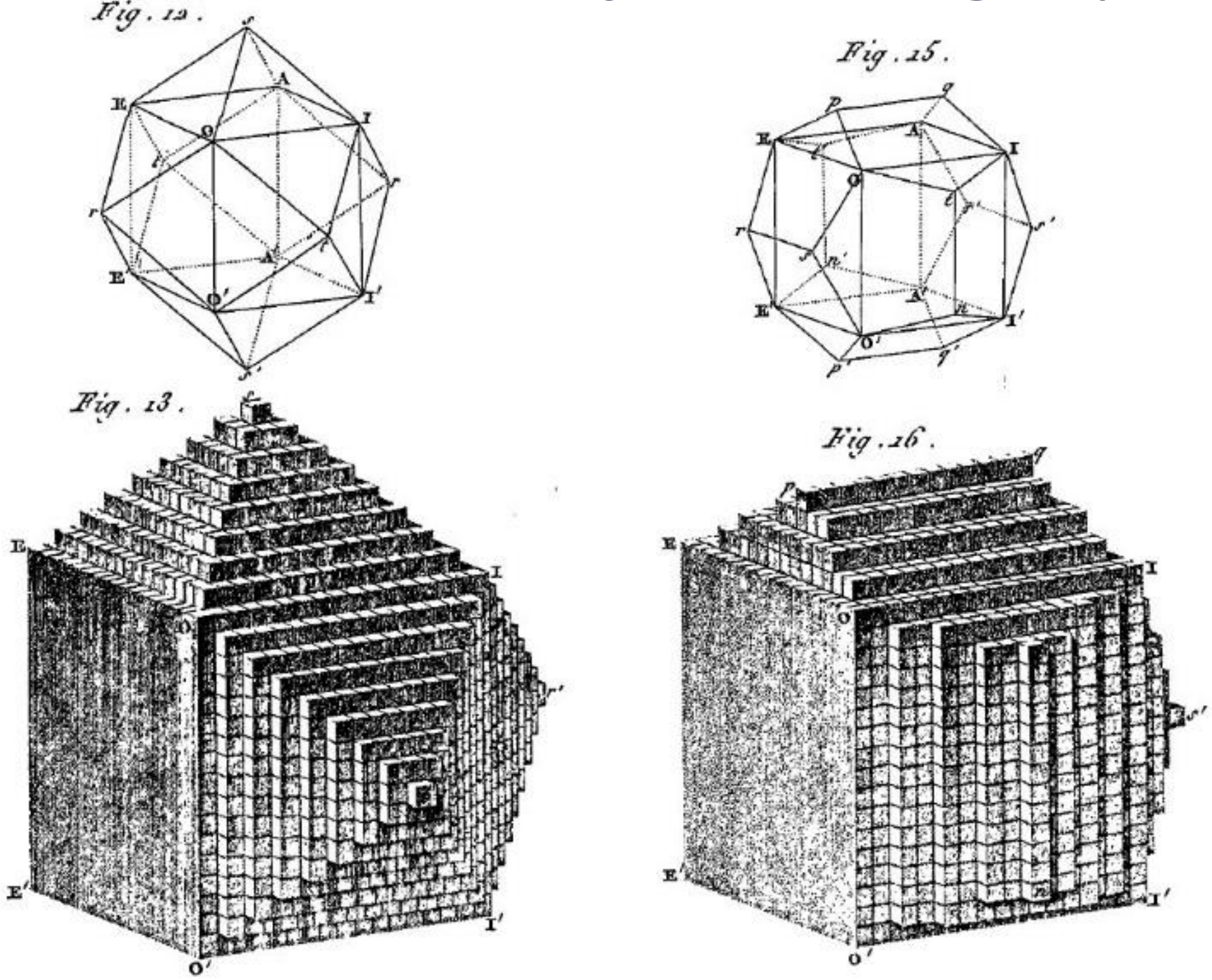
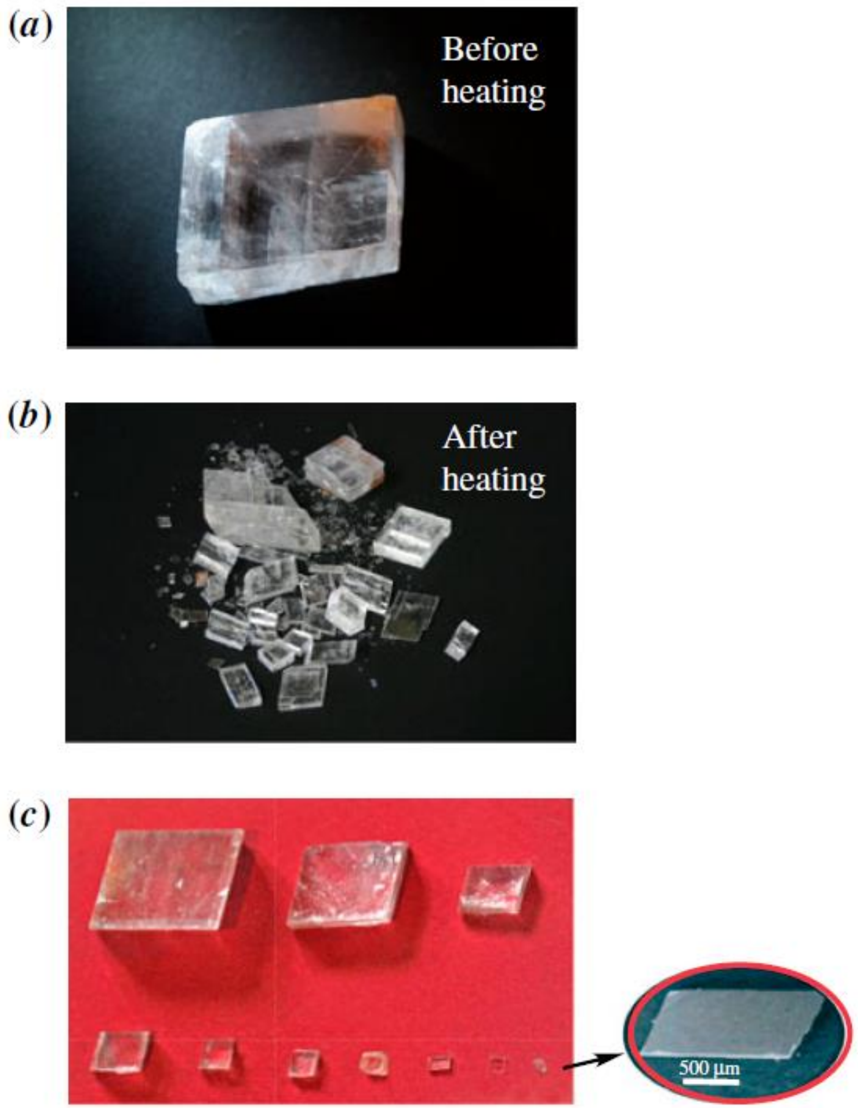
Początki mineralogii – prawo stałości kątów



