Grupy punktowe

Wszystkie grupy punktowe można utworzyć z prostych grup C_n przez dołączenie obrotów wokół nowych osi obrotów i odbić w płaszczyznach

**Grup punktowych (typów grup) jest skończona ilość, gdyż dodawane osie nie mogą przecinać się pod dowolnymi katami, bo to prowadzi do obrotów o kąty niewspółmierne z 2π
(to prowadziłoby do grupy nieskończonej)**

jest 14 typów skończonych grup punktowych

Grupa C_n

Grupa(y) cykliczna obrotów o kąty $2\pi k/n$ ($k = 0, 1, 2, ..., n\text{-}1$)

jeden element tworzący $a = C_n$, tyle klas ile elementów

$$e = a^n$$

Grupa C_{nh}

= grupa C_n + prostopadła do osi płaszczyzna odbicia σ_h

2n - elementów,

$(C_n)^k$, $k = 0, 1, 2, ..., n\text{-}1$ oraz

$(S_n)^k = (C_n)^k \sigma_h$, $k = 0,1,2,..,n\text{-}1$ obrotów zwierciadlanych

abelowa,

jeśli $n = 2k$, to grupa zawiera inwersję $i = \sigma_h (C_n)^{n/2}$

grupa $C_{0h} = C_s = \{ e, \sigma_h \}$,

$C_i = \{ e,\ i \}$

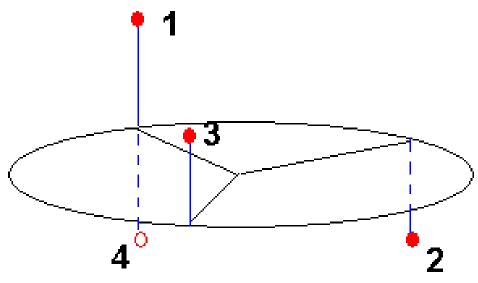
Grupa S_n

grupa składająca się z potęg obrotu zwierciadlanego S_n

$$e,\ S_n,\ S_n^2 = C_n,\ S_n^3 = \sigma_h C_n^3,\ \ldots$$

dla n= 2k+1, $S_n = C_{nh}$ i grupa jest rzędu 2n gdyż

$$S_n^{2n} = e, \quad S_n^n = \sigma_h$$



n=3

dla n=2k grupa jest rzędu n, bo $S_n^n = C_n^n = e$,
C_n i σ_h nie wchodzą niezależnie do grupy,
elementami są tylko S_n

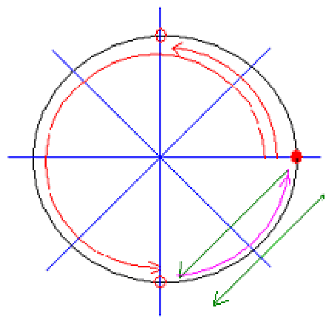
$S_2 = C_i$

Grupy C_{nv}

oś n-tego rzędu + n płaszczyzn odbicia przechodzących przez tę oś

zawierają 2n elementów, n z nich to elementy grupy C_n,
pozostałe to odbicia w pionowych płaszczyznach

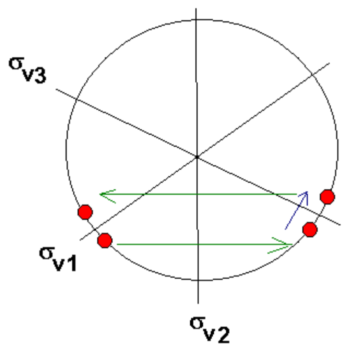
oś jest tu dwustronna, tzn., C_n^k i C_n^{n-k} są sprzężone
(przez złożenie odbić)
np. C_4^1 i C_4^3, sprzężone przez odbicie w jednej z 4-ech płaszczyzn



przy obrotach co druga płaszczyzna pokrywa się

- jeśli n = 2k+1 to wszystkie płaszczyzny są równoważne i odbicia w nich tworzą jedną klasę ponadto w grupie jest n-1 klas obrotów i klasa elementu e

np. dla k=1, tzn. n=3: $\sigma_{v1} = (\sigma_{v2})^{-1}\,\sigma_{v3}\,\sigma_{v2}$



przy obrotach płaszczyzny przechodzą nawzajem w siebie

Grupa D_n

Zawiera C_n (oś n-krotną) oraz
n osi 2-go rzędu, prostopadłych do osi n-krotnej
(osie te oznaczamy u_2)

zawiera 2n elementów (n –obrotów wokół osi n-krotnej,
jednym z nich jest element e)
oraz (n obrotów wokół osi 2-go rzędu)

