Autore

Giuliano Bettini

Titolo

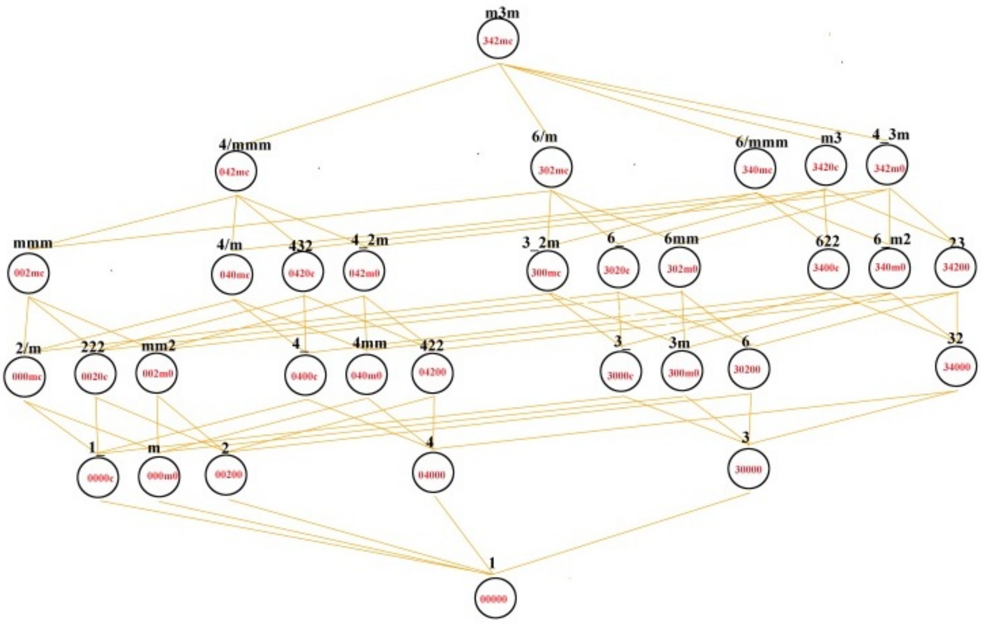
Spherical Harmonics and Crystals

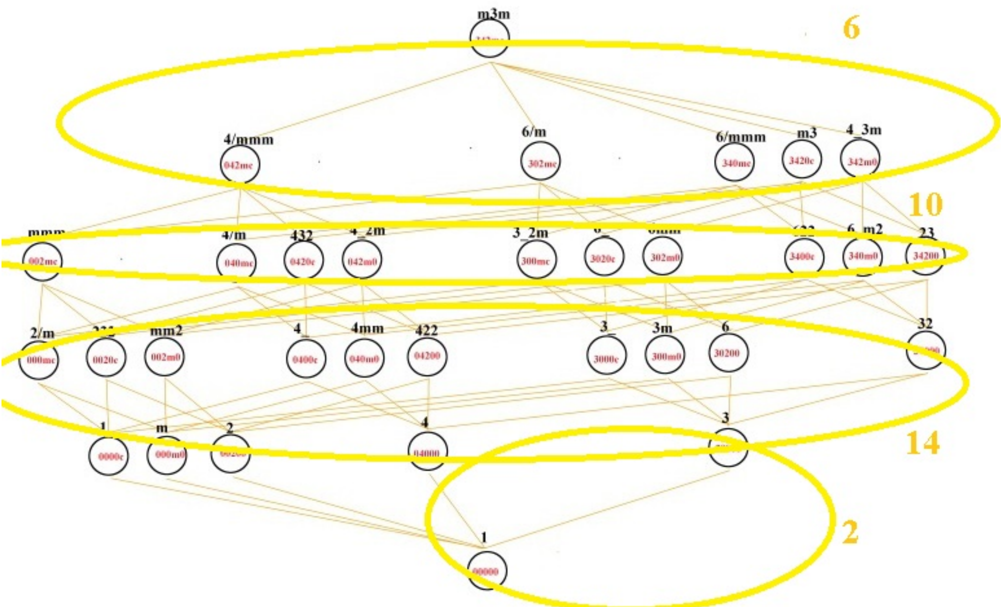
Abstract

**The description of Point Groups is made in crystallography, among, other, with "character tables". Following my classification work entitled "5 bit 32 crystal classes" and some other curious properties Ive noticed, I wanted to try to find a representation with Spherical Harmonics namely: a set of 32 Spherical Harmonics each one representing a Point Group.
So the purpose of this work, in a nutshell, is to combine each of the 32 crystal classes with the corresponding Spherical Harmonic that has the same symmetry properties, in a certain sense therefore a "group description".
These are among all the Spherical Harmonics the only 32 with which it is possible to create periodic structures with no gaps nor overlapping. . A sort of Spherical Harmonics Restriction Theorem. Other possibly interesting connections with the s p d f subshells, and with spin, are to be investigated.**

Premessa

Tutto questo è incominciato per puro caso quando, a valle dei miei lavori [1] [2], mi sono imbattuto in curiose coincidenze.
La mia proposta classificazione delle 32 classi cristalline con 5 bit portava, su un diagramma dove successivamente appare il numero di bit 'accesi'
(0 nella prima riga, 1 nella seconda,…., fino a 5 nell'ultima)
una analogia numerica con gli elettroni nei sub shells
(2, 6, 10, 14 ovvero 1,3,5,7).