R. Just Hauy, Traité de minéralogie, Paris (1801)

René Just Haüy (1743-1822)

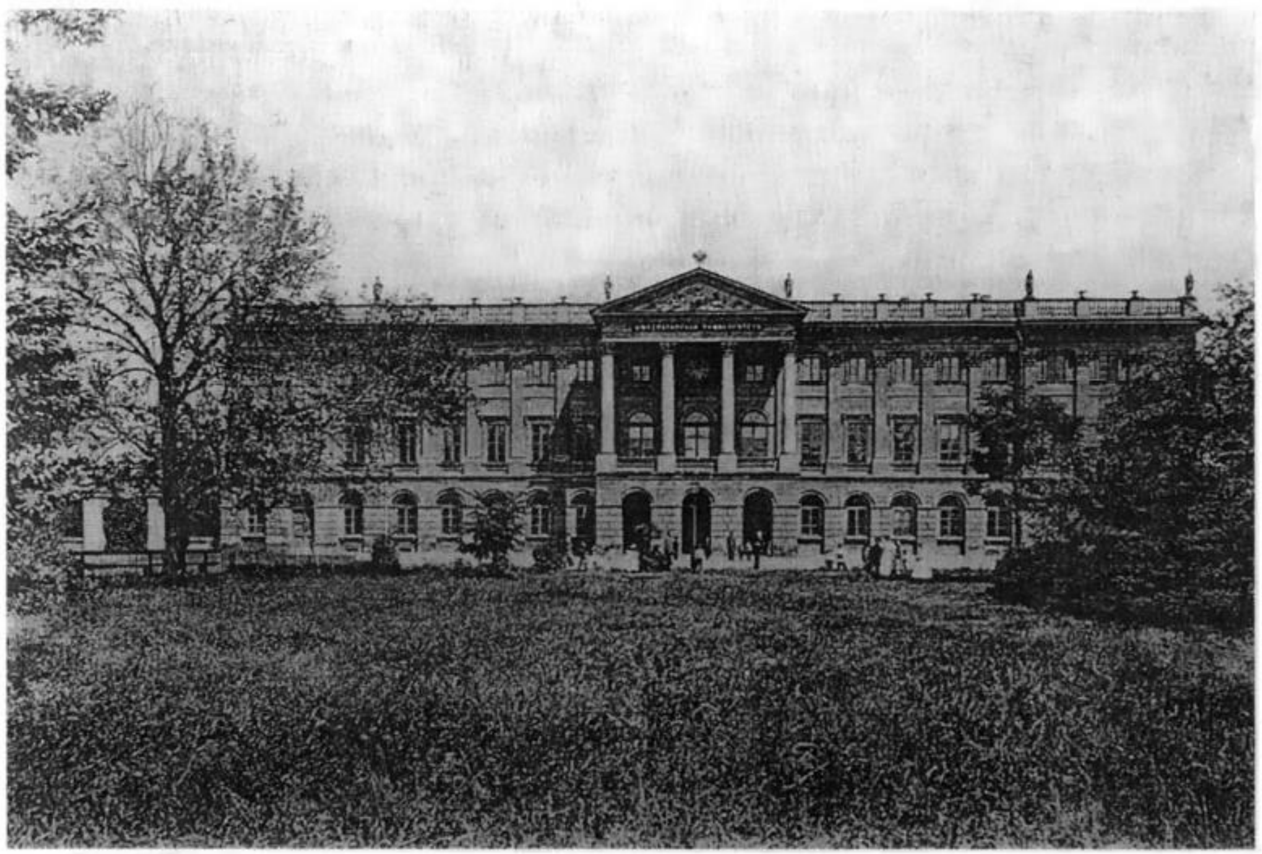


Prawo stałości kątów

Kryształ pęka na mniejsze fragmenty, które mają takie same kąty między krawędziami ale niekoniecznie takie same proporcje długości krawędzi.

