

# Symetria w opisie budowy oraz własności fizycznych molekuł i kryształów

Obiekt ma pewną symetrię gdy po przekształceniu przez wybrane operacje (symetrii) zarówno obiekt jak i jego własności fizyczne nie ulegają zmianie.

Kilka książek i artykułów o symetrii w naukach przyrodniczych

H.Weyl „Symetria”

I. Stuart „Dlaczego prawda jest piękna. O symetrii w matematyce i fizyce”

A.V. Szubnikow „Simmetria w nauce i sztuce”

J. Rychlewski „Symetria Przyczyn i skutków”

P. Curie, J. Phys. (Paris) 3, 393-415 (1894). „Sur la symmetrie dans les phenomenes physiques, symmetrie d'un champ electrique et magnetique”

# Symetria w opisie budowy oraz własności fizycznych molekuł i kryształów

Obiekt ma pewną symetrię gdy po przekształceniu przez wybrane operacje (symetrii) zarówno obiekt jak i jego własności fizyczne nie ulegają zmianie.

Zbiór przekształceń na które ten obiekt jest niezmienniczy tworzy tzw. grupę symetrii  $G$ .

W grupie określone jest mnożenie operacji. Dla każdej operacji  $g_i$  należącej do  $G$ :

1. Istnieje operacja jedynek  $1$ , taka że  $g_i 1 = g_i$
2. Dla każdego  $g_i$  istnieje element odwrotny  $g_j$  taki, że  $g_i g_j = 1$
3. Dla każdego  $g_i$  oraz  $g_j$  należących do  $G$  iloczyn  $g_i g_j$  też należy do  $G$
4. Mnożenie jest łączne  $a(bc) = (ab)c$

Ograniczymy się do tzw. krystalograficznych grup punktowych,

tj. grup zawierających osie obrotu

2 rzędu ( $180^\circ$ ) 3 rzędu ( $120^\circ$ ) 4 rzędu ( $90^\circ$ ) oraz 6 rzędu ( $60^\circ$ )

Mamy dwa rodzaje operacji:

obroty właściwe (wyznacznik +1) - ,rzeczywiste działania'

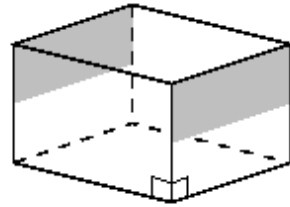
oraz

obroty niewłaściwe (wyznacznik -1) - ,działania w wyobraźni'

Obrót niewłaściwy to złożenie obrotu właściwego z inwersją  $(x,y,z) \rightarrow (-x,-y,-z)$

Grupa 2 ( $C_2$ ). Tabela mnożenia

$$\begin{matrix} 1 & 2_z \\ 2_z & 1 \end{matrix}$$



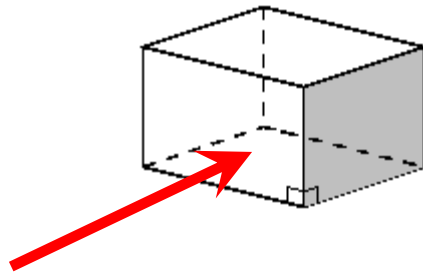
Grupa 2 ( $C_2$ ). Nieprzywiedlne reprezentacje (tzw. irreps-y) oraz jak transformują się ważne funkcje liniowe i dwuliniowe

2 ( $C_2$ )	1	$2_z$	Funkcje 1 st	Funkcje 2 st.
A	1	1	$z, l_z$	$x^2, y^2, z^2, xy$
B	1	-1	$x, y, l_x, l_y$	$xz, yz$

Mnożymy operację ( $2_z$ ) grupy przez inwersję przestrzenną  $(x,y,z) \rightarrow (-x,-y,-z)$  i otrzymujemy odbicie lustrzane ( $m_z$ )  $(x,y,z) \rightarrow (x,y,-z)$ . Powstaje nowa grupa m ( $C_s$ )