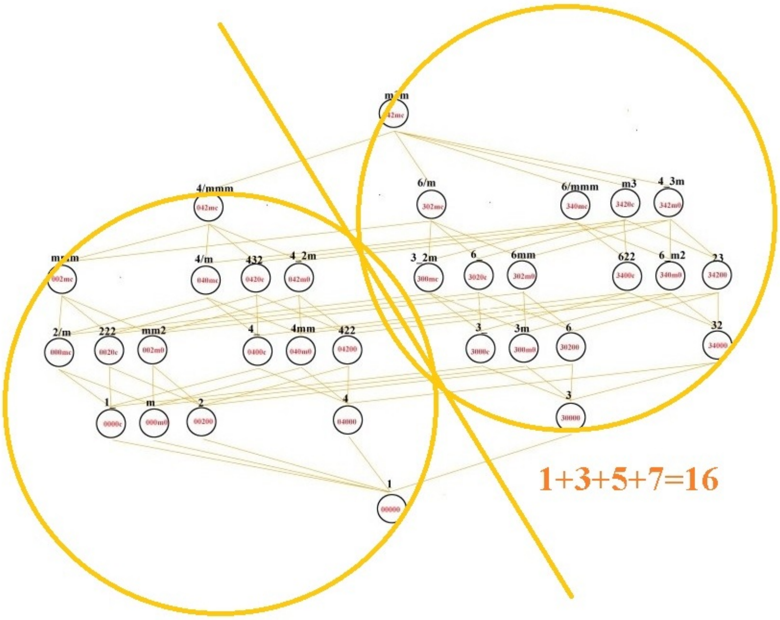




A fronte di questo fatto probabilmente del tutto casuale mi misi a ragionare su possibili significati nascosti.

Successivamente e con l'andare del tempo mi colpì il fatto che sia con le armoniche che con lo schema a 5 bit questo "32" non appariva come un 32 ma come un 16+16, ripetuto due volte come se sempre fosse "a causa di un doppio stato di spin".

Ragionando sull'analogia con le orbite elettroniche 1 3 5 7 ovvero 2 6 10 14 >>32 mi domandavo quale potesse essere la ragione di una tal suddivisione. E quale dovesse essere la suddivisione. Questa? Altre? E con quali criteri?



16+16=32

Bisognerebbe trovare, mi dicevo, una corrispondenza fra questi schemi.

0
-1 0 1
-2 -1 0 1 2
-3 -2 -1 0 1 2 3

0000 0001 0010 0011
0100 0101 0110 0111
1000 1001 1010 1011
1100 1101 1110 1111

Il primo rappresenta la usuale suddivisione delle prime 16 armoniche con l=0,1,2,3.
Il secondo con i bit classifica le classi cristalline a gruppi di quattro, qui i primi quattro gruppi, 4x4=16 classi (per i quali evidentemente bastano 4 bit)

.

Si tratta di conciliare questa

0
-1 0 1
-2 -1 0 1 2
-3 -2 -1 0 1 2 3

	m=-3	**m=-2**	**m=-1**	**m=0**	**m=+1**	**m=+2**	**m=+3**
l=0							
l=1							
l=2							
l=3							

con questa

0000 0001 0010 0011
0100 0101 0110 0111
1000 1001 1010 1011
1100 1101 1110 1111

1	**1_**	**m**	**2/m**
2	**222**	**mm**	**mmm**
4	**4_**	**4mm**	**4/m**
422	**432**	**4_2m**	**4/mmm**
3	**3_**	**3m**	**3_2/m**
6	**6_**	**6mm**	**6/m**
32	**622**	**6_m2**	**6/mmm**
23	**m3**	**4_3m**	**m3m**

Dove qui uno dei gruppi in verde è da spostare in blu.

Ma ripeto, quale suddivisione, e perché?
Tralasciando altri numerosi ragionamenti ed elucubrazioni, mi apparve chiaro che comunque andava approfonditol'esame delle Spherical Harmonics. Così pure mi apparve che il problema poteva essere enunciato in termini più limitati ma più chiari:
trovare una corrispondenza uno a uno, if any, fra le Spherical Harmonics e i 32 Crystallographic Point Groups.
Come?
Semplice. Basata sulla imposizione che , uno a uno, godessero delle medesime simmetrie.

Sulla denominazone delle Spherical Harmonics

Le armoniche, Complex Spherical Harmonics, e le parti reale e immaginaria Real Harmonics, sono definite e in parte tabulate in vari posti es. Wiki eccetera [3] [4].

Premessa: siccome con word posso mettere gli indici l, m solo in orizzontale, allora uso la scritta (l,m) solo per le armoniche reali quindi
Quando scrivo Y(l,m)
mi riferisco alle armoniche reali.

Simmetria m
Riassumo
my

$$\text{Matrice} \ldots \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0.. \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$$

Significato: piano m perpendicolare all'asse y
Piano verticale xz e perpendicolare a y, quindi nel disegno, sul piano xy, esso compare
come asse x
La simmetria m è convenzionalmente intesa come simmetria rispetto a questo asse e quindi proprio rispetto a un cambio della coordinata y.
Come si studia la simmetria sulle Spherical Harmonics? (ripeto: reali).
Premessa
Esse ossia le real sp ham sono definitetramite le complex e sono a indici l, m, scritte Y(l,m)
Sono praticamente le parti reale e immaginaria delle complex.
In questa maniera:
le Y(l, +m) sone la parte Re
le Y(l, -m) sone la parte Im
Ora per precisare succede questo: le Spherical Harmonics complex, sia che siano a indici (l, +m) oppure (l, -m), hanno parte reale uguale. E invece hanno parte immaginaria Im con segno opposto. Quindi quando si dice che le real Spherical Harmonics Y(l,m) corrispondono a parte reale e immaginaria delle complex che cosa s'intende? Si intende:
parte reale della (l, +m)
e
parte immaginaria pure della (l, +m).

Tutto ciò premesso, siccome le Y(l, -m) partono sempre con il sin(phi) cioè con y=sin(phi) ne segue che sono dispari con y.
Ossia
Cambiano segno da + a – quando y cambia da + a – e pertanto non possono essere le m simmetriche.

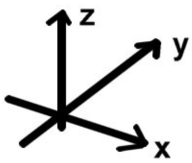
Le m simmetriche sono le Y(l, +m), le parti reali Re.
Che nei grafici appaiono pari a cavallo dell'asse x.
Link per grafici e formule in [3] [4].

