Translacje

translacja o wektor a, t_a

$$t_{-a} = (t_a)^{-1}$$

$$t_a t_b = t_b t_a = t_{a+b}$$

translacje tworzą grupę abelową
grupa translacji G jest izomorficzna do grupy wektorów H, w której operacją składania jest dodawanie wektorów (elementem jednostkowym w H jest wektor 0)

jedno/dwu/trój/wymiarowa grupa translacji G,
gdy dim (H) = 1/2/3

Grupa afiniczna - grupa zawierająca wszystkie translacje oraz wszystkie transformacje *punktowe* przestrzeni (3D) w siebie

- grupa czystych translacji jest jej podgrupą

Grupa przestrzenna G_P -
to podgrupa grupy afinicznej , w której translacje są typu

$$\{E, \vec{t}_n\}, \qquad \vec{t}_n = n_1\vec{t}_n + n_2\vec{t}_2 + n_3\vec{t}_3$$

t_i* – *trzy niezależne wektory,

tzn. zawiera obroty, odbicia i translacje sieciowe - w kryształach;

Grupa punktowa grupy przestrzennej to podgrupa przekształceń *punktowych* grupy G_P

każdy element w grupie przestrzennej $g = t_a r$,
gdzie r - odbicie, obrót lub obrót zwierciadlany

$g = t_a r$ zapisujemy jako $(r|a)$

(translacja może być o wektor ||, ⊥, lub dowolny inny) grupa przestrzenna zawiera nowe elementy:

- **osie śrubowe**
- **płaszczyzny poślizgu**

(co to znaczy nowe elementy… - przejście punktów układu w punkty równoważne, inaczej niż poprzez r lub poprzez t_a)

Niech r - obrót wokół osi l : $C_l(\alpha)$;
rozkładając a na

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}_\perp + \mathbf{a}_\parallel$$

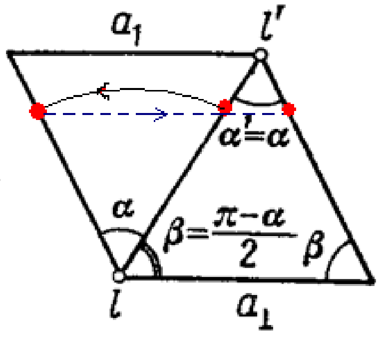
tzn., składowe prostopadłe i równoległe do osi

wówczas
$$g = t_{\mathbf{a}_\parallel} t_{\mathbf{a}_\perp} c_l(\alpha)$$

.. mamy tu jednocześnie z obrotem – przesunięcie wzdłuż osi, oraz przesunięcie prostopadłe do osi..

Tw. Chaslesa:
Każde przekształcenie <u>w płaszczyźnie</u>, z $\alpha \neq 0$, jest czystym obrotem wokół pewnej osi l', a dla $\alpha = 0$, jest czystą translacją

żeby znaleźć punkt położenia osi l' , rysujemy wektor $a_\perp$, a następnie z punktu l i końca wektora $a_\perp$ poprowadzić proste pod kątami $(\pi-\alpha)/2$



dla przykładu weźmy dowolny punkt z odcinka (l,l')
ćwiczenia – punkt z prostej kąta alfa
Zatem

$$t_{\mathbf{a}_\perp} c_l(\alpha) = c_{l'}(\alpha)$$

i ostatecznie taki element w grupie przestrzennej można zawsze zapisać jako

$$g_s = t_{\mathbf{a}_{\parallel}} c_{l'}(\alpha)$$

co definiuje ***przekształcenie śrubowe***

....

płaszczyzna poślizgu **- złożenie odbicia i przesunięcia na płaszczyźnie**

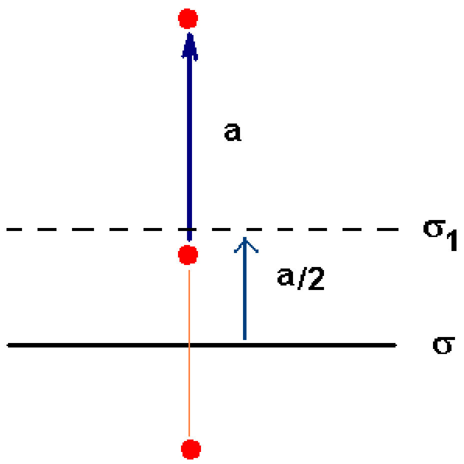
rozkładając ponownie

na składową prostopadłą do płaszczyzny i równoległą

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}_{\perp} + \mathbf{a}_{\parallel}$$

mamy:

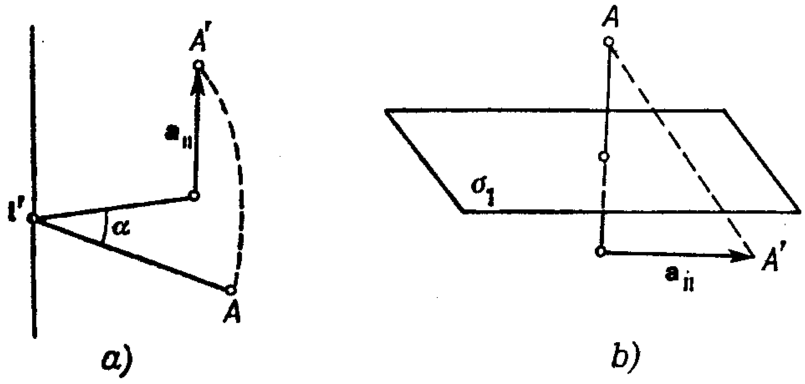
$$t_{\mathbf{a}_{\perp}} \sigma = \sigma_1$$



gdzie σ_1 jest odbiciem w płaszczyźnie || do σ i odległej o ½ składowej prostopadłej a, mamy:

$$g_p = t_{\mathbf{a}_{\parallel}} \sigma_1$$

i jest odbiciem z poślizgiem



w ogólności każdy element grupy przestrzennej to g_p lub g_s

(w których w szczególnych przypadkach r, σ lub t, mogą być zerowe)