Podobnie podczas wzrostu kryształu powstają kształty o tych samych charakterystycznych kątach między krawędziami

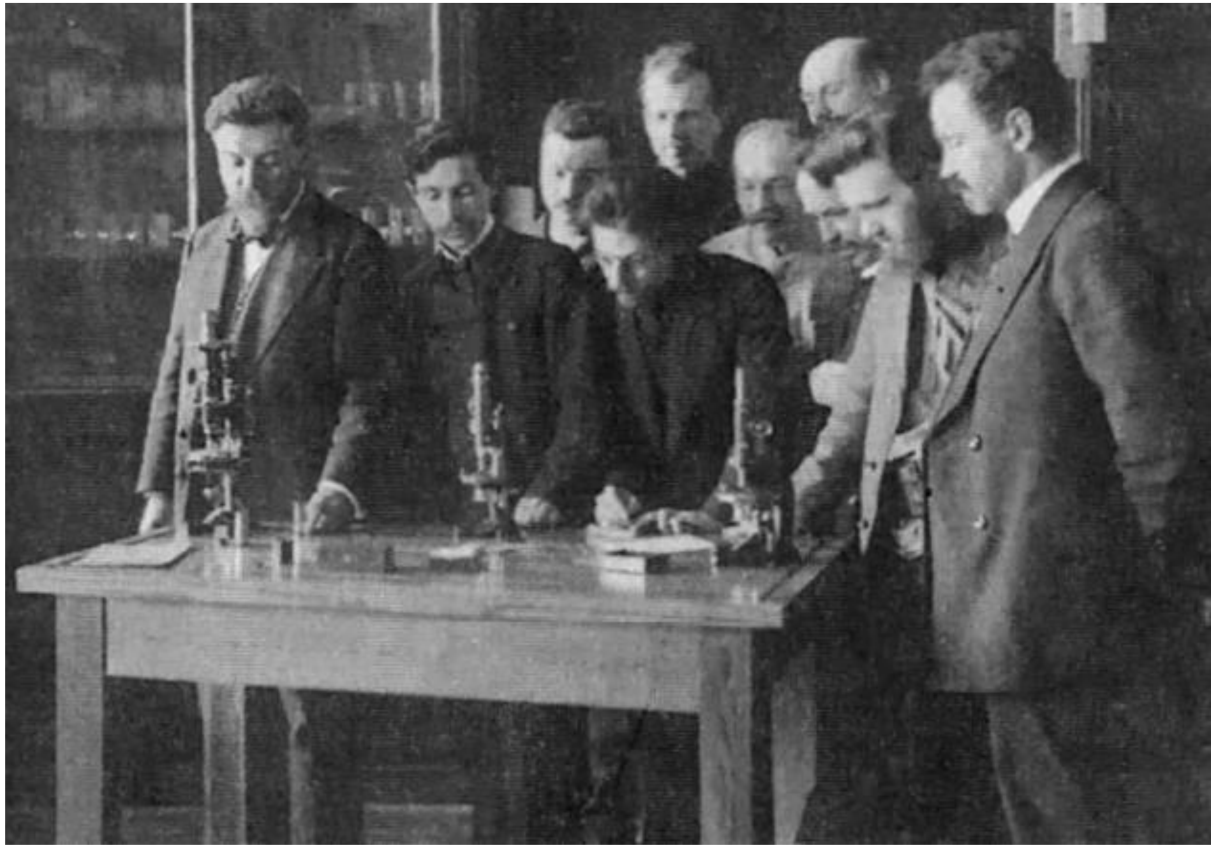
Jurij Wiktorowicz Wulff (1863 – 1925) krystalograf z Uniwersytetu Warszawskiego



