Csoportelmélet

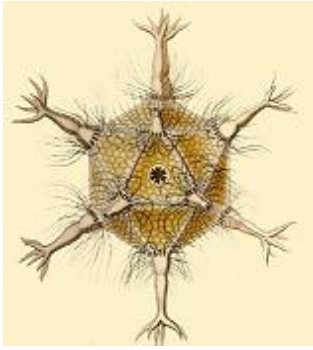
fizikus hallgatóknak

Bántay Péter

ELTE, Elméleti Fizika tanszék

1. Bevezetés

Szimmetria: vizsgált objektum lényeges tulajdonságait változatlanul hagyó transzformáció (emberi test kétoldali részaránysága; épületek tükörszimmetrikus felépítése; tüskésbőrűek ötfogású szimmetriája; focilabda, ill. bizonyos egysejtűek és vírusok ikozaéderes szimmetriája).



Csoport: szimmetriák (& homológia) algebrájának absztrakt jellemzése.

Csoportelmélet az egyik legjelentősebb matematikai diszciplína az alkalmazások (matematika, fizika, kémia, informatika, stb.) szempontjából.

kvalitatív $\rightsquigarrow$ kvantitatív információ

Példák:

1. Fenomenologikus jellemzők leszámolása

$$\sigma_{ij} = L_{ijkl} u_{kl}$$ Hooke-törvény

u_{ij}, ill. σ_{ij} a deformáció- és a feszültségtenzor.

Onsager-féle szimmetriarelációk

$$L_{ijkl} = L_{jikl} = L_{klij} = \cdots$$

Független L_{ijkl} rugalmas együtthatók száma?

Izotrop esetben 2 (Young–modulusok), triklin rendszerben 21.

Adott (kristály)szimmetria esetén

$$\frac{1}{8}\sum_{g\in G}\left\{\mathrm{Tr}(g)^4+2\mathrm{Tr}(g)^2\,\mathrm{Tr}\left(g^2\right)+3\mathrm{Tr}\left(g^2\right)^2+2\mathrm{Tr}\left(g^4\right)\right\}$$

ahol G a kristály szimmetriacsoportja (pontcsoport).

Általában: a skalár szabadenergia a szimmetrikus deformációtenzornak egy invariáns polinomja, így a feladat a pontcsoport szimmetrikus négyzete fundamentális invariánsainak meghatározása (fenti képlet a független másodrendű invariánsok számát adja).

2. Parciális differenciálegyenletek redukciója

Adott szimmetriájú peremérték-feladat megoldásai által kielégített egyszerűbb (kevesebb változós) egyenletek meghatározása.

A megoldások csak a szimmetriacsoport invariánsaitól függhetnek, így azt kell vizsgálni, hogy ezen invariánsok (mint görbevonalú koordináták) függvényében milyen alakot ölt a differenciálegyenlet.

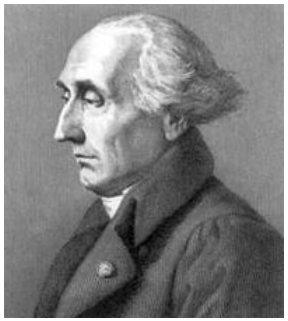
Például a $\Delta\Phi = 0$ Laplace-egyenlet redukált alakja gömbszimmetrikus peremfeltételek esetén

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\Phi}{dr}\right) = 0$$

(r, ϕ, ϑ) gömbi koordinátákat használva.

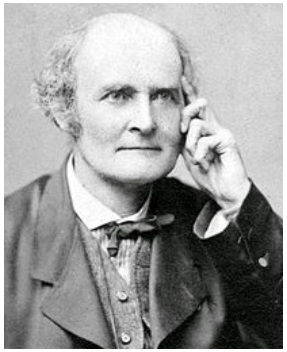
2. Történeti áttekintés

Antikvitás (Eukleidész, Arkhimédész): szimmetriaelvek alkalmazása geometriai problémákra, szabályos testek osztályozása.



J.-L. Lagrange (1771): polinom-egyenletek megoldhatósága.

É. Galois (1832): Galois-elmélet (polinom-egyenletek, geometriai szerkeszthetőség).



A. Cayley (1854): absztrakt csoportfogalom.

É. Mathieu (1861,1873): Mathieu-csoportok.

F. Klein (1873): geometriák osztályozása.

S. Lie (1871-1893): folytonos (transzformáció-)csoportok.

H. Poincaré (1882): homológia-csoportok.

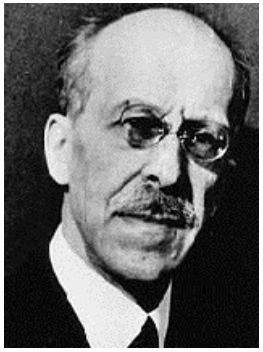
É. Picard (1883): differenciális Galois-elmélet.

D. Hilbert (1888): invariánselmélet, homológikus algebra.

W. Killing (1880-1890), É. Cartan (1894): egyszerű Lie-algebrák.

G.F. Frobenius (1896): ábrázoláselmélet.