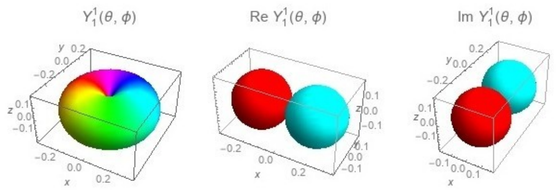
Esempio:
Y(1,1) pari a cavallo dell'asse x
Formula

$$Y_{1,1} = p_x = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(Y_1^{-1} - Y_1^{1}\right) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \frac{x}{r}$$

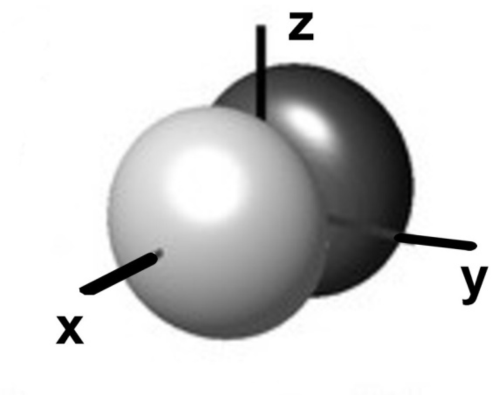
(con un cambio di y non cambia di segno).

Grafico





Naturalmente gli assi a volte sono disegnati in modo diverso, ognuno disegna gli assi come gli pare e naturalmente non lo dice. Qui l'ho 'rafforzato" io per farlo vedere meglio.

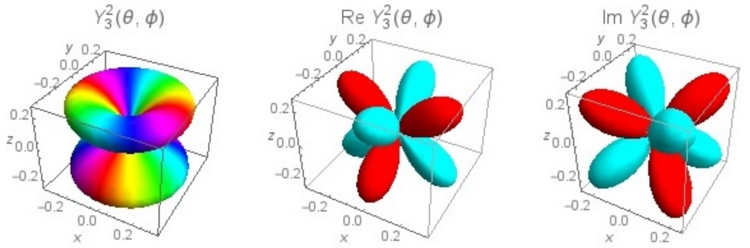


Altro esempio:
Y(3,2)

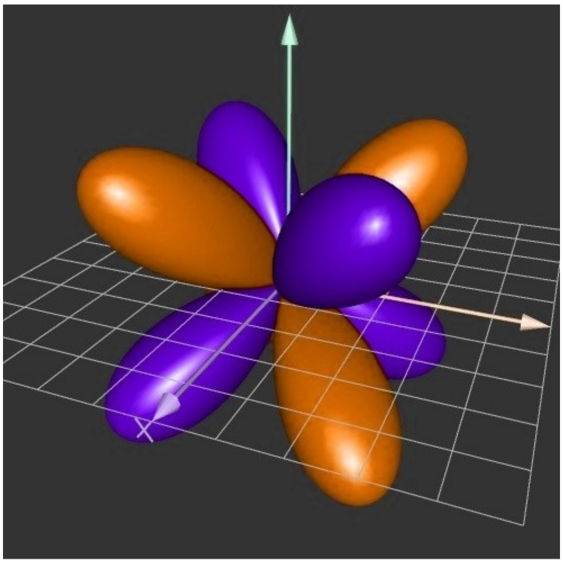
Formula

$$Y_{3,2} = f_{z(x^2-y^2)} = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(Y_3^{-2} + Y_3^2\right) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{\pi}} \cdot \frac{\left(x^2 - y^2\right) z}{r^3}$$

Grafico



Questo autore mette l’asse x (quasi) parallelo al foglio.
Invece quest’altro autore mette l’asse x uscente dal foglio.….Qui è raffigurata l’armonica Y(3,-2). Come si vede è dispari rispetto a un cambio della coordinata y.



Formule e simmetrie di armoniche e gruppi

Adesso provo a partire a tappeto. Con la logica 1 3 5 7.
E saranno questi i 16 gruppi da cui partire

1	**1_**	**m**	**2/m**
2	**222**	**mm**	**mmm**
4	**4_**	**4mm**	**4/m**
422	**432**	**4_2m**	**4/mmm**
3	**3_**	**3m**	**3_2/m**
6	**6_**	**6mm**	**6/m**
32	**622**	**6_m2**	**6/mmm**
23	**m3**	**4_3m**	**m3m**

con uno dei gruppi in verde da spostare in blu.
Le Spherical Harmonics, per ogni tipo di rotazione esempio A3, richiamano qui nella tabella 4 point groups o crystal classes che dir si voglia.. Devono essere 4 gruppi con m=3. Pertanto devono o possono essere 3,3 e 3,-3 e poi 4,3 e 4,-3. E proseguendo per questa via se ne trovano altri due ad ogni passo, 5,3 e 5,-3, poi 6,3 e 6,-3 eccetera. Lo stesso vale per ogni altra rotazione. Quindi proviamo. Formule da http://www.quanty.eu/QuantyDocsu2.php

3,3 $x(x^2-3y^2)$
3,-3 $y(y^2-3x^2)$
e
4,3 xz
4,-3 $yz(y^2-3x^2)$
Y(5,3) e Y(5,-3) per prova danno:

5,3 $x(x^2-3y^2)(x^2+y^2-8z^2)$
5,-3 $y(y^2-3x^2)(x^2+y^2-8z^2)$
Ma osservo subito che questi, in temini di simmetrie,daranno lo stesso risultato di rispettivamente 3,3 e 3,-3.
Vale la pena di provare anche con la rotazione A4.
4,4 $(x^4-6x^2y^2+y^4)$
4,-4 $xy(x-y)(x+y)$

poi
5,4 $z(x^4-6x^2y^2+y^4)$
5,-4 $xyz(x-y)(x+y)$
e infine
6,4 $(x^4-6x^2y^2+y^4)$
6,-4 $xy(x-y)(x+y)(x^2+y^2-10z^2)$
Anche qui 6,4 e 6,-4 riproducono le simmetrie di, rispettivamente 4,4 e 4,-4.