Варшавский университет. 80–90-е годы XIX века

Георгий Викторович Вульф.
Конец 80-х годов

Yurii Wulff podczas zajęć

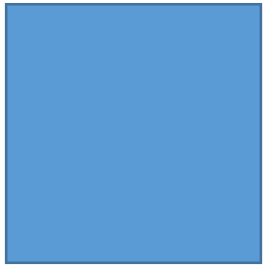


He grew up in Warsaw and graduated from the 6th Warsaw Gymnasium in 1880. He then went to the Imperial Warsaw University to study natural science.

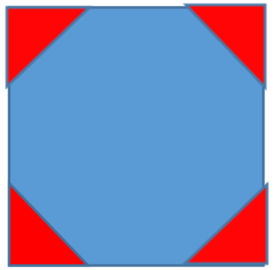
Yu. Wulff was a profesor of crystallography at the Imperial Warsaw University where he worked for about 20 years on crystal growth and symmetry of crystals. In 1907 he moved to the University in Moscow.

One of his students was A.V. Shubnikov (graduated in 1912).

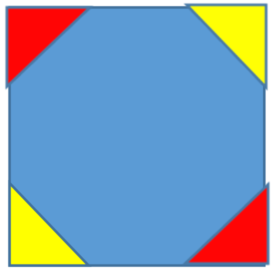
Wulff rozważał która grupa opisze strukturę kryształu



Kwadrat płaski
(4/mmm)



Kwadrat którego cztery rogi są
zagięte w górę
(4mm)



Kwadrat którego dwa
przeciwległe rogi są zagięte
w górę, a dwa pozostałe w dół
(-42m)

Zaproponowane trzy różne grupy:
4/mmm, 4mm oraz -42m powinny
opisywać taki sam kształt zewnętrzny,

ale która z symetrii opisze poprawnie
ułożenie atomów w krysztale?

Z punktu widzenia symetrii,
które operacje pomnożyć
przez inwersję?

Pytanie postawił Wulff circa 1905…
…może kiedyś ktoś na nie odpowie…?

Jak traktować obiekt o danej symetrii?

$$Obiekt = g_1(Obiekt) = g_2(Obiekt)... = g_G(Obiekt)$$

$$Obiekt = \frac{1}{|G|}\sum_{1...G} g_i(Obiekt)$$

Wielkie Twierdzenie o ortogonalności nieprzywiedlnych reprezentacji grup (znane też pod nazwą lematu Schura lub Grand Orthogonality Theorem - GOT)

Każdej operacji g można przypisać macierz $\Gamma^{\mu}_{ij}(g)$
Gdzie mnożenie macierzy odtwarza tabelę mnożenia grupy

Reprezentacje nieprzywiedlne są ortogonalne tzn. suma po wszystkich operacjach w grupie daje

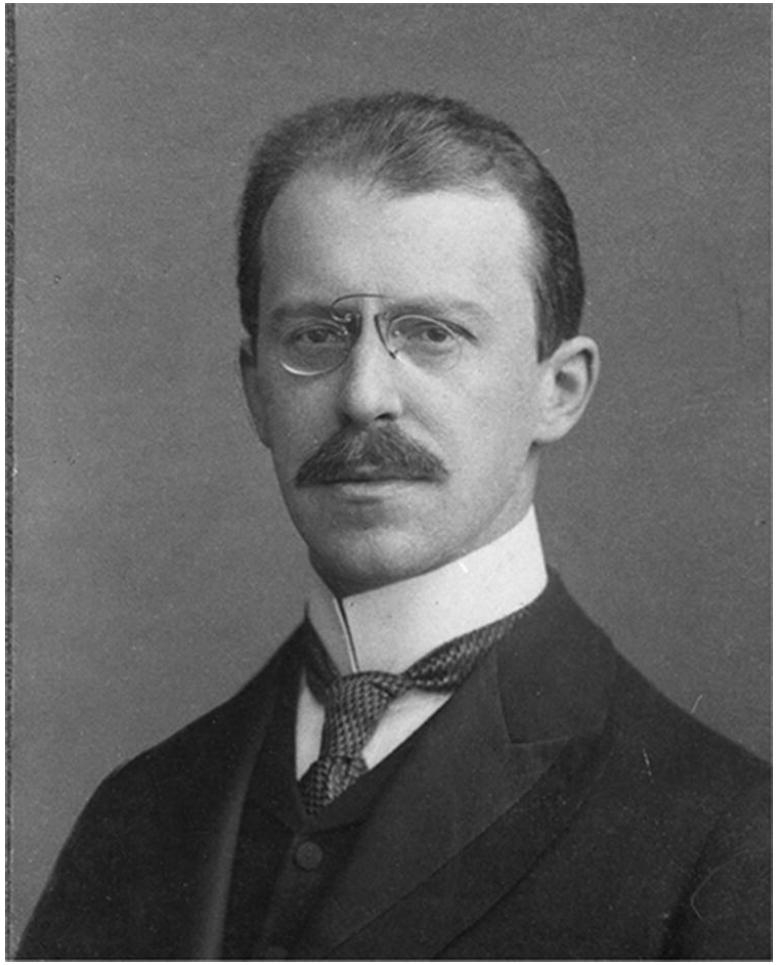
$$\sum_{g\in G} \Gamma^{\mu}_{ij}(g)^{*}\Gamma^{\nu}_{kl}(g) = \frac{|G|}{dim(\Gamma^{\mu})}\delta_{\mu\nu}\delta_{ik}\delta_{jl}$$

