Grafos

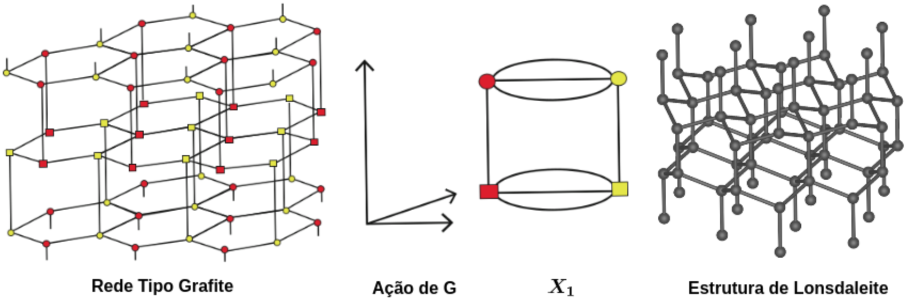
Ação sobre grafo

- X_1 é ação do grupo reticulado gerado pelos dois vetores.
- Rede colmeia é análogo bidimensional da estrutura de um cristal de diamante.



Rede Coméia | Ação de G | X_1 | Cristal de Diamante de Silício

- X_1 é ação do grupo reticulado gerado pelos três vetores.
- Rede tipo grafite é modelo para rede de Lonsdaleite.



- Definimos o grupo abeliano 0-cadeia como:

$$C_0(X,\mathbb{Z}) = \sum_{x\in V}^{\text{finite}} a_x.x \qquad (a_x \in \mathbb{Z})$$

- Onde $a_x = 0$, exceto para, finitamente, muitos x.
- $C_0(X,\mathbb{Z})$ segue as regras:

$$\sum_{x\in V}^{\text{finite}} a_x.x = 0 \Leftrightarrow a_x = 0,\ \forall\ x \in V$$

$$\sum_{x\in V}^{\text{finite}} a_x.x \pm \sum_{x\in V}^{\text{finite}} b_x.x = \sum_{x\in V}^{\text{finite}} (a_x \pm b_x).x$$

- Analogamente, definimos o grupo abeliano 1-cadeia como:

$$C_1(X, \mathbb{Z}) = \sum_{e \in E}^{\text{finite}} a_e . e \qquad (a_e \in \mathbb{Z})$$

- Onde $I(e) = -e$.
- Para manter unicidade da 1-cadeia, uma orientação deve ser fixada, senão:

$$\sum_{e \in E}^{\text{finite}} -a_e . e = C_1(X, \mathbb{Z}) = \sum_{I(e) \in E}^{\text{finite}} a_{I(e)} . I(e)$$

- Homomorfismo entre $C_0(X, \mathbb{Z})$ e $C_1(X, \mathbb{Z})$ é operador bordo:

$$\partial : C_1(X, \mathbb{Z}) \to C_0(X, \mathbb{Z})$$

- Tal que $\partial(e) = t(e) - o(e),\ e \in E$.

- Definimos os primeiro grupo de homologia como:

$$H_1(X, \mathbb{Z}) = \ker \partial = \{\alpha \in C_1(X, \mathbb{Z}) \mid \partial\alpha = 0\}$$

- Tal que:

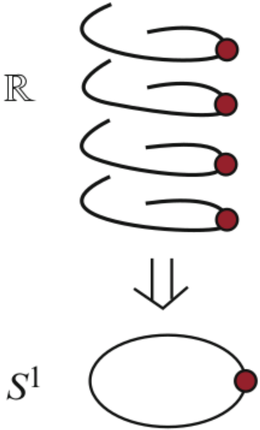
$$\partial\left(\sum_{e \in E} a_e . e\right) = 0 \iff \sum_{\substack{e \in E \\ t(e)=x}} a_e = \sum_{\substack{e \in E \\ o(e)=x}} a_e$$

- Para um grafo finito, se a_e é intensidade da corrente elétrica, a relação é a Lei dos Nós.

- $X = (V, E)$ e $X_0 = (V_0, E_0)$ grafos conexos. A função $\omega : X \to X_0$ é mapa recobrimento se:

    i. $\omega : V \to V_0$ é sobrejeção;

    ii. $\forall\, x \in V,\ \omega \restriction_{E_x} : E_x \to E_{0,\omega(x)}$ é bijeção.