W. Burnside (1903): véges csoportok.



I. Schur (1904): projektív ábrázolások.

A. Haar (1933): invariáns mérték és integrál.

1966-1976: véges egyszerű csoportok osztályozása.

Csoportelmélet a fizikában

Reneszánsz: szimmetriaelvek alkalmazása a statikában (Stevinus).

L. Euler (1765): merev testek mozgása.

E.S. Fedorov (1891), L. Schönflies (1891) és W. Barlow (1894): háromdimenziós kristályszimmetriák osztályozása.

H. Poincaré (1900): Maxwell-egyenletek szimmetriái (relativitáselmélet).

E. Noether (1915): szimmetriák és megmaradási törvények.

E. Wigner: szimmetriák a kvantumelméletben (1933), relativisztikus hullámegyenletek (1947).

C.N. Yang és R. Mills (1954): nem-ábeli mértékelméletek.

M. Gell-Mann (1963): nyolcas út (kvark-modell).

D. Shechtman (1982): kvázi-kristályok.

3. Csoportaxiómák

X halmazon értelmezett kétváltozós művelet: $\star : X \times X \to X$ leképezés (két elemhez egyértelműen rendel hozzá egy harmadikat).

Példák: egész (racionális, valós, komplex, ...) számok összeadása és szorzása, egész számok legkisebb közös többszöröse, vektorok összege és vektoriális szorzata (de nem a skaláris szorzat), lineáris operátorok összege és szorzata, ...

Multiplikatív jelölésmód: a $\star(x, y)$ prefix jelölés helyett szokásos az $x \star y$, vagy egyszerűen csak xy infix jelölés a művelet eredményére ($x, y \in X$ elemek szorzata).

Egy X-en értelmezett kétváltozós művelet

asszociatív, ha bármely $x, y, z \in X$ esetén

$$x(yz) = (xy)z$$

kommutatív, ha bármely $x, y \in X$ esetén

$$xy = yx$$

egységelemes, ha létezik olyan $\mathbf{1}_X \in X$ elem, hogy $\forall x \in X$-re

$$\mathbf{1}_X x = x\mathbf{1}_X = x$$

$\phi\colon X_1 \to X_2$ leképezés műveletartó, ha minden $x, y \in X_1$ esetén

$$\boxed{\phi(xy) = \phi(x)\,\phi(y)}$$

Csoport: elemek egy G halmaza egy rajtuk értelmezett asszociatív és egységelemes kétváltozós művelettel, amennyiben minden $x \in G$ elemnek létezik inverze, vagyis egy olyan $x^{-1} \in G$ elem, amelyre

$$xx^{-1} = x^{-1}x = \mathbf{1}_G$$

Csoportművelet kommutatív $\rightsquigarrow$ kommutatív csoport (Abel-csoport).

Csoport rendje = elemeinek számossága.

Izomorfizmus: bijektív művelettartó leképezés.

G és H csoportok izomorfak, jelben $G \cong H$, amennyiben létezik $\phi : G \to H$ izomorfizmus.

Izomorfia reflexív ($G \cong G$), szimmetrikus ($G \cong H$ esetén $H \cong G$) és tranzitív ($G \cong H$ és $H \cong K$esetén $G \cong K$), de nem ekvivalencia-reláció, mert túl sok csoport van (Russel-féle antinómia).

Izomorf csoportok rendje megegyezik: $G \cong H \rightsquigarrow |G| = |H|$.

Izomorfia-elv: izomorf csoportok algebrai szempontból egymástól megkülönböztethetetlenek.

Automorfizmus-csoport:

$$\mathrm{Aut}(G) = \{\alpha : G \to G \mid \alpha \text{ izomorfizmus}\}$$

a kompozíció műveletével (csoportstruktúra szimmetriái).

Csoportfogalom általánosításai

1. Félcsoport (csak a szorzás asszociativitását követeljük meg) és monoid (egységelemes félcsoport): automaták elmélete (& matematikai nyelvészet), renormálás elmélete, stb.

2. Kvázi-csoport (csak az inverzek létét követeljük meg): kombinatorikai alkalmazások.

3. Grupoid (parciálisan definiált szorzás): kvázi-kristályok.

4. Kvantum-, szuper-, stb. csoportok: elméleti fizikából.

4. Példák

4.1. Számcsoportok

Számgyűrű: számok (egész, racionális, valós, komplex, ...) olyan halmaza, mely tartalmazza bármely két elemének szorzatát és különbségét.

Példák: $\mathbb{Z}$, $\mathbb{Q}$, $\mathbb{R}$, $\mathbb{C}$, $2\mathbb{Z}$ (páros egészek), de a páratlan egészek $2\mathbb{Z}+1$ halmaza *nem* számgyűrű (páratlan számok különbsége páros).

a eleme egy R számgyűrűnek $\rightsquigarrow$

1. $0=a-a$ és $-a=0-a$ is eleme R-nek;
2. $a,b\in R$ esetén $a+b=a-(-b)$ is eleme R-nek.

Összeadás asszociatív, kommutatív, egységelemes $(a+0=a)$ művelet, és egy számgyűrű minden elemének létezik additív inverze $(a+(-a)=0)$ $\rightsquigarrow$ számgyűrűk elemei az összeadás műveletével Abel-csoportot alkotnak (additív számcsoportok).