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

Dwuwymiarowa reprezentacja nieprzywiedlna grupy 3m (C3v) – proszę sprawdzić że GOT działa

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Issai Schur (1875 – 1941)



Urodził się w Mohylewie, ukończył szkołę średnią w Lipawie i studiował matematykę w Berlinie. W latach 1911-1916 wykładał w Bonn, skąd wrócił do Berlina, a w 1919 roku został mianowany profesorem.

Mimo zaproszeń z Wielkiej Brytanii i Stanów Zjednoczonych nie chciał opuścić hitlerowskich Niemiec. W 1938 zmuszono go do rezygnacji z członkostwa w Pruskiej Akademii Nauk. W końcu wyemigrował do Palestyny i ostatnie lata życia spędził w ubóstwie.

Dla wygody rachunków wprowadza się $\chi^{\mu}(g) = Tr(\Gamma^{\mu}(g))$
tzw. charaktery reprezentacji czyli ślady ich macierzy

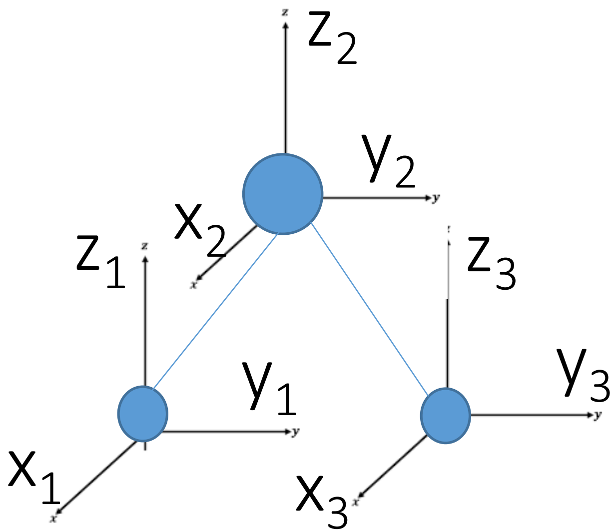
i zapisuje jak wektor: $(\chi^{\mu}(g_1), \chi^{\mu}(g_2), \ldots \chi^{\mu}(g_G))$

Tak zapisane wektory w G- wymiarowej przestrzeni są też ortogonalne:

$$\sum_{g \in G} \chi^{\mu}(g)^{*} \chi^{\nu}(g) = |G| \delta_{\mu\nu}$$

Charaktery irrepsów dla grupy 3m (C3v)

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\ _{v}$		
A_1	1	1	1	z	x^2+y^2, z^2
A_2	1	1	-1	l_z	
E	2	-1	0	(x, y), (l_x, l_y)	(x^2-y^2, xy), (xz, yz)