- A fibra sobre $x \in V_0$ é:

$$\omega^{-1}(x) = \{y \in V \mid \omega(y) = x\}$$

- Se $\left|\omega^{-1}\right|$ é infinito para algum $x \in V_0$, então dizemos que ω é dobra infinita.

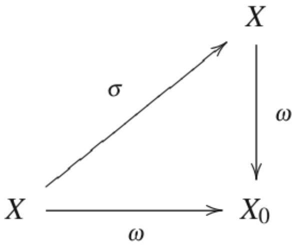
Grupo de Recobrimento

Grupo de Transformações de Recobrimento

- Seja $\omega : X \to X_0$ um recobrimento. Um automorfismo σ de X é transformação de recobrimento se:

$$\omega \circ \sigma = \omega$$

- $G(\omega)$ é o subgrupo dos $\mathrm{Aut}(X)$ das transformações de recobrimento.



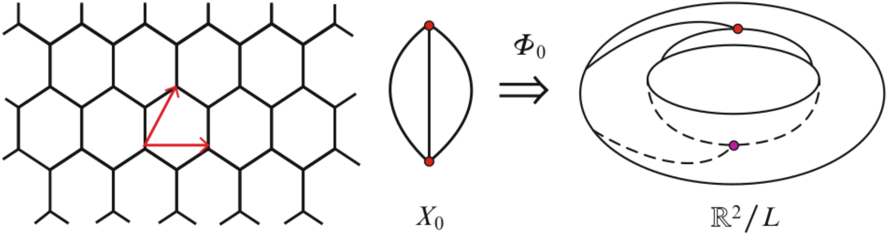
- Dados G e A grupos qualquer, dizemos que:
  - G atua transitivamente em A se o espaço órbita A/G possui um único elemento.
  - G age livremente sobre A se $g \in G$ com $g.x = x$ para algum $x \in A$ tem que ser a identidade.
  - G é simplesmente transitivo se atua livre e transitivamente sobre A.

Cristal Topológico

Um cristal topológico X é um grafo com recobrimento regular de dobra infinita sobre um grafo finito X_0, cujo grupo de transformação de recobrimento é abeliano e livre.

- X é chamado cristal sobre grafo-base X_0.
- O grupo de transformações de recobrimento L é chamado reticulado de período abstrato.
- O grafo maximal de recobrimento abeliano sobre X_0 é o cristal topológico tal que $L = H_1(X_0, \mathbb{Z})$ (Cristal topológico maximal).
- Se $L \simeq \mathbb{Z}^d$, a dimensão de X é $dim\ X = d$

- A rede cristalina no espaço é a imagem de Φ de um cristal topológico X em $\mathbb{R}^3$ tal que:
  - Φ leva arestas de X em segmentos do $\mathbb{R}^3$
  - $\Phi(\sigma.x) = \Phi(x) + \sigma$, $\forall\ \sigma \in L$ e vértice x. (I)
- (I) expressa a natureza periódica do cristal topológico, sob a ação de translação do grupo reticulado.



$$\Phi_0 : X_0 \to \mathbb{R}^2/L$$

- A geometria (superfícies) e a álgebra (grupos) se encontrar para estudar a rede cristalina.

- Cristais apresentam um simetria intrínseca do grupo reticulado
- Os bordos do cristais quebram a simetria espacial
- Cristal quebra a conservação do momento.
  - Processo U e quasemomentum
- Cristais do tempo quebram conservação local da energia

Toshikazu Sunada

Professor emérito das Universidades de Meiji e de Tohoku
Estuda geometria espectral e análise geométrica discreta
Autor do livro "Topological Crystallography: With a View Towards Discrete Geometric Analysis"

Referências

- Baez, J. C. Topological Crystals. *arXiv:1607.07748 [math].* arXiv: 1607.07748. http://arxiv.org/abs/1607.07748 (2020) (jul. de 2016).
- Brasselet, J.-P. *Introduction to toric varieties.* (IMPA, Rio de Janeiro, 2004).
- *Carbon nanotube.* Mar. de 2020. https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Carbon_nanotube&oldid=943707724 (2020).
- Massey, W. S. *Algebraic Topology: An Introduction.* (Springer, New York, jan. de 1990).
- Sunada, T. *Topological Crystallography: With a View Towards Discrete Geometric Analysis.* 2013 edition (Springer, Tokyo, dez. de 2012).
- *Time Crystals Are (Not) Interesting.* Library Catalog: www.space.com. https://www.space.com/38100-the-significance-of-time-crystals.html (2020).