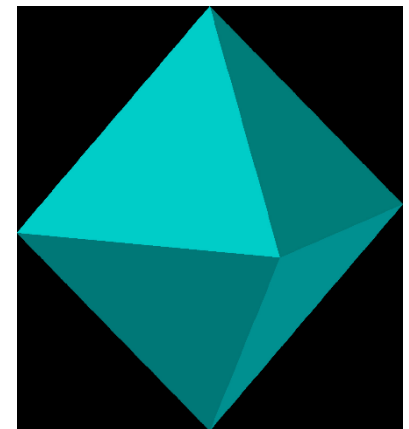
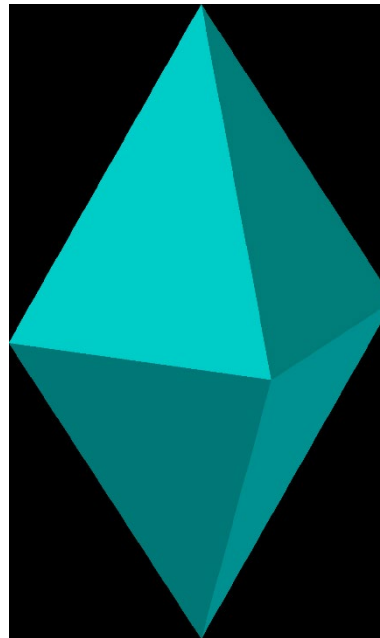
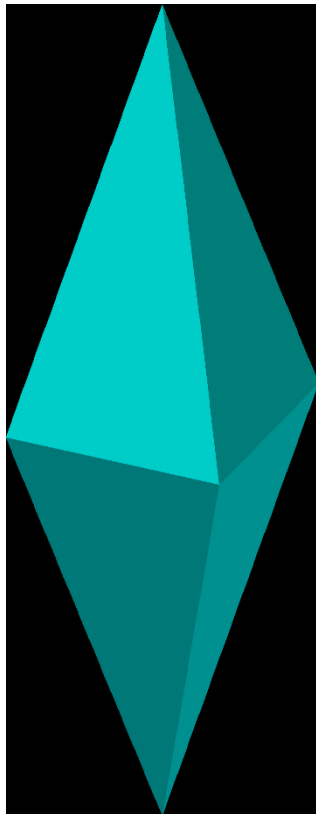


Семинар № 1

Операции симметрии. Их графические образы



Основная литература по симметрии в кристаллографии:

**П.М.Зоркий, «Симметрия молекул
и кристаллических структур», МГУ, 1986**

или

**П.М.Зоркий, Н.Н.Афони́на,
«Симметрия молекул и кристаллов», МГУ, 1979;**

**П.М.Зоркий, «Задачник по кристаллохимии
и кристаллографии», МГУ, 1981**

Преобразования геометрической фигуры:
любые изменения положения в пространстве
всей фигуры или ее составных частей

Фигура ***симметрична***,
если существуют преобразования,
переводящие ее в саму себя (самосовмещение)

Такие преобразования называются
операциями симметрии.