mm2(C_{2v})	1	2_z	m_y	m_x	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

$$\Gamma_{dyn} = (9, -1, 3, 1)$$

$$\Gamma_{dyn}\Gamma(A_1) = (9, -1, 1, 3)(1, 1, 1, 1) = 12 = 3 \times 4$$

$$\Gamma_{dyn}\Gamma(A_2) = (9, -1, 1, 3)(1, 1, -1, -1) = 4 = 1 \times 4$$

$$\Gamma_{dyn}\Gamma(B_1) = (9, -1, 1, 3)(1, -1, 1, -1) = 8 = 2 \times 4$$

$$\Gamma_{dyn}\Gamma(B_2) = (9, -1, 1, 3)(1, -1, -1, 1) = 12 = 3 \times 4$$

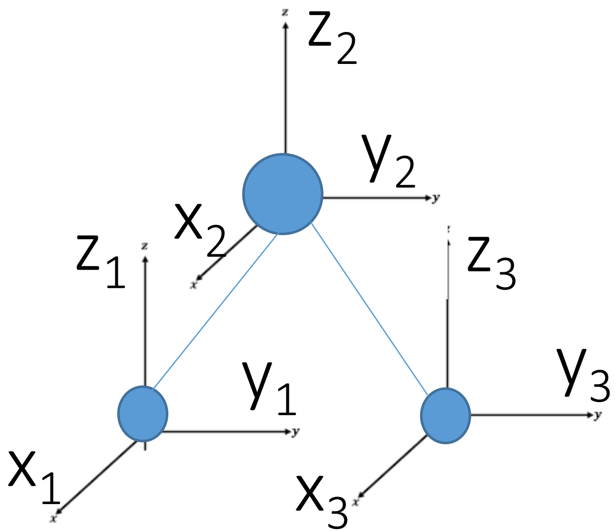
Translacja z + dwie wolne

Obrót wokół z + brak wolnych

Translacja x + obrót z + brak wolnych

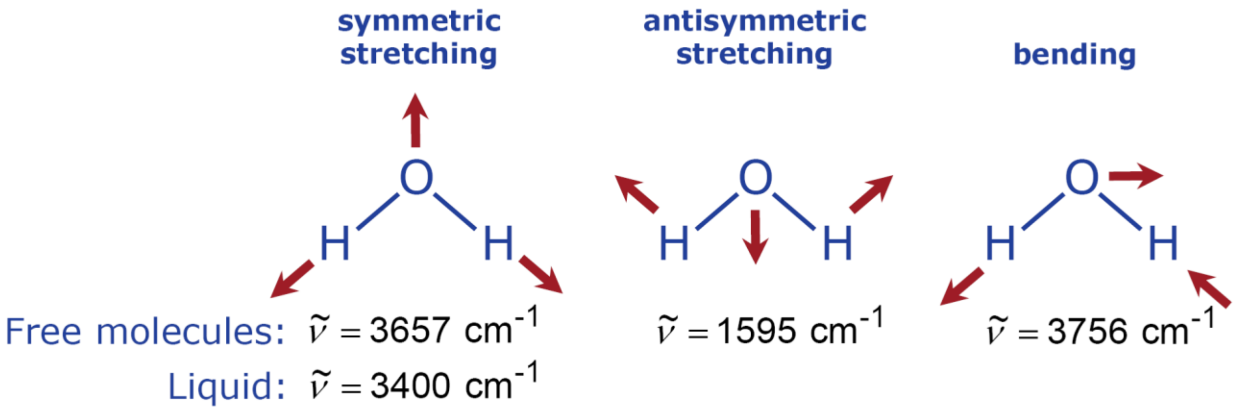
Translacja y + obrót x + jedna wolna

Wniosek: Wibracje molekuły H2O opisane są przez dwa mody z irr. A_1 i jeden z irr. B_2



$$\Gamma_{dyn} = (9, -1, 3, 1)$$

mm2(C_{2v})	1	2_z	m_y	m_x	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



Dwa mody z irr. A_1 jeden z irr. B_2

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

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

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

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

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

Pierre Curie i Maria Skłodowska-Curie

Pierre Curie (1859 – 1906)

Pierre Curie formulated what is now known as the Curie Dissymmetry Principle: a physical effect cannot have a dissymmetry absent from its efficient cause

Jeżeli przyczyna ma pewną symetrię
to skutki MUSZĄ MIEĆ tą samą symetrię

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

Zasada Curie „O symetrii zjawisk” (1894)

Jeżeli przyczyna ma pewną symetrię
to skutki MUSZĄ MIEĆ tą samą symetrię

Gdy prawdziwe jest zdanie $p \Rightarrow q$ to
także prawdziwe jest równoważne $\sim q \Rightarrow \sim p$

Jeżeli skutki nie wykazują pewnej symetrii
(brak niezmienniczości na pewne operacje)
$\Rightarrow$ to przyczyny NIE MOGĄ MIEĆ tej symetrii
(przyczyny na pewno nie są niezmiennicze na
te same operacje).

Nie można nigdy „do końca” udowodnić działania symetrii…

…ponieważ hipotezę o danej symetrii można obalić przez pokazanie zachodzenia zjawiska którego by ta symetria zabraniała

Przy spojrzeniu z góry pokrywa włazu wydaje się kołem – tzn. jest tu grupa symetrii ∞ (tj. obroty o dowolny kąt)