D_n <- izomorfizm -> C_{nv}

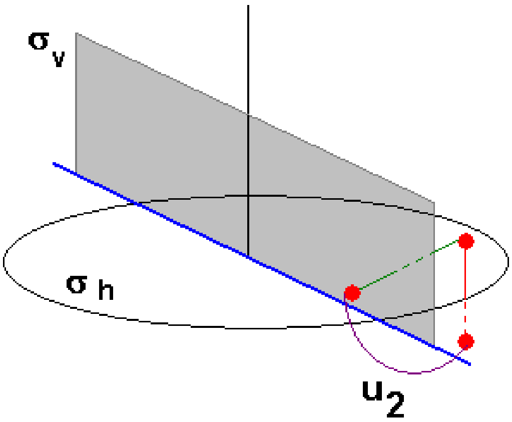
Grupa D_{nh}

D_{nh} = D_n + płaszczyzna odbicia σ_h prostop. do osi n-krotnej

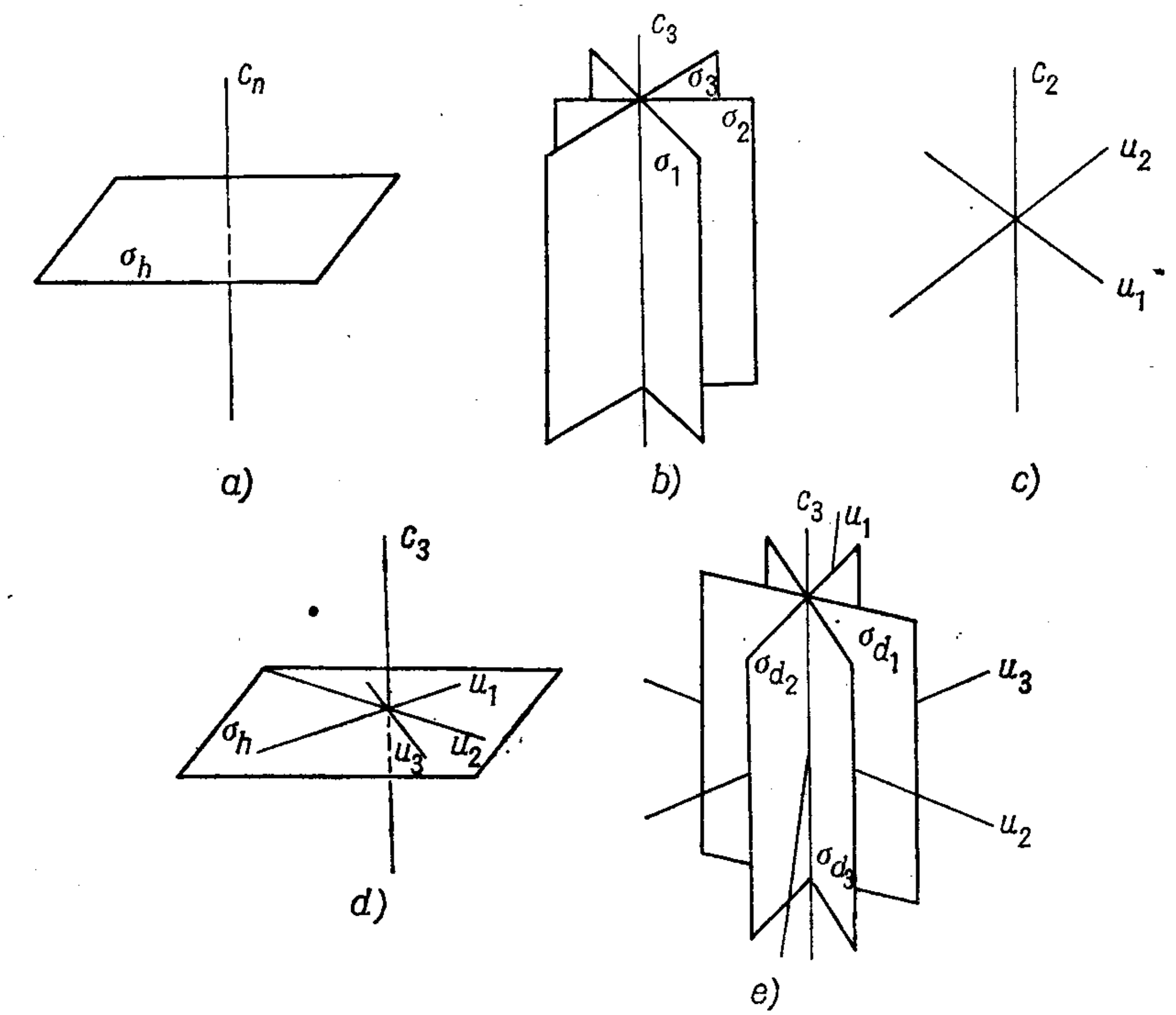
Przyłączenie poziomej płaszczyzny odbicia powoduje automatyczne dodanie n pionowych płaszczyzn zawierających oś n-krotną