Grupa m ( $C_s$ ). Tabela mnożenia

$$\begin{matrix} 1 & m_z \\ m_z & 1 \end{matrix}$$



Grupa m ( $C_s$ ). Nieprzywiedlne reprezentacje (tzw. irreps-y) oraz jak transformują się ważne funkcje liniowe i dwuliniowe

m( $C_s$ )	1	$m_z$	Funkcje 1 st	Funkcja 2 st
A'	1	1	$x; y; l_z$	$x^2; y^2; z^2; xy$
A''	1	-1	$z; l_x; l_y$	$xz; yz$

Uwaga: tu podstawa nie jest prostokątem ale równoległobokiem

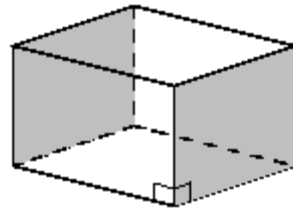
Grupa 2 ( $C_2$ ). Tabela mnożenia

1	$2_z$
$2_z$	1

Mnożymy wszystkie operację z grupy 2,  
tj. 1 oraz  $2_z$  przez inwersję przestrzenną  $(x,y,z) \rightarrow (-x,-y,-z)$   
i otrzymujemy inwersję oraz odbicie lustrzane ( $m_z$ )  
 $(x,y,z) \rightarrow (x,y,-z)$ . Powstaje nowa grupa 2/m ( $C_{2h}$ )

Grupa 2/m ( $C_{2h}$ ). Tabela mnożenia

1	$2_z$	$\bar{1}$	$m_z$
$2_z$	1	$m_z$	$\bar{1}$
$\bar{1}$	$m_z$	1	$2_z$
$m_z$	$\bar{1}$	$2_z$	1



Grupa 2/m ( $C_{2h}$ ). Nieprzywiedlne reprezentacje (tzw. irreps-y)  
oraz jak transformują się ważne funkcje liniowe i dwuliniowe

$C_{2h}$	1	$2_z$	i	$m_z$	Funkcje 1 st.	Funkcje 2 st.
$A_g$	1	1	1	1	$I_z$	$x^2, y^2, z^2, xy$
$B_g$	1	-1	1	-1	$I_x, I_y$	$yz, xz$
$A_u$	1	1	-1	-1	$z$	
$B_u$	1	-1	-1	1	$x, y$	

Grupy ograniczone tylko do obrotów właściwych (jest ich 11)



1 2 3 4 6 222 32 422 622 23 432

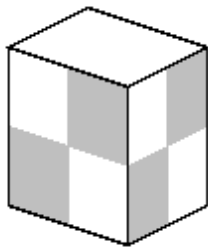
$\bar{1}$   $2/m$   $\bar{3}$   $4/m$   $6/m$   $mmm$   $\bar{3}m$   $4/mmm$   $6/mmm$   $m\bar{3}$   $m\bar{3}m$



Grupy uzyskane z każdej z grup obrotów właściwych po wymnożeniu wszystkich operacji przez inwersję (jeden-do-jeden więc też jest ich 11)

Grupa 222 ( $D_2$ ). Tabela mnożenia

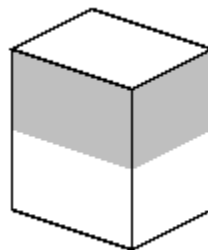
1	$2_x$	$2_y$	$2_z$
$2_x$	1	$2_z$	$2_y$
$2_y$	$2_z$	1	$2_x$
$2_z$	$2_y$	$2_x$	1



Ponieważ inwersja \* inwersja = 1 to można niektóre elementy pomnożyć przez inwersję nie ,psując' tabeli mnożenia

Grupa  $mm2$  ( $C_{2v}$ ). Tabela mnożenia

1	$m_x$	$m_y$	$2_z$
$m_x$	1	$2_z$	$m_y$
$m_y$	$2_z$	1	$m_x$
$2_z$	$m_y$	$m_x$	1



Grupa 2 ( $C_2$ ). Nieprzywiedlne reprezentacje (tzw. irreps-y) oraz jak transformują się ważne funkcje liniowe i dwuliniowe

222( $D_2$ )	1	$2_x$	$2_y$	$2_z$	Funkcje 1 st	Funkcje 2st
A	1	1	1	1		$x^2, y^2, z^2$
$B_1$	1	-1	-1	1	$z, l_z$	$xy$
$B_2$	1	-1	1	-1	$y, l_y$	$xz$
$B_3$	1	1	-1	-1	$x, l_x$	$yz$