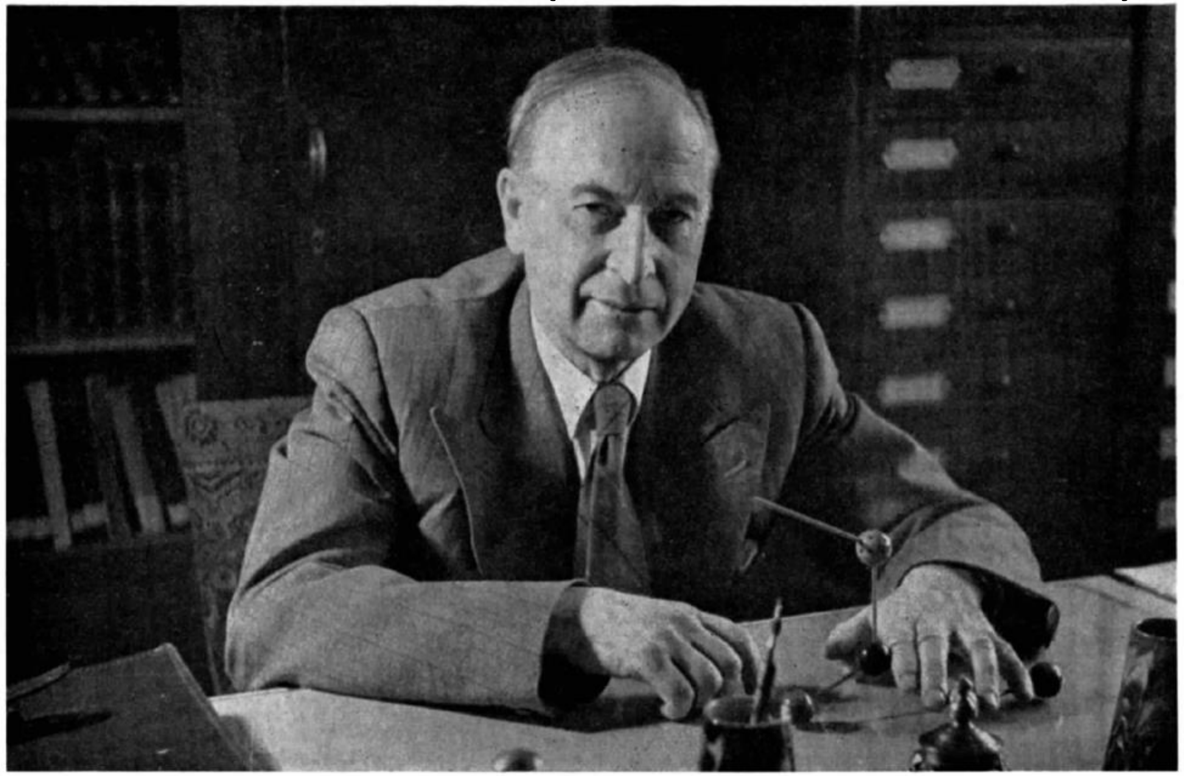
Eksperyment termodynamiczny (topnienie śniegu) pokazuje symetrię przy obrocie o n*(360°/7) (grupa 7)

Wniosek: Struktura pokrywy ma co najwyżej tą samą symetrię. Na pewno nie ma symetrii koła!

Spojrzenie na spód pokrywy potwierdza wnioski wyciągnięte z analizy symetrii (grupa 7)

Władysław Opęchowski
(1911 - 1993)
FUW -> Vancouver

Aleksiej Wasiliewicz Szubnikow
(1887 – 1970)
Moskwa (uczeń Wulffa)



Rozszerzyli grupy o odwrócenie osi czasu, tj. dodali operacje 1’ oraz -1’.
Opisali m.in. uporządkowania magnetyczne w kryształach.

MAGNETOELECTRIC SYMMETRY†

W. OPECHOWSKI

Department of Physics, University of British Columbia, Vancouver, Canada

A review is given of the fundamental definitions and postulates which are necessary for a consistent discussion of the symmetries characterizing the electromagnetic properties of crystalline media. Only very elementary group theory is used. Some historical remarks are included.

W. Opechowski, Int. J. Magnetism, 5, 317 (1974).

W Opechowski and R. Guccione „Magnetic Symmetry" in Magnetism, vol. 2A, chapter 3, Editors: G.T. Rado and H. Suhl, New York, Academic Press

Transformacje polaryzacji magnetycznej, elektrycznej i toroidalnej przez trzy inwersje

Typ inwersji	$\bar{1}$	$1'$	$\bar{1}'$
M	$+$	$-$	$-$
P	$-$	$+$	$-$
T	$-$	$-$	$+$

A.V. Shubnikov, Comput. Math. Applic. 16, 357 (1988).