Inserisco anche la rotazione A2
2,2 $(x - y)(x + y)$
e
2,-2 xy
poi
3,2 $z(x - y)(x + y)$
e
3,-2 xyz
e infine
4,2 $(x - y)(x + y)(x^2 + y^2 - 6z^2)$
e
4,-2 $xy(x^2 + y^2 - 6z^2)$
Al solito, 4,2 e 4,-2 sembrano ripetizioni inutili.

Scrivo anche quattro rotazioni A1.

1,1 x
e
1,-1 y
poi
2,1 xz
e
2,-1 yz
e infine
3,1 $x(x^2 + y^2 - 4z^2)$
e
3,-1 $y(x^2 + y^2 - 4z^2)$
Come al solito, due gruppi apparentemente inutili.

Si notano poi altri strani comportamenti 'simmetrici' per così dire, per esempio A3 ripropone certi comportamenti di A1, e così fa A4 con A2. Vabbè.

Inserisco anche la rotazione A6.

6,6 $\left(x^6 - 15x^4y^2 + 15x^2y^4 - y^6\right)$
e
6,-6 $xy\left(3x^4 - 10x^2y^2 + 3y^4\right)$

Poi dovrei proseguire con Y(7,6) eccetera ma non ho i dati.
Io però suppongo, per simmetria, che siano del tipo:

7,6 z(…)
e
7,-6 xyz(…)

con il contenuto della parentesi invariante per simmetrie 2,3,m,c.
Poi, semre per ragioni di simmetria, suppongo anche che 8,6 e 8,-6 ripropongano le simmetrie di 6,6 e 6,-6.
Let's go on.

Passiamo alle simmetrie dei gruppi e poi al confronto con le Spherical Harmonics. Riassumiamo le simmetrie dei gruppi. Generators da [5].

Hermann Mauguin	5 bit symbols	Generators	Generators modificati	Real Harmonics Y(l,m)
1	00000			
1_	0000c	c	c	
m	000m0	my	my	
2/m	000mc	2y,c	my,c	
2	00200	2y	2z	
222	0020c	2z, 2y	2z, 2y	
mm2	002m0	2z, my	2z, my	
mmm	002mc	2z, 2y, c	2z, my, c	
4	04000	4z	4z	
4_	0400c	4z_	(4z&c)	
4mm	040m0	4z, my	4z, my	
4/m	040mc	4z, c	4z, my,c	
422	04200	2y, 4z	4z, 2y	
432	0420c	2z, 2y, 3111,2110	4z, 2y, 4y	
4_2m	042m0	4_, 2y	(4z&c), 2y, m110	
4/mmm	042mc	2y, 4z, c	4z, 2y, m110, c	
3	30000	3z	3z	
3_	3000c	3z, c	3z, c	
3m	300m0	3z, m110	3z, m110	
3_2/m	300mc	3z, 2(1-10), c	3z, m1-10, c	
6	30200	3z, 2z	3z, 2z	
6_	3020c	mz, 3z	((3z, 2z) &c)	
6mm	302m0	3z, 2z, m110	3z, 2z, m110	
6/m	302mc	3, 2z, c	3z, 2z, m001, c	
32	34000	3z, 2(1-10	3z, 2(1-10	
622	3400c	3z, 2z, 2(110)	3z, 2(1-10), 2z	
6_m2	340mc	3z, mz, m110	3z,2(1-10), m110	
6/mmm	340mc	3z, 2z, m(110),c	3z,2(1-10), m110, c	
23	34200	2z, 2y, 3111	2z, 2y, 3111	
m3	3420c	2z, 2y, 3111,c	2z, 2y, 3111,c	
4_3m	342m0	2z, 2y, 3111,m(1-10)	2z, 2y, 3111,m(1-10)	
m3m	342mc	2z, 2y, 3111,2110,c	2z, 2y, 3111, m(1-10),c	

Provo le rotazioni A3. Posso fare un tentativo per vedere se con le Spherical Harmonics riesco a rappresentare i 4 gruppi della tabella seguente (ipotesi….). Per rappresentare adeguatamente le simmetrie dei gruppi ('generators') direi che posso usare le matrici qui in tabella.
Notare che con i piani di simmetria siamo distanti dalle regole della cristallografia ma io credo che my basti.

Hermann Mauguin	5 bit symbols	Generators	Generators modificati	Matrici
3	30000	3z	3z	3z
3_	3000c	3z, c	3z, c	…… 3z… $\begin{matrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{matrix}$ ….
3m	300m0	3z, m110	3z, my	3z…$\begin{matrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{matrix}$ … ….
3_2/m	300mc	3z, 2(1-10), c	3z, my, c	3z…$\begin{matrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{matrix}$ … ….$\begin{matrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{matrix}$ ….

Queste quisopra sono quindi le matrici di simmetria che rappresentano i gruppi qui sopra. Proviamo ora le simmetrie delle Spherical Harmonics. Notare che la simmetria A3 è certamente rispettata per tutte le Spherical Harmonics, poiché vi compare exp(+/-i3phi).

Prima prova.
Armonica Y(3,3).

3,3 $x(x^2 - 3y^2)$

Cambio di coordinate	Significato	Simmetria rispettata	Simmetria non rispettata
Asse/assi di rotazione	Rotazione A3	X	
x,y,z > x,-y,z	Piano xz di simmetria lungo l'asse x	X	
x, y, z > -x, -y, -z	inversione risp. centro		X

3,-3 $y(y^2 - 3x^2)$

Cambio di coordinate	**Significato**	**Simmetria rispettata**	**Simmetria non rispettata**
Asse/assi di rotazione	**Rotazione A3**	**X**	
x,y,z > x,-y,z	**Piano xz di simmetria lungo l'asse x**		**X**
x, y, z > -x, -y, -z	**inversione risp. centro**		**X**

4,3 *xz*

Cambio di coordinate	**Significato**	**Simmetria rispettata**	**Simmetria non rispettata**
Asse/assi di rotazione	**Rotazione A3**		
x,y,z > x,-y,z	**Piano xz di simmetria lungo l'asse x**	**X**	
x, y, z > -x, -y, -z	**inversione risp. centro**	**X**	

4,-3 $yz(y^2 - 3x^2)$

Cambio di coordinate	**Significato**	**Simmetria rispettata**	**Simmetria non rispettata**
Asse/assi di rotazione	**Rotazione A3**	**X**	
x,y,z > x,-y,z	**Piano xz di simmetria lungo l'asse x**		**X**
x, y, z > -x, -y, -z	**inversione risp. centro**	**X**	

Interessante. Sembra che siamo nelle semplici regole del mio paper "5 bit etc…".
00 0c m0 mc.