Szorzás asszociatív, kommutatív és egységelemes (1) művelet, de általában nem minden számnak létezik multiplikatív inverze az adott számgyűrűn belül (például 2-nek nincs inverze $\mathbb{Z}$-ben, vagy 0-nak $\mathbb{Q}$-ban).

Számtest: olyan számgyűrű, melyben minden nemzérus elemnek létezik multiplikatív inverze (reciproka); pl. $\mathbb{Q}$, $\mathbb{R}$ és $\mathbb{C}$.

Számtestek nemzérus elemei Abel-csoportot alkotnak a szorzás műveletével (multiplikatív számcsoportok).

4.2. Maradékosztály-gyűrűk

Maradékos osztás tétele (Eukleidész): bármely $a \in \mathbb{Z}$ egész és $n > 0$ pozitív egész esetén léteznek olyan $q \in \mathbb{Z}$ (az a és n hányadosa) és $0 \leq r < n$ (az osztási maradék) egész számok, hogy $a = qn + r$.

Maradékosztály: azon egészek halmaza, amelyek egyazon osztási maradékot adják valamely pozitív egésszel (a modulussal) történő osztáskor.

$$n\mathbb{Z} + r = \{nq + r \mid q \in \mathbb{Z}\}$$

Két, azonos modulusú maradékosztályból vett számpárok összege és szorzata maradékosztályt alkot $\rightsquigarrow$ maradékosztályok $\mathbb{Z}_n$ gyűrűje (n elemű).

4.3. Szimmetrikus és alternáló csoportok

Permutáció: véges halmazt önmagába képező bijektív (kölcsönösen egyértelmű) leképezés.

Permutációk szorzása: leképezések kompozíciója (asszociatív és egységelemes művelet, egységeleme az $\mathbf{id}_X : x \mapsto x$ identikus leképezés).

Permutáció inverze: inverz leképezés (szintén bijektív).

X véges halmaz permutációinak összessége csoportot alkot, az X feletti $\mathsf{Sym}(X)$ szimmetrikus csoportot ($|X| > 2$ esetén nem-kommutatív).

Ha X elemszáma n, akkor $\mathsf{Sym}(X)$ rendje (elemszáma)

$$\big|\mathsf{Sym}(X)\big| = n!$$

Transzpozíció: két elem felcserélése.

Minden permutáció előáll (nem egyértelműen) transzpozíciók szorzataként: bár a felbontásban szereplő transzpozíciók száma sem egyértelmű, de azok paritása (páros vagy páratlan volta) az $\rightsquigarrow$ páros és páratlan permutációk.

Páros permutációk szorzata és inverze szintén páros $\rightsquigarrow$ páros permutációk csoportot alkotnak, az X feletti $\mathsf{Alt}(X)$ alternáló csoportot (rendje fele $\mathsf{Sym}(X)$ rendjének).

$\mathsf{Sym}(X)$ és $\mathsf{Sym}(Y)$, ill. $\mathsf{Alt}(X)$ és $\mathsf{Alt}(Y)$ izomorf ha $|X| = |Y|$ $\rightsquigarrow$ $\mathbb{S}_n = \mathsf{Sym}(\{1, \ldots, n\})$ és $\mathbb{A}_n = \mathsf{Alt}(\{1, \ldots, n\})$ n-ed fokú szimmetrikus (alternáló) csoportok.

4.4. Lineáris csoportok

Egy V lineáris tér feletti lineáris operátorok szorzata (kompozíciója) szintén lineáris operátor, és a szorzás asszociatív művelet, melynek egységeleme az $\mathbf{id}_V : x \mapsto x$ identitásoperátor.

Észrevétel. Lineáris operátorok szorzása általában nem kommutatív (kivéve, ha $\dim V = 1$).

$A : V \to V$ lineáris operátor akkor bijektív (invertálható), ha a determinánsa nem zérus: $\det A \neq 0$.

Determináns multiplikatív: $\det(AB) = \det A \det B$.

$\rightsquigarrow$ invertálható operátorok szorzata is invertálható.

Általános lineáris csoport: V lineáris tér feletti invertálható lineáris operátorok

$$\mathsf{GL}(V) = \{A\colon V \to V \mid \det A \neq 0\}$$

összessége az operátorok szorzásával mint művelettel.

$\dim V > 1$ esetén $\mathsf{GL}(V)$ nem kommutatív, míg $\dim V = 1$ esetben azonosítható a skalárok testének multiplikatív csoportjával (kommutatív).

Speciális lineáris csoport: egységnyi determinánsú lineáris operátorok

$$\mathsf{SL}(V) = \{A\colon V \to V \mid \det A = 1\}$$

csoportja.

4.5. Unitér csoportok

Unitér operátor: inverz = adjungált (hermitikus konjugált).

$\mathcal{H}$ komplex Hilbert–tér feletti $\mathsf{U}(\mathcal{H})$ unitér csoport: unitér operátorok összessége a kompozíció (operátorok szorzata) műveletével.

$\mathsf{SU}(\mathcal{H})$ speciális unitér csoport: egységnyi determinánsú unitér operátorok csoportja.