Вращение
Отражение
Инверсия

*У каждой операции симметрии есть
графический образ*

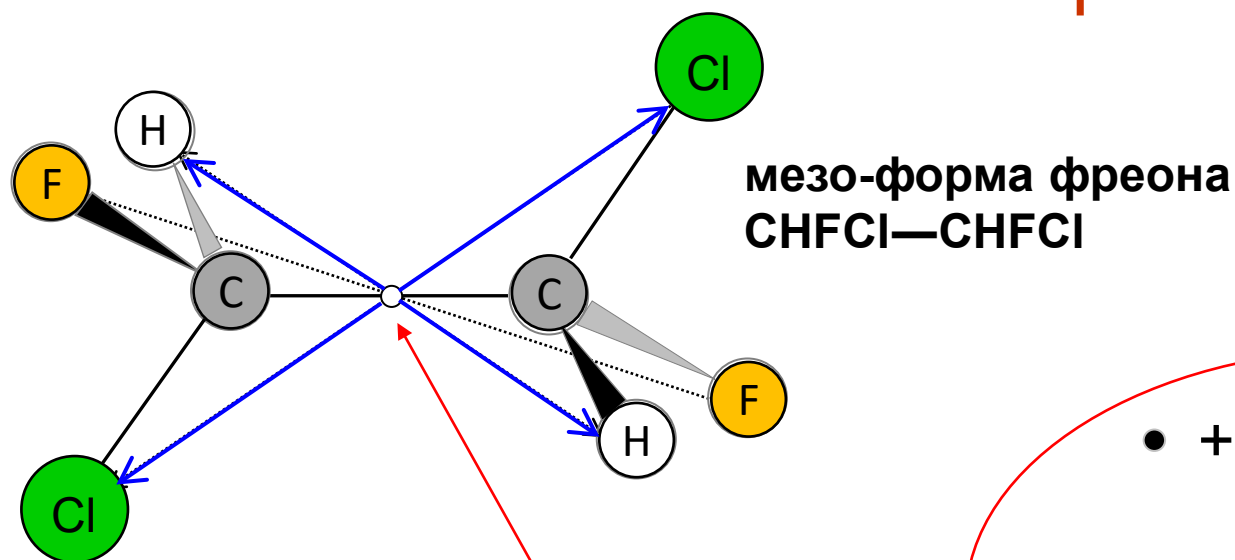
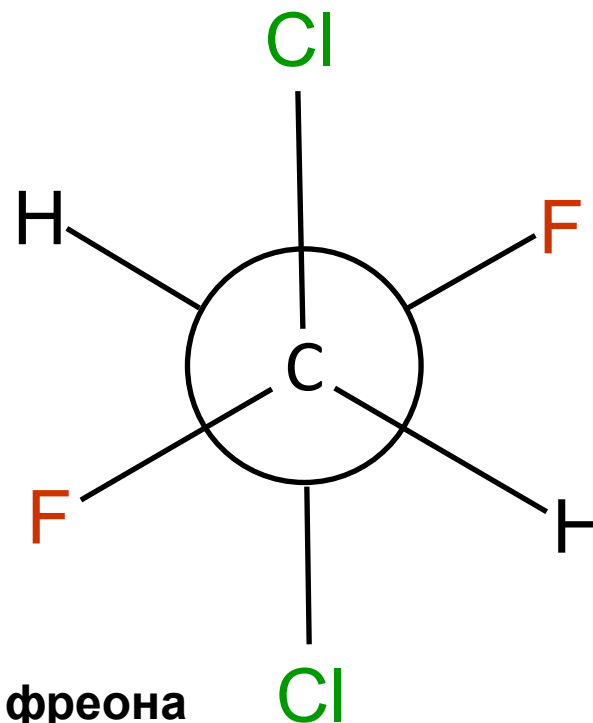
Вращение – поворотная ось