Proviamo ora la situazione con l'asse 2. Ossia queste crystal classes:

Hermann Mauguin	**5 bit symbols**	**Generators**	**Generators modificati**
2	**00200**	**2y**	**2z**
222	**0020c**	**2z, 2y**	**2z, 2y**
mm2	**002m0**	**2z, my**	**2z, my**
mmm	**002mc**	**2z, 2y, c**	**2z, my, c**

2,2 ($x - y$)($x + y$)

Cambio di coordinate	Significato	Simmetria rispettata	Simmetria non rispettata
Asse/assi di rotazione	**Rotazione A2**	**X**	
x,y,z > x,-y,z	**Piano xz di simmetria lungo l'asse x**	**X**	
x, y, z > -x, -y, -z	**inversione risp. centro**	**X**	

2,-2 xy

Cambio di coordinate	Significato	Simmetria rispettata	Simmetria non rispettata
Asse/assi di rotazione	**Rotazione A2**	**X**	
x,y,z > x,-y,z	**Piano xz di simmetria lungo l'asse x**		**X**
x, y, z > -x, -y, -z	**inversione risp. centro**	**X**	

3,2 z($x - y$)($x + y$)

Cambio di coordinate	Significato	Simmetria rispettata	Simmetria non rispettata
Asse/assi di rotazione	**Rotazione A2**	**X**	
x,y,z > x,-y,z	**Piano xz di simmetria lungo l'asse x**	**X**	
x, y, z > -x, -y, -z	**inversione risp. centro**		**X**

3,-2 xyz

Cambio di coordinate	Significato	Simmetria rispettata	Simmetria non rispettata
Asse/assi di rotazione	**Rotazione A2**	**X**	
x,y,z > x,-y,z	**Piano xz di simmetria lungo l'asse x**		**X**
x, y, z > -x, -y, -z	**inversione risp. centro**		**X**

Ancora si ripete il motivo 00 0c m0 mc.
Andiamo avanti.

Asse4.
Provo con le stesse simmetrie , salvo il fatto che dovrà essere provata la eventuale esistenza dell'asse 4 improprio.

Ossia, devo provare anche la classe 4_ che ha la simmetria

$$\begin{matrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{-1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{-1} \end{matrix}$$

che trasforma x,y,z in y,-x,-z.
Mentre invece la rotazione 4 è

$$\begin{matrix} \mathbf{0} & \mathbf{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{matrix}$$

e x,y,z diventano -y,x,z

La tabella questa volta è la seguente

Cambio di coordinate	Significato	Simmetria rispettata	Simmetria non rispettata
x,y,z >> -y,x,z	Asse di rotazione 4		
x,y,z >> y,-x,z	Asse improprio 4_		
x,y,z > x,-y,-z	Piano xz di simmetria lungo l'asse x		
x, y, z > -x, -y, -z	inversione risp. centro		

E vanno provate tutte le Spherical Harmonics potenzialmente coinvolte, ossia quelle con m=4

4,4 $(x^4 - 6x^2y^2 + y^4)$

Cambio di coordinate	**Significato**	**Simmetria rispettata**	**Simmetria non rispettata**
x,y,z >> -y,x,z	**Asse di rotazione 4**	**X**	
x,y,z >> y,-x,-z	**Asse improprio 4_**	**X**	
x,y,z > x,-y,-z	**Piano xz di simmetria lungo l'asse x**	**X**	
x, y, z > -x, -y, -z	**inversione risp. centro**	**X**	

4,-4 *xy*(*x* - *y*)(*x* + *y*)

Cambio di coordinate	**Significato**	**Simmetria rispettata**	**Simmetria non rispettata**
x,y,z >> -y,x,z	**Asse di rotazione 4**	**X**	
x,y,z >> y,-x,-z	**Asse improprio 4_**	**X**	
x,y,z > x,-y,-z	**Piano xz di simmetria lungo l'asse x**		**X**
x, y, z > -x, -y, -z	**inversione risp. centro**	**X**	

5,4 $z(x^4 - 6x^2y^2 + y^4)$

Cambio di coordinate	**Significato**	**Simmetria rispettata**	**Simmetria non rispettata**
x,y,z >> -y,x,z	**Asse di rotazione 4**	**X**	
x,y,z >> y,-x,-z	**Asse improprio 4_**		**X**
x,y,z > x,-y,-z	**Piano xz di simmetria lungo l'asse x**	**X**	
x, y, z > -x, -y, -z	**inversione risp. centro**		**X**

5,-4 *xyz*(*x* - *y*)(*x* + *y*)

Cambio di coordinate	**Significato**	**Simmetria rispettata**	**Simmetria non rispettata**
x,y,z >> -y,x,z	**Asse di rotazione 4**	**X**	
x,y,z >> y,-x,-z	**Asse improprio 4_**		**X**
x,y,z > x,-y,-z	**Piano xz di simmetria lungo l'asse x**		**X**
x, y, z > -x, -y, -z	**inversione risp. centro**		**X**

Ancora il motivo 00 0c m0 mc.
Ma ci sono alcune cose strane che andranno discusse.

Ora esamino quello che , secondo le mie idee, è il primo gruppo di 4 classi.

Hermann Mauguin	5 bit symbols	Generators	Generators modificati
1	00000		
1_	0000c	c	c
m	000m0	my	my
2/m	000mc	2y,c	my,c

Ho a disposizione 4 Spherical Harmonics.