Véges $n = \dim \mathcal{H}$ dimenziós esetben $\mathsf{U}(\mathcal{H})$ és $\mathsf{SU}(\mathcal{H})$ szerkezetét meghatározza (izomorfia erejéig) annak dimenziója $\rightsquigarrow$ $\mathsf{U}(n)$ és $\mathsf{SU}(n)$ csoportok.

Fontos szerepet játszanak a kvantumelméletben (Wigner tétele) és a részecskefizikában (belső szimmetriák).

4.6. Ortogonális és szimplektikus csoportok

Bilineáris forma (V lineáris téren): skalár értékű kétváltozós függvény V-n, amely mindkét változójában lineáris

$$\boldsymbol{\beta}(\alpha\mathtt{x}+\beta\mathtt{y},\mathtt{z}) = \alpha\boldsymbol{\beta}(\mathtt{x},\mathtt{z}) + \beta\boldsymbol{\beta}(\mathtt{y},\mathtt{z})$$
$$\boldsymbol{\beta}(\mathtt{x},\alpha\mathtt{y}+\beta\mathtt{z}) = \alpha\boldsymbol{\beta}(\mathtt{x},\mathtt{y}) + \beta\boldsymbol{\beta}(\mathtt{x},\mathtt{z})$$

minden α,β skalárra és $\mathtt{x},\mathtt{y},\mathtt{z}\in V$ vektorokra.

Degenerált forma: létezik nemzérus $\mathtt{x}\in V$ vektor, hogy $\boldsymbol{\beta}(\mathtt{x},\mathtt{y})=0$ (vagy $\boldsymbol{\beta}(\mathtt{y},\mathtt{x})=0$) minden $\mathtt{y}\in V$-re.

$\boldsymbol{\beta}$ bilineáris forma szimmetrikus, ill. antiszimmetrikus (alternáló) attól függően, hogy $\boldsymbol{\beta}(\mathtt{y},\mathtt{x})=\boldsymbol{\beta}(\mathtt{x},\mathtt{y})$ vagy $\boldsymbol{\beta}(\mathtt{y},\mathtt{x})=-\boldsymbol{\beta}(\mathtt{x},\mathtt{y})$ ha $\mathtt{x},\mathtt{y}\in V$.

Minden forma felbontható (egyértelműen) egy szimmetrikus $\boldsymbol{\beta}_+$ és egy alternáló $\boldsymbol{\beta}_-$ forma összegére: $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}_+ + \boldsymbol{\beta}_-$, ahol

$$\boldsymbol{\beta}_\pm(\mathtt{x}, \mathtt{y}) = \frac{\boldsymbol{\beta}(\mathtt{x}, \mathtt{y}) \pm \boldsymbol{\beta}(\mathtt{y}, \mathtt{x})}{2}$$

Sylvester tétele: egy valós n dimenziós lineáris téren értelmezett $\boldsymbol{\beta}$ szimmetrikus bilineáris formához mindig választható olyan $\{\mathtt{b}_1, \ldots, \mathtt{b}_n\}$ bázis, hogy $\mathtt{x} = \sum_i x_i \mathtt{b}_i$ és $\mathtt{y} = \sum_i y_i \mathtt{b}_i$ esetén

$$\boldsymbol{\beta}(\mathtt{x}, \mathtt{y}) = \sum_{i=1}^{p} x_i y_i - \sum_{i=p+1}^{p+q} x_i y_i$$

ahol $0 \leq p, q \leq p+q \leq n$; a forma degenerált, ha $p+q < n$.

Darboux tétele: egy valós n dimenziós lineáris téren értelmezett $\boldsymbol{\beta}$ alternáló bilineáris formához mindig választható olyan $\{\mathtt{b}_1, \ldots, \mathtt{b}_n\}$ bázis, hogy $\mathtt{x} = \sum_i x_i \mathtt{b}_i$ és $\mathtt{y} = \sum_i y_i \mathtt{b}_i$ esetén

$$\boldsymbol{\beta}(\mathtt{x}, \mathtt{y}) = \sum_{i=1}^{p} (x_i y_{i+p} - x_{i+p} y_i)$$

ahol $0 \leq p \leq n/2$; a forma degenerált, ha $2p < n$.

Bilineáris forma automorfizmusa: olyan $A \in \mathsf{GL}(V)$ operátor, melyre

$$\boldsymbol{\beta}(A\mathtt{x}, A\mathtt{y}) = \boldsymbol{\beta}(\mathtt{x}, \mathtt{y})$$

minden $\mathtt{x}, \mathtt{y} \in V$ esetén.

Automorfizmusok csoportot alkotnak a kompozíció műveletével.

$\mathsf{O}(p,q)$ ortogonális csoport: nem-degenerált, (p,q) szignatúrájú valós szimmetrikus bilineáris forma automorfizmusainak csoportja.

$\mathsf{SO}(p,q)$ speciális ortogonális csoport: ortogonális csoport egységnyi determinánsú elemei.