*Отражение – плоскость зеркального
отражения*

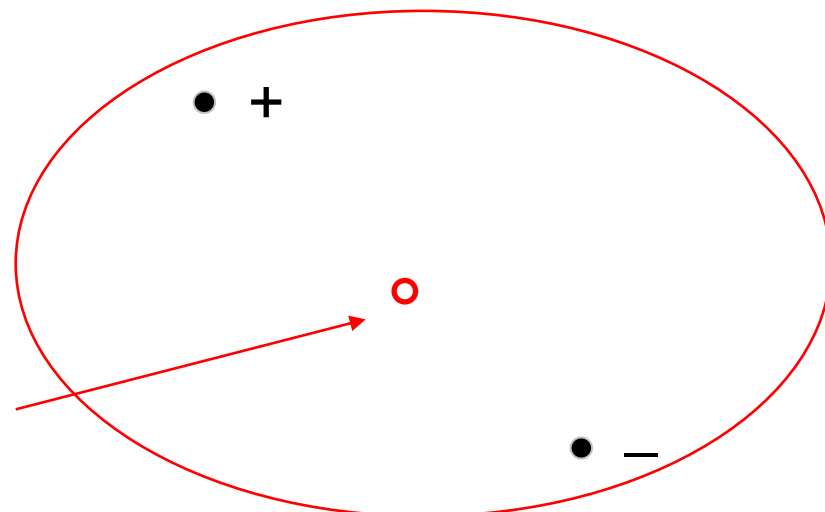
Инверсия - центр инверсии

Операция инверсии

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

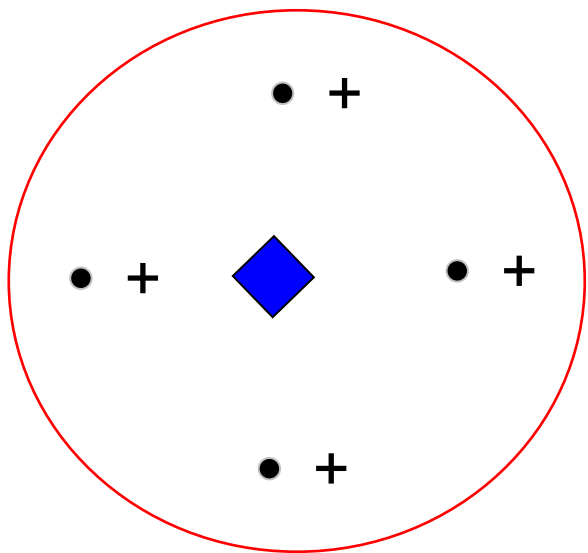
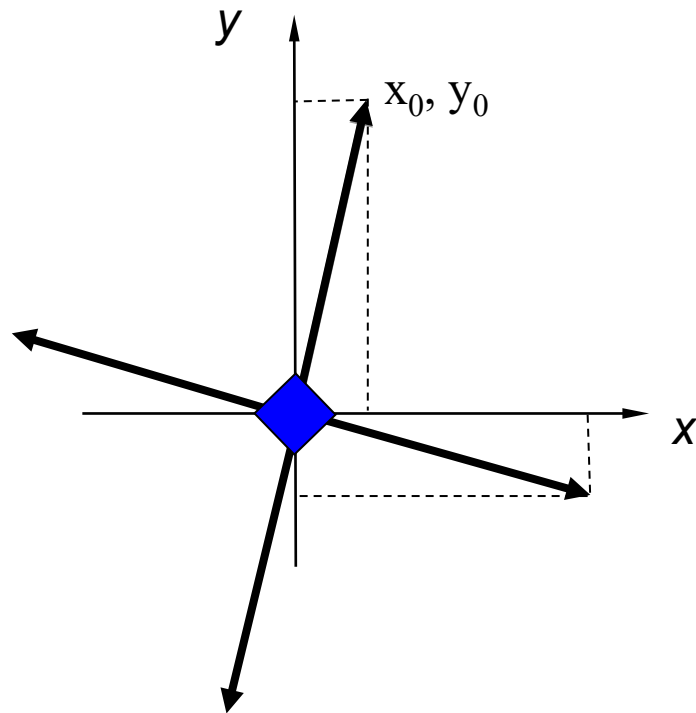