Zaiera 4n elementów:

2n - elementów grupy D_n
2n - iloczynów typu $u_2\sigma_h = \sigma_v$
(rysunek --->)



$$D_{nh} = D_n \times C_s$$



Elementy symetrii grup punktowych. **a)** C_{nh}; **b)** C_{3v}; **c)** D_2; **d)** D_{3h}; **e)** D_{3d}.

Grupa D_{nd}

Otrzymuje się przez dołączenie do grupy D_n , n *diagonalnych* płaszczyzn odbicia, zawierających oś n-krotną , ale usytuowanych pomiędzy osiami u_2

zawiera 4n elementów

odbicia w płaszczyznach diagonalnych ozn. σ_d

grupa jest izomorficzna z D_{2n}

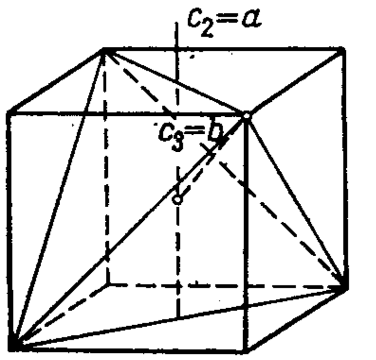
Grupa T

Grupa obrotów przeprowadzających czworościan w siebie

grupa ma 12 elementów

e, 3 c_2 , 4 c_3 , 4 c_3^2

elementy te związane są z 3-ma osiami 2-krotnymi (krawędź-krawędź) i 4-ma osiami 3-krotnymi (wierzchołek-ściana)



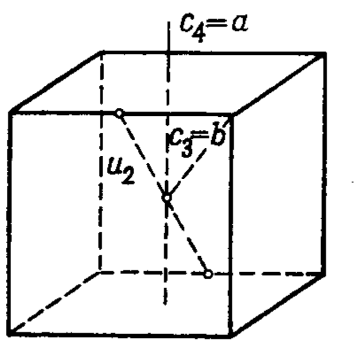
grupa zawiera 4 klasy (jak wyżej),

Grupa T_h

$$T_h = T \times C_i$$

Grupa O

grupa obrotów przeprowadzających sześcian w siebie



3 osie 4-krotne (ściana-ściana)
4 osie 3-krotne (przeciwległe wierzchołki)
6 osi 2-krotnych u_2 (środki przeciwległych krawędzi)

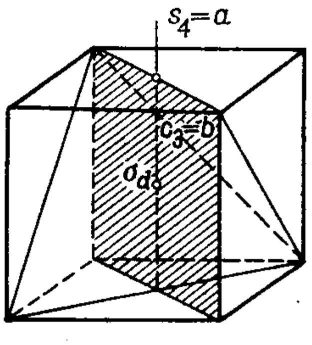
w rezultacie zawiera 24 elementy w 5-ciu klasach

$$(e), \ (4C_3 , 4C_3^2), \ (3C_4 , 3C_4^3), \ (3C_4^2), \ (6u_2)$$

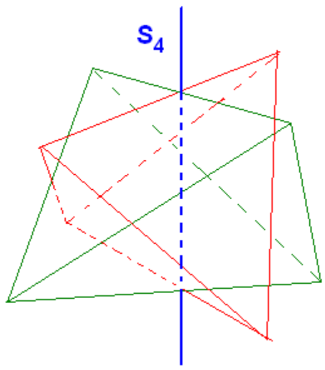
Grupa T_d

Pełna grupa symetrii czworościanu

T + odbicia w płaszczyznach zawierających dwa wierzchołki i środek przeciwległej krawędzi



Zawiera 24 elementy (12 z grupy T) + 6 odbić w płaszczyznach σ_d , i 6 obrotów zwierciadlanych: 3 S_4 i 3 S_4^3



T_d - izomorficzna z - O

Posiada 5 klas
(grupa punktowa kryształów o strukturze blendy cynkowej)