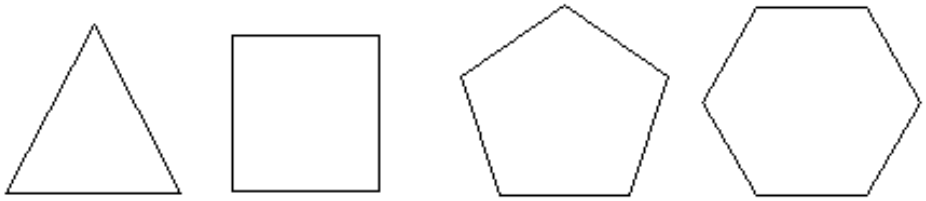
$\mathsf{Sp}(2p)$ szimplektikus csoport: nem-degenerált, $2p$ dimenziós valós alternáló forma automorfizmusainak csoportja.

Fontos szerepet játszanak a fizika minden területén: $\mathsf{SO}(3)$ azonosítható a háromdimenziós forgáscsoporttal (egy kiválasztott pontot fixen hagyó, irányítás- és távolságőrző transzformációk), $\mathsf{SO}(3,1)$ a Lorentz–csoporttal, a szimplektikus csoportok pedig a klasszikus mechanika kanonikus formalizmusában fontos

4.7. Geometriai szimmetriacsoportok

Mértani alakzat szimmetriája: olyan transzformáció, amely az alakzatot önmagával fedésbe hozza.

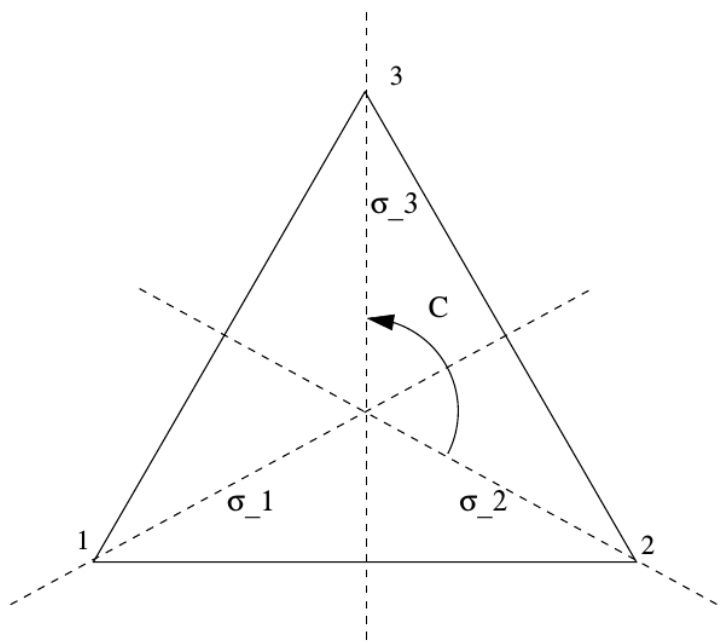
Szabályos sokszög: olyan konvex síkbeli alakzat, melynek oldalai mind egybevágóak ($\rightsquigarrow$ azonos a hosszúk, és a szomszédos oldalak által bezárt szögek is megegyeznek).



Hasonlósági transzformáció erejéig minden $n > 2$ egészre pontosan egy szabályos n-szög létezik.

Szabályos sokszög oldalfelező merőlegesei mind átmennek egy közös ponton (sokszög középpontja).

Szabályos n-szög szimmetriái: $2\pi/n$ szög többszörösével történő középpont körüli forgatások + oldalfelező merőlegesekre és középpontot csúcspontokkal összekötő egyenesekre való tükrözések.



Páros n esetén átellenes oldalak felezőmerőlegesei egybeesnek, ahogy az átellenes csúcspontokat a középponttal összekötő egyenesek is $\rightsquigarrow$ n darab különböző tükrözési tengely.

Páratlan n esetén oldalfelező merőlegesek mind különböznek egymástól, de mindegyik átmegy valamelyik csúcsponton $\rightsquigarrow$ újfent n darab különböző tükrözési tengely.

n-ed fokú $\mathbb{D}_n$ diédercsoport: szabályos n-szög szimmetriacsoportja.

$$\left|\mathbb{D}_n\right| = 2n$$

(n különböző forgatás és n tükrözés).

Csoportstruktúra leírása: Cayley–tábla (szorzótábla, alacsony elemszám esetén használható).

G	$\mathbf{1}_G$	$\dots$	h	$\dots$
$\mathbf{1}_G$	$\mathbf{1}_G$	$\dots$	h	$\dots$
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\ddots$
g	g	$\dots$	gh	$\dots$
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\ddots$

Sokszög önmagával fedésbe kerül $\rightsquigarrow$ csúcspont csúcspontba, oldal oldalba, tükrözési tengely tükrözési tengelybe megy át $\rightsquigarrow$ minden szimmetriatranszformációhoz tartozik a csúcspontok (oldalak, stb.) egy permutációja, amely egyértelműen jellemzi a szimmetriát.

$\pi\colon \mathbb{D}_n \to \mathbb{S}_n$ művelettartó leképezés (permutációs hatás).