Comput. Math. Applic. Vol. 16, No. 5–8, pp. 357–364, 1988
Printed in Great Britain

0097-4943/88 \$3.00 + 0.00
Pergamon Press plc

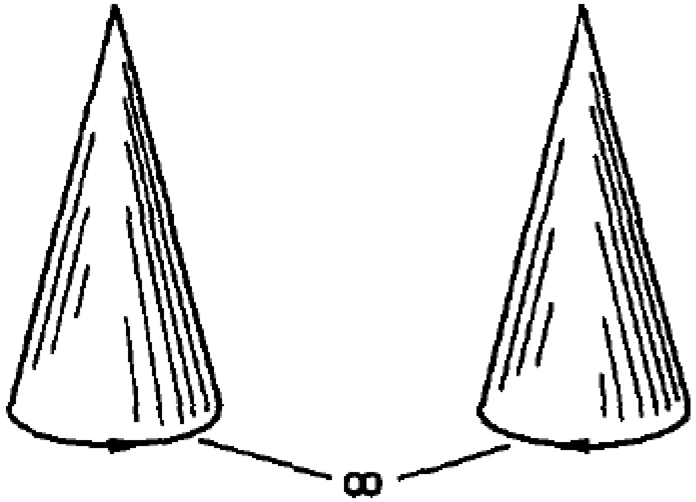
ON THE WORKS OF PIERRE CURIE ON SYMMETRY†

A. V. SHUBNIKOV✠
Institute of Crystallography, Academy of Sciences, U.S.S.R.

Pierre Curie is well known to the wide scientific community as an author of outstanding works on radioactivity but almost unknown as an author of deep investigations on symmetry and its applications in physics. Meanwhile these investigations, had they been continued by Pierre Curie, could turn out to have no less importance to the development of natural sciences as his works on radioactivity for the development of physics and chemistry. Marie Curie testifies that Pierre Curie repeatedly expressed regret at not being able to continue his work on symmetry since he was preoccupied with the studies of radioactivity.

†Originally appeared in Russian in *Uspekhi fizicheskikh nauk* **59**, 591–602 (1956). Translated by L. I. Man.

Grupa graniczna (∞)
Figura: wirujący stożek



1 oś obrotu ∞ rzędu

The first group (∞) has no other symmetry elements but an axis of an infinite order, it is a group of a rotating cone. It admits the existence of *enantiomorphous* (right- and left-handed) forms—a

A.V. Shubnikov, Comput. Math. Applic. 16, 357 (1988).

Grupa graniczna ($\infty \cdot m$)
Figura: nieruchomy stożek

Maks. symetria dla pola elektrycznego E !

$\infty \cdot m$

1 oś obrotu ∞ rzędu
∞ płaszczyzn symetrii (zawierających oś)

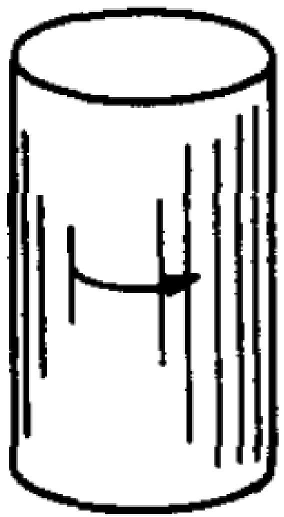
$$\{\infty, m_\perp, \infty', m'_\perp\} = \{\infty, m_\perp\} \times 1'$$

cone rotating to the right or a cone rotating to the left. The second group ($\infty \cdot m$) possesses in addition to an axis of an infinite order also an infinite number of longitudinal symmetry planes. It is a group of a cone at rest which does not admit enantiomorphous forms. The third group

A.V. Shubnikov, Comput. Math. Applic. 16, 357 (1988).

Grupa graniczna (∞/m)
Figura: wirujący walec

Maks. symetria dla pola magnetycznego B !



$\infty : m$

1 oś obrotu ∞ rzędu
1 płaszczyzna symetrii (prostopadła do osi)
środek symetrii
osie poprzeczne dwukrotne (z primem)

$$\{\infty, m'_{\perp}, -1, 2'_{\perp}\} = \{\infty, m'_{\perp}\} \times -1$$

It is a group of a cone at rest which does not admit enantiomorphous forms. The third group ($\infty : m$) has only the following symmetry elements—an axis of an infinite order, one transverse symmetry plane and the center of symmetry. It is a group of a rotating cylinder. It should be

A.V. Shubnikov, Comput. Math. Applic. 16, 357 (1988).

Mamy 32 grupy punktowe (bez prima)

Mamy 32 grupy punktowe (z wszystkimi operacjami pomnożonymi przez prim)

Mamy 58 grup w których część operacji została pomnożona przez prim.

Razem 122 magnetyczne grupy punktowe

Aby możliwe było uporządkowanie ferromagnetyczne grupa magnetyczna musi być podgrupą grupy granicznej dla B oraz M (wirujący walec).

Aby możliwe było uporządkowanie ferroelektryczne grupa magnetyczna musi być podgrupą grupy granicznej dla E oraz P (nieruchomy stożek).