Grupa O_h

Pełna grupa symetrii sześcianu
(O + inwersja)

$$O_h = O \times C_i = T_d \times C_i$$

48 elementów w 10 klasach

dwa generatory, np. C_4 i S_6

---

omówiliśmy 12 grup punktowych (typów grup)
(w sumie jest ich 14 ale dwie g.p. dwudziestościanu nie mają zastosowania w symetrii kryształów)

Grupa obrotów

- grupa symetrii kuli, R - wszystkie możliwe obroty o dowolne kąty wokół osi przechodzących przez środek kuli

inaczej $O^{+}(3)$ **– grupa obrotów właściwych**

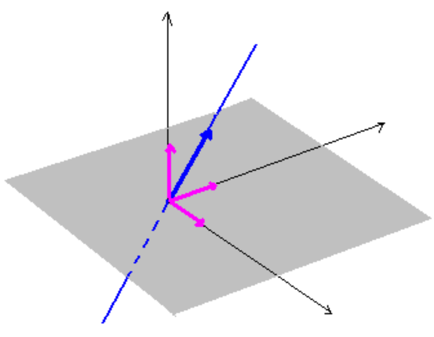
- grupa ciągła

- każdy obrót określa się przez podanie osi l, i kąta obrotu α

$C_l(\alpha)$

- obrót $C_l(\alpha)$ defniuje się przez podanie wektora

$$\alpha = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$$



wzdłuż osi l, i o długości

$$|\boldsymbol{\alpha}| = \sqrt{\alpha_x^2 + \alpha_y^2 + \alpha_z^2} \leq 2\pi$$

$$R \times C_i = R_h$$

tzn. dodanie inwersji do R, tworzy tzw. _pełną grupę ortogonalną_

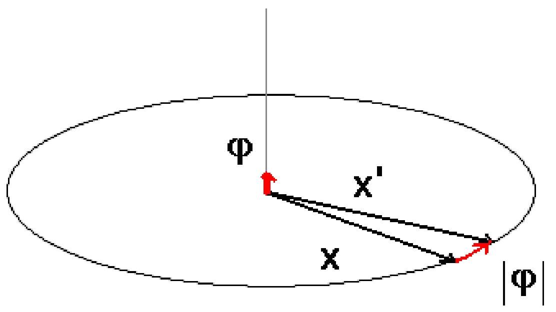
każda skończona grupa punktowa jest podgrupą grupy ortogonalnej

obroty o _nieskończenie małe kąty_

obrót o dowolny kąt - ciąg obrotów o dowolnie małe kąty ϕ

dla „małego” ϕ
(X)

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{x} \times \varphi$$



gdzie ϕ można złożyć z 3 obrotów o kąty ϕ_x, ϕ_y, ϕ_z,
wokół osi – odpowiednio – x, y, z

zobaczmy jak zmienia się funkcja F(x,y,z) (różniczkowalna) przy „nieskończenie małym obrocie” o ϕ

$$D(\varphi)F(x,y,z) = F(\mathbf{x}') =$$
$$F(x + z\varphi_y - y\varphi_z, y - z\varphi_x + x\varphi_z, z + y\varphi_x - x\varphi_y)$$

rozkładając w szereg Taylora i zachowując tylko wyrazy liniowe

(Y)

$$D(\varphi)F(x,y,z) = F(x,y,z) +$$
$$(z\varphi_y - y\varphi_z)\tfrac{\partial F}{\partial x} + (x\varphi_z - z\varphi_x)\tfrac{\partial F}{\partial y} + (y\varphi_x - x\varphi_y)\tfrac{\partial F}{\partial z} + ..$$
$$= (1 + i\mathbf{L}\varphi)F(x,y,z)$$

(pominąłem dalsze wyrazy ..)

gdzie

$$\mathbf{L} = -i\mathbf{x} \times \nabla$$ (tu **X** = **r**)

jest (z dokładnością do stałej Plancka) operatorem momentu pędu – a tu nazywa się <u>operatorem nieskończenie małego obrotu</u>

można dość łatwo pokazać, że pełne rozwinięcie (Y) daje

$$D(\varphi) = 1 + i(\mathbf{L}\varphi) + \frac{(i(\mathbf{L}\varphi))^2}{2} + \ldots + \frac{(i(\mathbf{L}\varphi))^n}{n!} + \ldots = e^{i(\mathbf{L}\varphi)}$$

(*L)

widzimy związki:

- **grupa translacji - operator pędu**
- **grupa obrotów - operator momentu pędu**