Графический образ: центр инверсии



Поворот вокруг оси Z

$$(x_0, y_0, z) \rightarrow (x, y, z)$$

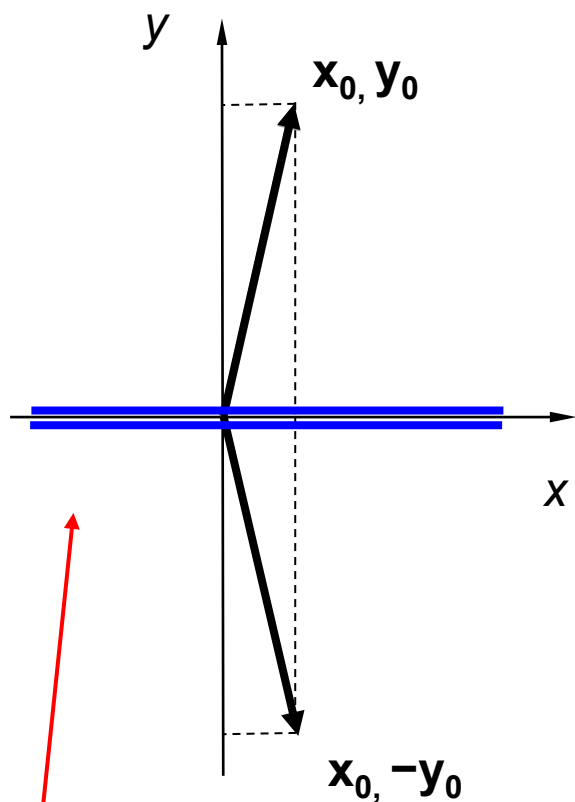


Поворот на 90°

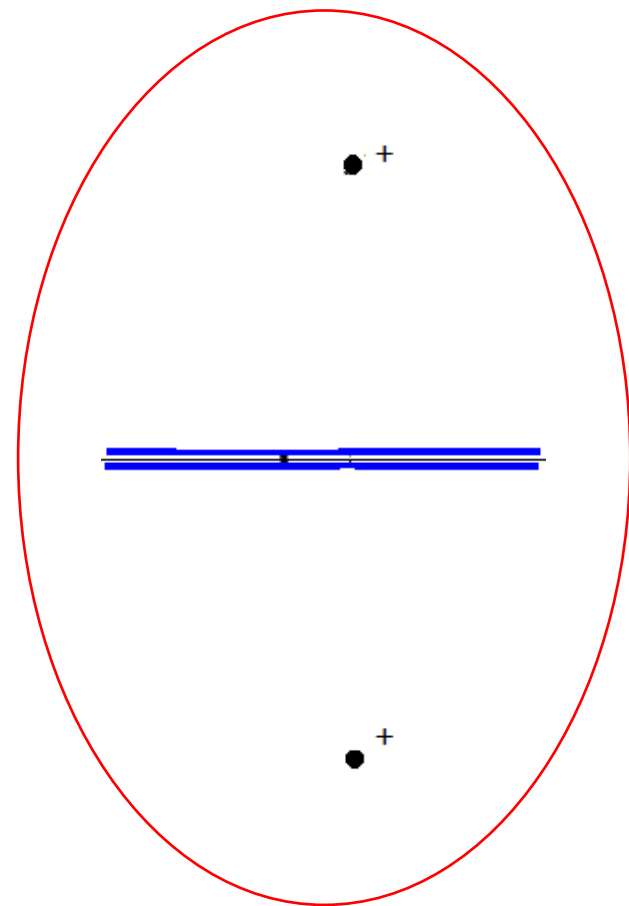
$$\begin{aligned}(x, y, z) &\rightarrow (y, \bar{x}, z) \\ &\rightarrow (\bar{x}, \bar{y}, z) \\ &\rightarrow (\bar{y}, x, z)\end{aligned}$$

Отражение в плоскости XZ

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



Графическое
изображение
вертикальной плоскости

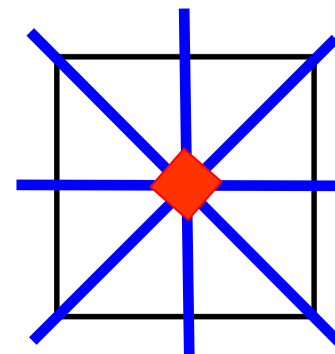
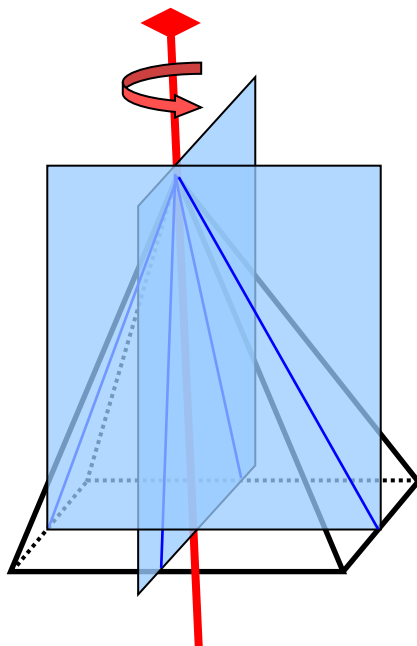


Геометрическое
представление
операции отражения

Тетрагональная пирамида:

Операции симметрии: отражения и повороты на 90° , 180° и 270°

(вид сверху)



Элементы симметрии:
4 плоскости и
поворотная ось 4-го порядка

Совокупность всех операций симметрии фигуры называется ее группой симметрии.
Графическое изображение всех элементов фигуры называется графиком группы.

- Симметрию конечных фигур (молекул, полиэдров) описывают точечные группы.
- Точечные группы могут описывать также симметрию окружения точки или повторяющегося фрагмента в бесконечных фигурах
- Точечные группы содержат только закрытые элементы симметрии.
- В результате действия закрытых элементов симметрии хотя бы одна точка фигуры остается неподвижной.

Для описания симметрии конечного объекта существует только **два вида закрытых преобразований симметрии:**

1. Собственные вращения: повороты фигуры как единого целого.

Соответствующий элемент симметрии – **поворотная ось N**

2. Несобственные вращения: перестановка одинаковых частей фигуры (отражение, инверсия и их комбинация с поворотами).