$\left|\mathbb{D}_3\right| = \left|\mathbb{S}_3\right| = 3!$, ezért $n = 3$ esetén a permutációs hatás bijektív $\rightsquigarrow$

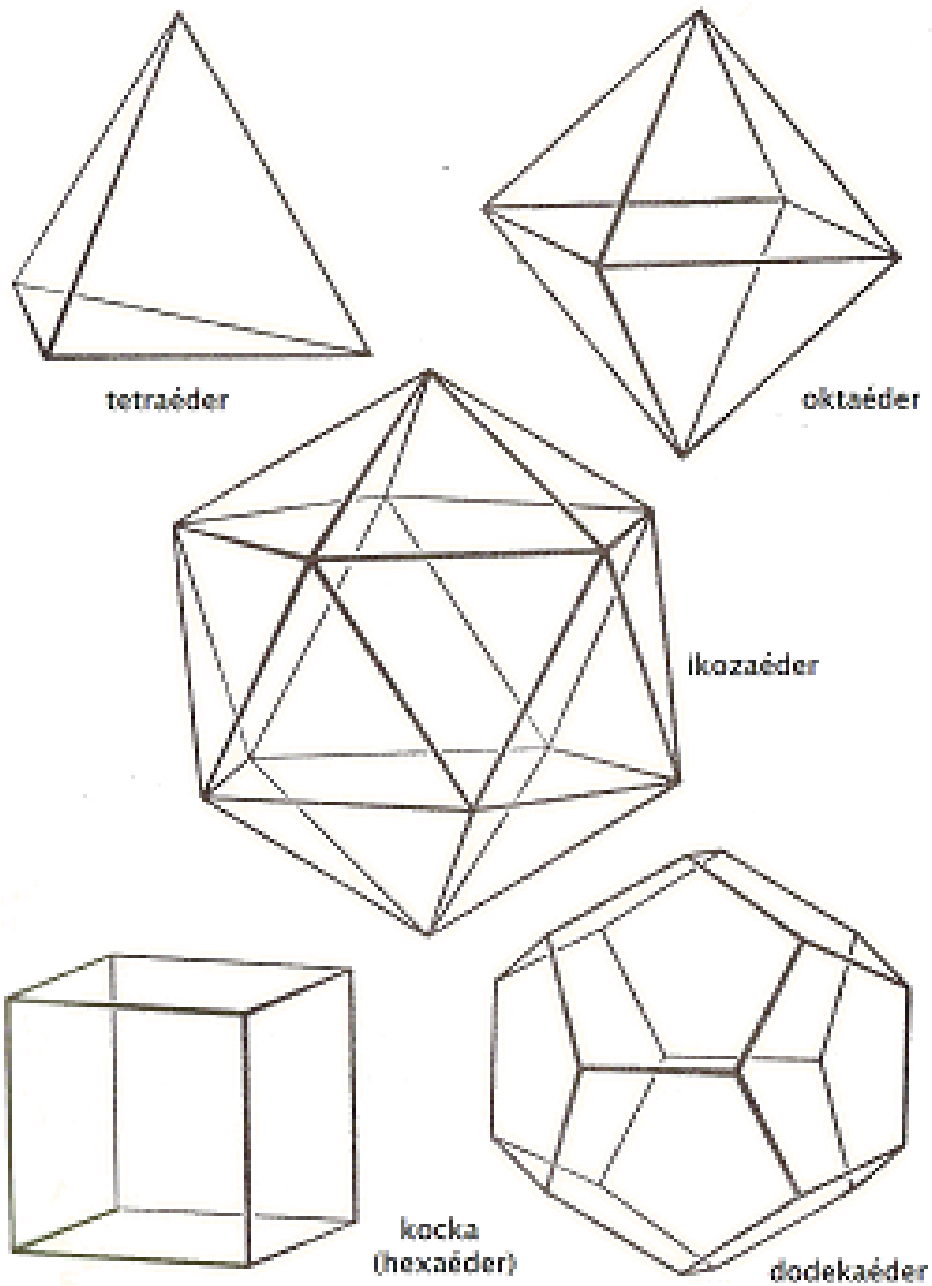
$\mathbb{D}_3$ és $\mathbb{S}_3$ izomorf egymással.

π	$\mathbb{D}_3$	1	C	C^2	σ_1	σ_2	σ_3
$()$	1	1	C	C^2	σ_1	σ_2	σ_3
$(1,2,3)$	C	C	C^2	1	σ_3	σ_1	σ_2
$(1,3,2)$	C^2	C^2	1	C	σ_2	σ_3	σ_1
$(2,3)$	σ_1	σ_1	σ_2	σ_3	1	C	C^2
$(1,3)$	σ_2	σ_2	σ_3	σ_1	C^2	1	C
$(1,2)$	σ_3	σ_3	σ_1	σ_2	C	C^2	1

Szabályos test: olyan konvex térbeli alakzat, melynek lapjai egybevágó szabályos sokszögek ($\rightsquigarrow$ élek mind azonos hosszúságúak).

Három dimenzióban öt szabályos test (hasonlóság erejéig):

1. tetraéder (4 egybevágó háromszög);
2. oktaéder (8 háromszög);
3. ikozaéder (20 háromszög);
4. kocka (hexaéder: 6 négyzet);
5. dodekaéder (12 szabályos ötszög).


tetraéder
oktaéder
ikozaéder
kocka
(hexaéder)
dodekaéder

Szabályos testek szimmetriacsoportjai:

- $\mathbf{T} \cong \mathbb{A}_4$ (tetraéder),
- $\mathbf{O} \cong \mathbb{S}_4$ (oktaéder $\rightleftharpoons$ kocka)
- $\mathbf{I} \cong \mathbb{A}_5$ (ikozaéder $\rightleftharpoons$ dodekaéder).