Grupa  $mm2$  ( $C_{2v}$ ). Nieprzywiedlne reprezentacje (tzw. irreps-y) oraz jak transformują się ważne funkcje liniowe i dwuliniowe

$mm2$ ( $C_{2v}$ )	1	$2_z$	$m_x$	$m_y$	Funkcje 1 st	Funkcje 2 st
$A_1$	1	1	1	1	$z$	$x^2, y^2, z^2$
$A_2$	1	1	-1	-1	$l_z$	$xy$
$B_1$	1	-1	1	-1	$x, l_y$	$xz$
$B_2$	1	-1	-1	1	$y, l_x$	$yz$

# Wszystkie grupy punktowe (krystalograficzne)

Razem:  $11 + 11 + 10 = 32$

1    2    3    4    6    222    32    422    622    23    432

*m*     $\bar{4}$      $\bar{6}$     *mm2*    *4mm*    *6mm*    *3m*     $\bar{4}3m$   
 *$\bar{4}2m$*      *$\bar{6}2m$*

$\bar{1}$     *2/m*     $\bar{3}$     *4/m*    *6/m*    *mmm*     $\bar{3}m$     *4/mmm*    *6/mmm*    *m $\bar{3}$*     *m $\bar{3}m$*

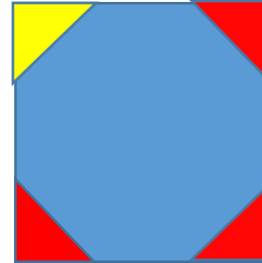
Grupy uzyskane z każdej z grup obrotów właściwych po wymnożeniu dobrze wybranej połowy operacji przez inwersję (jest ich 10)



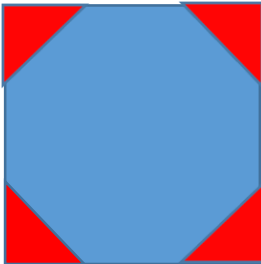
# Znajdź grupę punktową opisującą symetrię poniższych figur



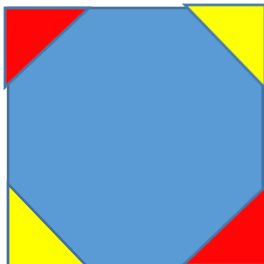
Kwadrat (płaski)



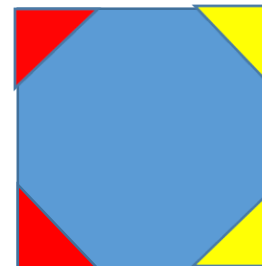
Kwadrat którego jeden róg jest zagięty w górę, a trzy pozostałe w dół



Kwadrat którego cztery rogi są zagięte w górę



Kwadrat którego dwa przeciwległe rogi są zagięte w górę, a dwa pozostałe w dół



Kwadrat którego dwa przyległe rogi są zagięte w górę, a dwa pozostałe w dół

$$\bar{1}(x, y, z, t) \rightarrow (-x, -y, -z, t)$$

$$1'(x, y, z, t) \rightarrow (x, y, z, -t)$$

$$\bar{1}'(x, y, z, t) \rightarrow (-x, -y, -z, -t)$$

Typ inwersji		$\bar{1}$	$1'$	$\bar{1}'$
położenie	$x$	-	+	-
czas	$t$	+	-	-
prędkość	$\frac{dx}{dt}$	-	-	+
przyspieszenie	$\frac{d^2x}{dt^2}$	-	+	-
prędk. kątowna	$\omega = (\mathbf{r} \times \mathbf{v})/r^2$	+	-	-

Typ inwersji		$\bar{1}$	$1'$	$\bar{1}'$
Pole elektr.	$\mathbf{E}$	-	+	-
Pole magnet.	$\mathbf{B}$	+	-	-
	$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial x}$	+	+	+
	$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial x}$	-	-	+
	$rot(\mathbf{E})$	+	+	+
	$rot(\mathbf{B})$	-	-	+
	$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$	-	-	+
	$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$	+	+	+