Elementy sprzężone do translacji t_a - to translacje o wektor otrzymany z działania na niego wszystkimi innymi operacjami typu obrotowego z grupy punktowej:
(A)

$$rt_{\mathbf{a}}r^{-1} = t_{r\mathbf{a}}$$

trywialny dowód: **(r^{-1} x to pewien wektor y)**

$$rt_{\mathbf{a}}r^{-1}\mathbf{x} = r(r^{-1}\mathbf{x} + \mathbf{a}) = \mathbf{x} + r\mathbf{a}$$

z (A) wynika też, że

$$rt_{\mathbf{a}} = t_{r\mathbf{a}}r$$

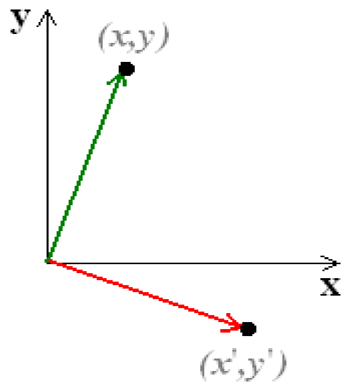
(translacje i obroty nie koniecznie są przemienne)

Przekształcenia symetrii zmieniają położenia punktów (wektorów) tj. ich współrzędne kartezjańskie x, y, z na x', y', z' ,

oznaczając

$$\mathbf{x} = (x, y, z) = (x_1, x_2, x_3)$$

w 2D :



mamy

$$\mathbf{x}' = r\mathbf{x} = R(r)\mathbf{x}$$

$$x_i' = \sum_s R_{is}(r) x_s$$

jako liniową transformację współrzędnych;

R(r) jest macierzą rzeczywistą, *dim R = 3*

R - zachowuje długości wektorów i kąty między nimi, to *R* jest macierzą ortogonalną

$$R^T = R^{-1}$$

I spełniona jest relacja ortogonalności

$$\sum_s R_{is}^T(r) R_{sk}(r) = \delta_{ik}$$

Jeśli dokonamy transformacji układu współrzędnych (a nie transformację współrzędnych punktu w nieruchomym układzie współrzędnych), to odpowiada temu transformacja R^T

ponieważ, $\det R^T = \det R$, a $RR^T = I$, ($I = 1$), zatem

$(\det R)^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad \det R = \pm 1$

dla czystych obrotów det R = 1 (obroty właściwe)
dla przekształceń II-go rodzaju det R = -1 (obroty niewłaściwe)

macierze R tworzą grupę

grupa macierzy R jest izomorficzna z grupą punktową przekształceń

składaniu elementów grupy (przekształceń) odpowiada zwykłe mnożenie macierzy

$$R(r_1 r_2) = R(r_2) R(r_1)$$

translacja to:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{a}$$

a przekształcenie $t_a r$:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{a} + R(r)\mathbf{x}$$

Tw.
W grupie transformacji ortogonalnych zawierających obroty niewłaściwe, zbiór obrotów właściwych stanowi zawsze podgrupę

dowód – oczywisty biorąc pod uwagę własności macierzy *R* .

zobaczmy jak translacja wpływa na funkcje współrzędnych;
weźmy dowolną funkcję

$$f(\mathbf{x})$$

i zbadajmy $f(\mathbf{x} + \mathbf{a})$

$$f(\mathbf{x} + \mathbf{a}) = f(\mathbf{x}) + \sum_i \left(\frac{\partial}{\partial x_i} f(\mathbf{x}) \right) a_i + \ldots$$

ale $\mathbf{p} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$

$$f(\mathbf{x}+\mathbf{a}) = e^{i\mathbf{pa}/\hbar} f(\mathbf{x}) \qquad (*)$$

zatem translacji t_a o wektor a argumentu funkcji f, odpowiada operacja (*) na funkcji f, lub inaczej operator T_a

możemy zapisać:

$$f(\mathbf{x}+\mathbf{a}) = \mathbf{T_a} f(\mathbf{x})$$

jeśli f(x) jest funkcją własną *p*, to wartościami własnymi T_a

będą e^{ika}, gdzie wartość własna operatora pędu to p=hk ;

pojawia się pojęcie wektora falowego k, jako liczby (w ogólności trójki liczb – współrzędnych k) numerującej wartości własne operatora translacji

k – liczba kwantowa

albo inaczej:
jeśli f(x) jest funkcją własną T_a, $T_a f(x) = \lambda f(x)$, $\lambda = e^{ika}$, to f(x) jest funkcją własną operatora pędu (tu: współrzędnej p_x)

związek niezmienniczości względem przesunięć i zasady zachowania pędu(twierdzenie Noether)