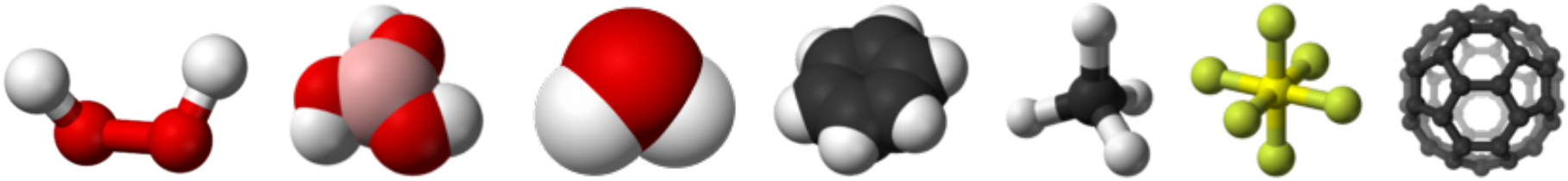
Négydimenziós szabályos (konvex) poliéderek: szimplex (5-cella), ortoplex (16-cella), hiperkocka (8-cella), 600-cella, 120-cella, 24-cella.

Négynél magasabb dimenziókban mindössze három szabályos poliéder: tetraéder, oktaéder és hexaéder magasabb dimenziós általánosításai.

4.8. Molekulák szimmetriacsoportjai

Molekulákat alkotó atomtörzsek & elektronfelhő invariáns bizonyos geometriai transzformációkra (pontcsoport) $\rightsquigarrow$

1. vibrációs és rotációs spektrum szerkezete (Wigner, Tisza);
2. elektromágneses jellemzők (dipól- és mágneses momentum, stb.);
3. kémiai tulajdonságok.



Háromdimenziós pontcsoportok: 7 végtelen sorozat + 7 poliéder csoport

1. $C_n \cong \mathbb{Z}_n$ ciklikus, pl. hidrogén–peroxid $H_2O_2 (n=2)$;

2. $C_{n\mathrm{v}} \cong \mathbb{D}_n$ piramidális, pl. víz $(n=2)$, ammónia $(n=3)$, hidrogén-fluorid $(n=\infty)$;

3. $C_{n\mathrm{h}} \cong \mathbb{Z}_n \times \mathbb{Z}_2$, pl. bórsav $(n=3)$;

4. $D_n \cong \mathbb{D}_n$ diéderes, pl. ciklohexán $(n=2)$;

5. $D_{n\mathrm{v}} \cong \mathbb{D}_{2n}$ antiprizmatikus, pl. etán $(n=3)$;

6. $D_{n\mathrm{h}} \cong \mathbb{D}_n \times \mathbb{Z}_2$ prizmatikus, pl. etilén $(n=2)$, bór-trifluorid BF_3 $(n=3)$, C_{70} $(n=5)$, benzol $(n=6)$, széndioxid $(n=\infty)$;

7. $S_n \cong \mathbb{Z}_{2n}$;

8. $\mathbf{T} \cong \mathbb{A}_{\mathbf{4}}$ királis tetraéderes;

9. $\mathbf{T}_{\mathrm{d}} \cong \mathbb{S}_4$ tetraéderes, pl. metán CH_4;

10. $\mathbf{T}_{\mathrm{h}} \cong \mathbb{A}_4 \times \mathbb{Z}_2$ pyritoéderes;

11. $\mathbf{O} \cong \mathbb{S}_4$ királis oktaéderes;

12. $\mathbf{O}_{\mathrm{h}} \cong \mathbb{S}_4 \times \mathbb{Z}_2$ oktaéderes, pl. kén-hexafluorid SF_6;

13. $\mathbf{I} \cong \mathbb{A}_5$ királis ikozaéderes;

14. $\mathbf{I}_{\mathrm{h}} \cong \mathbb{A}_5 \times \mathbb{Z}_2$ ikozaéderes, pl. egyes fullerének.

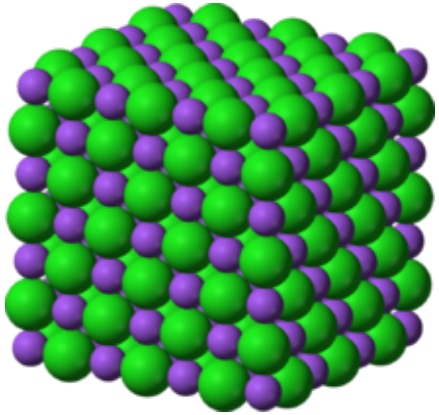
4.9. Kristályok szimmetriacsoportjai

Tapasztalat: egyes homogén (egynemű) anyagok anizotrop (irányfüggő) viselkedést mutatnak (pl. kristályok mechanikai, optikai, elektromos, stb. tulajdonságai).