1,1 *x*

Cambio di coordinate	Significato	Simmetria rispettata	Simmetria non rispettata
Asse/assi di rotazione	Rotazione A1	X	
x,y,z > x,-y,z	Piano xz di simmetria lungo l'asse x	X	
x, y, z > -x, -y, -z	inversione risp. centro		X

1,-1 *y*

Cambio di coordinate	Significato	Simmetria rispettata	Simmetria non rispettata
Asse/assi di rotazione	Rotazione A2	X	
x,y,z > x,-y,z	Piano xz di simmetria lungo l'asse x		X
x, y, z > -x, -y, -z	inversione risp. centro		X

2,1 *xz*

Cambio di coordinate	Significato	Simmetria rispettata	Simmetria non rispettata
Asse/assi di rotazione	Rotazione A2	X	
x,y,z > x,-y,z	Piano xz di simmetria lungo l'asse x	X	
x, y, z > -x, -y, -z	inversione risp. centro	X	

2,-1 *yz*

Cambio di coordinate	Significato	Simmetria rispettata	Simmetria non rispettata
Asse/assi di rotazione	Rotazione A2	X	
x,y,z > x,-y,z	Piano xz di simmetria lungo l'asse x		X
x, y, z > -x, -y, -z	inversione risp. centro	X	

Ancora il motivo 00 0c m0 mc.

Andiamo avanti.
Asse 6.

6,6 $\left(x^6 - 15x^4y^2 + 15x^2y^4 - y^6\right)$

Cambio di coordinate	Significato	Simmetria rispettata	Simmetria non rispettata
Asse/assi di rotazione	Rotazion1 A2, A3	X	
x,y,z > x,-y,z	Piano xz di simmetria lungo l’asse x	X	
x, y, z > -x, -y, -z	inversione risp. centro	X	

6,-6 $xy\left(3x^4 - 10x^2y^2 + 3y^4\right)$

Cambio di coordinate	Significato	Simmetria rispettata	Simmetria non rispettata
Asse/assi di rotazione	Rotazioni A2, A3	X	
x,y,z > x,-y,z	Piano xz di simmetria lungo l’asse x		X
x, y, z > -x, -y, -z	inversione risp. centro	X	

7,6 z(…)

Cambio di coordinate	Significato	Simmetria rispettata	Simmetria non rispettata
Asse/assi di rotazione	Rotazioni A2, A3	X	
x,y,z > x,-y,z	Piano xz di simmetria lungo l’asse x	X	
x, y, z > -x, -y, -z	inversione risp. centro		X

7,-6 xyz(…)

Cambio di coordinate	Significato	Simmetria rispettata	Simmetria non rispettata
Asse/assi di rotazione	Rotazioni A2, A3	X	
x,y,z > x,-y,z	Piano xz di simmetria lungo l’asse x		X
x, y, z > -x, -y, -z	inversione risp. centro		X

Ancora il motivo 00 0c m0 mc? Ritengo che le classi da interpretare siano queste, considerato anche che ho fatto delle ipotesi.

Hermann Mauguin	5 bit symbols	Generators	Generators modificati
6	30200	3z, 2z	3z, 2z
6_	3020c	mz, 3z	((3z, 2z) &c)
6mm	302m0	3z, 2z, m110	3z, 2z, m110
6/m	302mc	3, 2z, c	3z, 2z, m001, c

Riassunto dei risultati

A parità di simmetrie emerge questa corrispondenza fra le Spherical Harmonics e le classi

Asse 3

3,3 $x(x^2 - 3y^2)$ *m0*
3,-3 $y(y^2 - 3x^2)$ *00*
4,3 *xz* *mc*
4,-3 $yz(y^2 - 3x^2)$ *0c*

Asse 2

2,2 $(x - y)(x + y)$ mc
2,-2 *xy* *0c*
3,2 $z(x - y)(x + y)$ m0
3,-2 *xyz* *00*

Asse 4

4,4 $(x^4 - 6x^2y^2 + y^4)$ **mc**
4,-4 $xy(x - y)(x + y)$ 0c
5,4 $z(x^4 - 6x^2y^2 + y^4)$ *m0*
5,-4 $xyz(x - y)(x + y)$ 000

Asse 1
1,1 *x* *m0*
1,-1 *y* *00*
2,1 *xz* *mc*
2,-1 *yz* *0c*

Asse 6
6,6 $(x^6 - 15x^4y^2 + 15x^2y^4 - y^6)$ **mc**
6,-6 $xy(3x^4 - 10x^2y^2 + 3y^4)$ *0c*
7,6 z(…) m0
7,-6 xyz(…) 00

Le posso quindi riportare nella tabella.

Hermann Mauguin	5 bit symbols	Spherical Harmonics Y(l,m) (Real Harmonics)
1	00000	**1,-1** y
1_	0000c	**2,-1** yz
m	000m0	**1,1** x *m0*
2/m	000mc	**2,1** xz
2	00200	**3,-2** xyz
222	0020c	**2,-2** xy
mm2	002m0	**3,2** $z(x - y)(x + y)$
mmm	002mc	**2,2** $(x - y)(x + y)$
4	04000	**5,-4** $xyz(x - y)(x + y)$
4_	0400c	**4,-4** $xy(x - y)(x + y)$
4mm	040m0	**5,4** $z\left(x^4 - 6x^2y^2 + y^4\right)$
4/m	040mc	**4,4** $\left(x^4 - 6x^2y^2 + y^4\right)$
422	04200	
432	0420c	
4_2m	042m0	
4/mmm	042mc	
3	30000	**3,-3** $y\left(y^2 - 3x^2\right)$
3_	3000c	**4,-3** $yz\left(y^2 - 3x^2\right)$
3m	300m0	**3,3** $x\left(x^2 - 3y^2\right)$
3_2/m	300mc	**4,3** xz
6	30200	**7,-6 xyz(…)**
6_	3020c	**6,-6** $xy\left(3x^4 - 10x^2y^2 + 3y^4\right)$
6mm	302m0	**7,6 z(…)**
6/m	302mc	**6,6** $\left(x^6 - 15x^4y^2 + 15x^2y^4 - y^6\right)$
32	34000	
622	3400c	
6_m2	340mc	
6/mmm	340mc	
23	34200	
m3	3420c	
4_3m	342m0	
m3m	342mc	

In un primo set di armoniche (fino a l=3, m=3) le classi si abbinano alle armoniche in questo modo .

	m=-3	m=-2	m=-1	m=0	m=+1	m=+2	m=+3
l=0							
l=1			1		m		
l=2		222	1_		2/m	mmm	
l=3	3	2				mm2	3m

Ma resta ancora questa che ha l=4

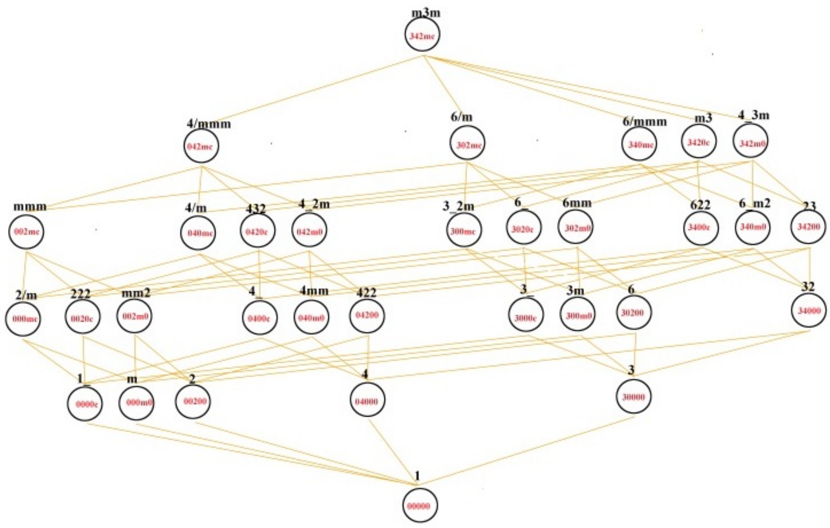
	m=-3	m=-2	m=-1	m=0	m=+1	m=+2	m=+3
l=4	3_						3_2m

E poi ci sono tutte queste altre, da capire e da sistemare. Per ora le ho inserite in una tabella puramente mnemonica.

	m=-6	m=-4	m=-2	m=0	m=+2	m=+4	m=+6
l=4		4_				4/m	
l=5		4				4mm	
l=6	6_						6/m
l=7	6						6mm

Il secondo gruppo di 16 classi

Riassumo la situazione a questo punto. Le classi che ho esaminato e le relative armoniche, oppure, le armoniche che ho esaminato e le relative classi, aventi le stesse simmetrie, si possono collocare nella tabella che contiene la classificazione a 5 bit.
Cosa che ho fatto.
In questo modo è possibile notare tutta una serie di regolarità.
Per esempio come si susseguono gli stati +m con quelli –m.
Oppure come si dispongono le armoniche del tipo (l,l) per esempio (3,3) rispetto a quelle del tipo (l,l-1).
Oppure…………
E così via.
Ma la cosa che più mi premeva a questo punto, che mi preme, è di individuare il primo set di 16 classi per poi ‘duplicarlo’ fino a 32.
Una delle varie possibilità di suddivisione ovvero quella che io sarei portato a privilegiare è la seguente:
le prime 16 classi sono quelle che <u>non hanno</u> assi di rotazione multipli e più esattamente non hanno assi di rotazione perpendicolari.
Ho due tipi di diagrammi su cui rappresentare la suddivisione delle classi, uno è il diagramma a palle



e il secondo è la tabella delle armoniche

	m=-3	**m=-2**	**m=-1**	**m=0**	**m=+1**	**m=+2**	**m=+3**
l=0							
l=1							
l=2							
l=3							

I risultati raggiunti fino a questo punto consentono di collocare inambiguamente le seguenti classi. Le altre rimangono ambigue

	m=-3	m=-2	m=-1	m=0	m=+1	m=+2	m=+3
l=0							
l=1			1		m		
l=2		222	1_		2/m	mmm	
l=3	3	2				mm2	3m

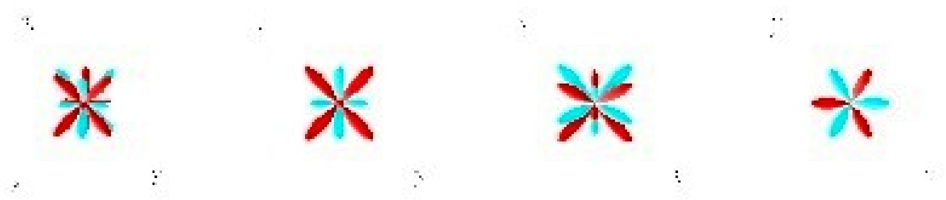
Ma comunque si voglia ragionare le classi che ho esaminato fino a questo momento non hanno assi perpendicolari (se si escludono le classi come la 222 e seguenti, le quali tuttavia si originano dall'asse 2 ossia da una classe che non ha assi multipli).
Il problema che mi sono posto è:

come si conciliano le Spherical Harmonics con le classi aventi assi di rotazione multipli ovvero perpendicolari?

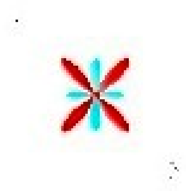
Le classi aventi assi di rotazione perpendicolari

Con quali Spherical Harmonics le rappresento? E si tratta di Spherical Harmonics composte?
La risposta che io do a questo problema è molto semplice (ammesso che sia giusta….).
Bisogna considerare le Spherical Harmonics che io avevo supposto ‘ridondanti’, qulle cioè scartate in quanto doppie.
In realtà esse rappresentano le stesse simmetrie già trovate, ma con la aggiunta di assi 2 perpendicolari.
Mi chiarirò con un esempio
Prendiamo la classe Hermann Mauguin 3m che ha come armonica che le corrisponde la Y(3,3).