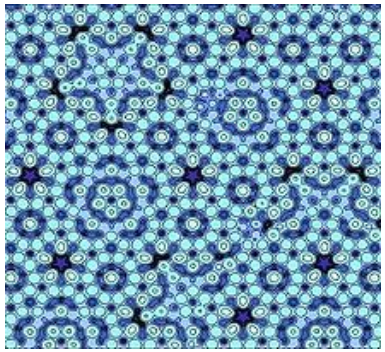
Fenomenológiai leírás: anyagi jellemzők tenzoriális jellege.

Mind a mikroszkopikus homogenitás, mind a rendezetlen mikroszkopikus inhomogenitás izotropiára vezet $\rightsquigarrow$ anizotrop viselkedés a rendezett mikroszkopikus inhomogenitás (kristályszerkezet) makroszkopikus megnyilvánulása (kvantumelméleti indoklása nem ismert).

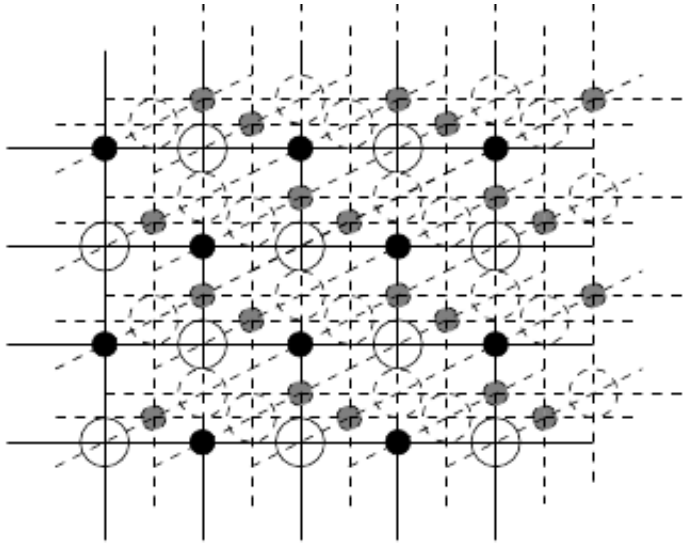
Kristályos anyag: térben periodikusan elhelyezkedő mikroszkopikus összetevők (atom-, molekula- vagy ioncsoportok) által alkotott test.



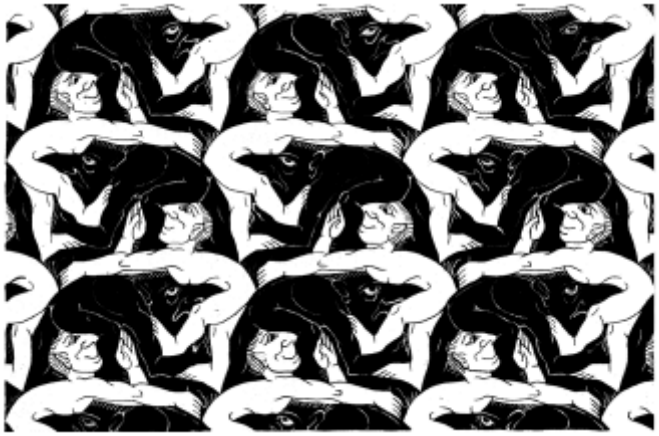
Kvázi-kristály: aperiodikus, de hosszú távú rendet mutató elrendezés.



Mikroszkopikus összetevők egy periodikus háromdimenziós rács (kristályrács) rácspontjai körül lokalizáltak (rácshibák hiányában).



Tércsoport: kristályrácsot önmagába képező transzformációk (kristályrács szimmetriái); elemei eltolások, forgatások, tükrözések, inverziók és ezek különféle kombinációi.



Transzlációs részcsoport: kristályrácsot önmagával fedésbe hozó eltolásokat tartalmazó kommutatív csoport.

Pontcsoport: kristályos test forgási és tükrözési szimmetriáit jellemző véges csoport.

Kristályrendszer: adott pontcsoport által jellemzett szimmetriával bíró kristályszerkezet.

Transzformáció rendje: legkisebb olyan pozitív egész, amely hatványra emelve a transzformációt az identitást kapjuk vissza.

Kristálytani korlátozás (Barlow): pontcsoport bármely elemének rendjével relatív prím egészek száma nem haladhatja meg a dimenziót (csak periodikus struktúrákra érvényes, kvázi-kristályokra nem).

dimenzió	$2, 3$	$4, 5$	$6, 7$
megengedett értékek	$\{2, 3, 4, 6\}$	$\cup\{5, 8, 10, 12\}$	$\cup\{7, 9, 14, 18\}$

$\rightsquigarrow$ minden adott dimenzióban csak véges sok lehetséges kristályszerkezet (tércsoport): osztályozás!

dimenzió	2	3†	4‡	5♯	6♯
kristályrendszerek	4	7	33	59	251
pontcsoportok	10	32	227	955	7104
tércsoportok	17	230	4894	222097	28934974

†: Fedorov (1891), Schönflies (1891) és Barlow (1894).

‡: Brown, Bülow és Neubüser (1978).

♯: Plesken és Schulz (2000).