Y(3,3) = $x(x^2 - 3y^2)$
L’esame di successive armoniche sempre con la rotazione A3 mostra che Y(5,3) ha le stesse simmetrie.
Y(5,3) = $x(x^2 - 3y^2)(x^2 + y^2 - 8z^2)$
Per questo è stata scartata.
Ma è veramente un doppione?
E ha veramenten le stesse simmetrie?
Non è del tutto vero ossia, ha le stesse simmetrie ma in più all’asse 3 si sono aggiunti tre assi di simmetria 2
Empiricamente possiamo mostrarlo mediante la seguente figura.
The figure shows a 3D image as well as a projection along the *x*, *y* and *z* direction.



La prima immagine è un’immagine tridimensionale dell’armonica Y(5,3)
La seconda immagine è una vista secondo l’asse x
Poi l’asse y. Poi l’ultima, secondo l’asse verticale, mostra ovviamente la simmetria A3.
La vista secondo l’asse x mostra chiaramente una simmetria 2. Ossia: si vede che la figura si mantiene uguale se viene ruotata di 180°.

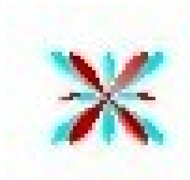


Quindi l’armonica ha un asse 2 di simmetria laterale.
Naturalmente questo asse 2 viene poi triplicato per la presenza dell’asse verticale A3.

Molto interessante la
Y(6,4) = $(x^4 - 6x^2y^2 + y^4)$

Questa, avevo notato, ripropone le simmetrie di Y(4,4) e come tale scartata.
Y(4,4) = $(x^4 - 6x^2y^2 + y^4)$

Tuttavia la vista lungo l'asse x propone, sembra, una simmetria 4 anche lungo questo asse (vedi figura) e quindi come tale sembra adatta a rappresentare la classe 432 così come io l'avevo inserita fra le classi tetragonali, vedi il mio paper su '5 bit 32 crystal classes".



Riassumendo, appaiono classi monoassiali caratterizzate da armoniche (l,m) e classi a più assi, con assi 2 ortogonali ai precedenti, , caratterizzate da armoniche (l+2, m).

Riassumendo ulteriormente, qual è la sostanza? Le 32 classi cristalline permesse e presenti in natura vengono poste in corrispondenza di 32 Spherical Harmonics caratterizzate dal possedere esattamente le simmetrie della classe. Le Spherical Harmonics in questione sono costruite con una logica tipo "segnali complessi", nella quale abbiamo situazioni con assi singoli, assi multipli ma paralleli e assi multipli ortogonali, tipicamente altri assi di frequenza 2 che servono quando, esauriti i gruppi ciclici, si debbano rappresentare i dihedral groups. Le trentadue armoniche che risolvono il problema sembrano essere raggruppate ed essere una variante del set di orbite spdf dell'atomo (l= 0,1,3,3). Per strana che possa sembrare la cosa, è questa che mi ha guidato nello scrivere le relazioni coinvolte, relazioni la cui complessità è tale da non poter essere risolta senza un'idea-guida di base. Infine ho ritenuto di denominare il set coinvolto espressione di quello che chiamo Spherical Harmonics Restriction Theorem in quanto esso rappresenta, in 3D, l'analogo della regola che isola i gruppi compatibili con la creazione di strutture composte, uguali ed in scala rispetto ad una cella elementare (cristallographic restriction theorem excluding other symmetries not compatible with spatial periodicity). Tale è il set di 32 armoniche, o combinazioni di, qui individuato, presumibilmente una base nello spazio per non meglio individuate applicazioni e foriero di chissà quali altre speculazioni. Infine last but not least il lavoro proposto qui è per quanto mi riguarda proposto e risolto ma non metodicamente terminato e portato a termine come avrebbe richiesto. Il resto del lavoro da fare è lasciato per esecizio.

Conclusioni

Ho mostrato, pur se con modalità del tutto empiriche, una serie di proprietà che coinvolgono le 32 classi cristalline e le 16 Spherical Harmonics con l=0,1,2,3.
In particolare è plausibile che esista un abbinamento uno a uno fra le 32 classi e 32 ben precise spherical functions o combinazioni di, tale da poter parlare di Spherical Harmonics Restriction Theorem , analogo al Crystallographic Restriction Theorem. Esso isolerebbe le uniche armoniche o gli unici segnali complessi che consentono una periodicità spaziale, senza buchi. Come dire, stati coerenti della materia, associazione di bosoni che come tali possano creare strutture dotate di periodicità spaziale, senza sovrapposizioni e senza buchi.
Si constata anche la presenza di una serie di altre proprietà e analogie, tutte da approfondire, quali ad esempio proprietà analoghe allo spin della meccanica quantistica, la costituzione "a 5 bit" delle 32 classi, eccetera. Ritengo in proposito che una trattazione con l'algebra di Clifford o Geometri Algebra sarebbe chiarificatrice.

Ringraziamenti

Ringrazio Giorgio Vassallo per le utili discussioni ma in particolare per la sua insistente osservazione "Non si tratta di coincidenze".

Riferimenti bibliografici

[1], Bettini, G, "Hidden Mathematical Symmetries in the 32 Crystal Point Groups?", http://vixra.org/abs/1101.0052

[2] Bettini, G, "5 bit, 32 Crystal Classes", https://www.mindat.org/article.php/2719/5+bit%2C+32+crystal+classes

[3] Link per formule in Internet
http://www.quanty.eu/QuantyDocsu2.php
Wiki, https://en.wikipedia.org/wiki/Table_of_spherical_harmonics

[4] Link per grafici
https://people.csail.mit.edu/sparis/sh/index.php?img=64
http://www.quanty.eu/QuantyDocsu2.php
http://demonstrations.wolfram.com/ComplexSphericalHarmonics/
https://chem.libretexts.org/@api/deki/files/56123/600px-Spherical_Harmonics_deg5.png?revision=1&size=bestfit&width=803&height=437

[5] Bilbao Server http://www.cryst.ehu.es/cryst/get_point_genpos.html