Им соответствуют элементы симметрии:

**Зеркально-поворотная ось S_n или
Инверсионная ось $-N$**

Точечные группы

символика Шёнфлиса

- Поворотные
оси C_n
- Зеркально-поворотные
оси S_n

символика Германа-Могена

- Поворотные
оси N
- Инверсионные
оси $\bar{N}$

РАЗНЫЕ геометрические образы
для несобственного вращения

Поворотная ось порядка n - прямая, при повороте вокруг которой на угол $360^\circ/n$, фигура самосовмещается.

При вращении вокруг оси на угол 360° фигура n раз совместится сама с собой.

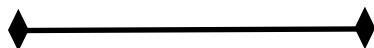
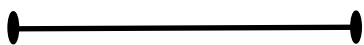
Обозначения C_n^k или N^k указывают, что относительно исходного положения фигура повернулась на угол $k \cdot 360^\circ/n$, где $k = 1, 2, \dots, (n-1)$ (кратность поворота)

по Шёнфлису ($n=N$) C_n : $C_1=e$ C_2 C_3 C_4 C_5 $C_6 \dots$ C_∞

по Герману-Могену N : 1 2 3 4 5 6 ... ∞



Графический символ:

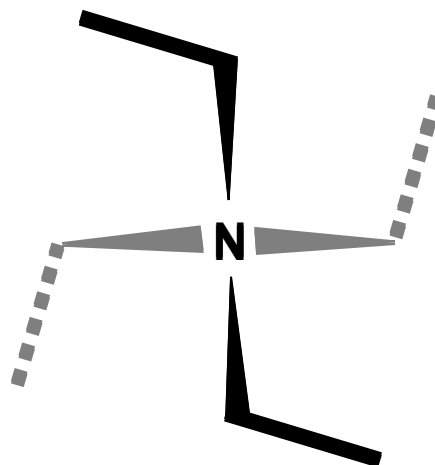
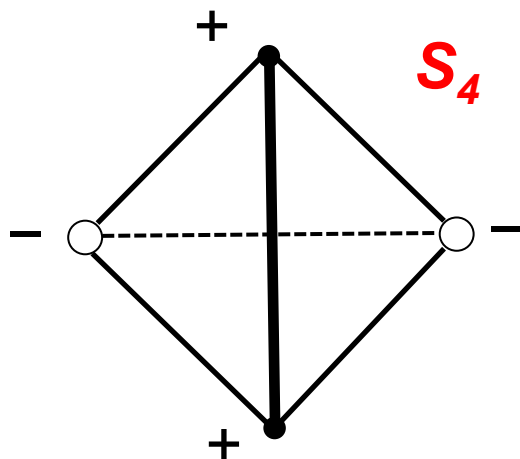


Вертикальная ориентация

Горизонтальная ориентация

Зеркально-поворотная ось S_n - прямая, при повороте вокруг которой на угол $360^\circ/n$ и последующем отражении в перпендикулярной плоскости, фигура самосовмещается. Обозначение S_n^k указывает, что операция поворота и последующего отражения была выполнена k раз относительно исходного положения фигуры. $k = 1, 2, \dots, (n-1)$

Несобственное вращение тетраэдра:
поворот с отражением на 90°



катион тетраэтиламмония
 $N(C_2H_5)_4^+$

Инверсионная ось $\bar{N}$ - прямая, **несущая особую точку**, при повороте вокруг которой на угол $360^\circ/n$ и **последующей инверсии в особой точке**, фигура самосовмещается.

Операция инверсии: инверсионная ось первого порядка $\bar{1}$

• +

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

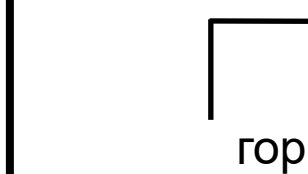


• –

Графический образ – центр инверсии

Графические обозначения для несобственного вращения

по Герману-Могену $\bar{N}$: $\bar{1}$ ~~$\bar{2}$~~ $\bar{3}$ $\bar{4}$ $\bar{5}$ $\bar{6}$ $\bar{7}$ $\bar{8}$... ∞

m 
вертикальная
ориентация

 горизонтальная
ориентация



по Шёнфлису S_n , но

$S_2=i$
 $S_1=\sigma$

S_6

S_4

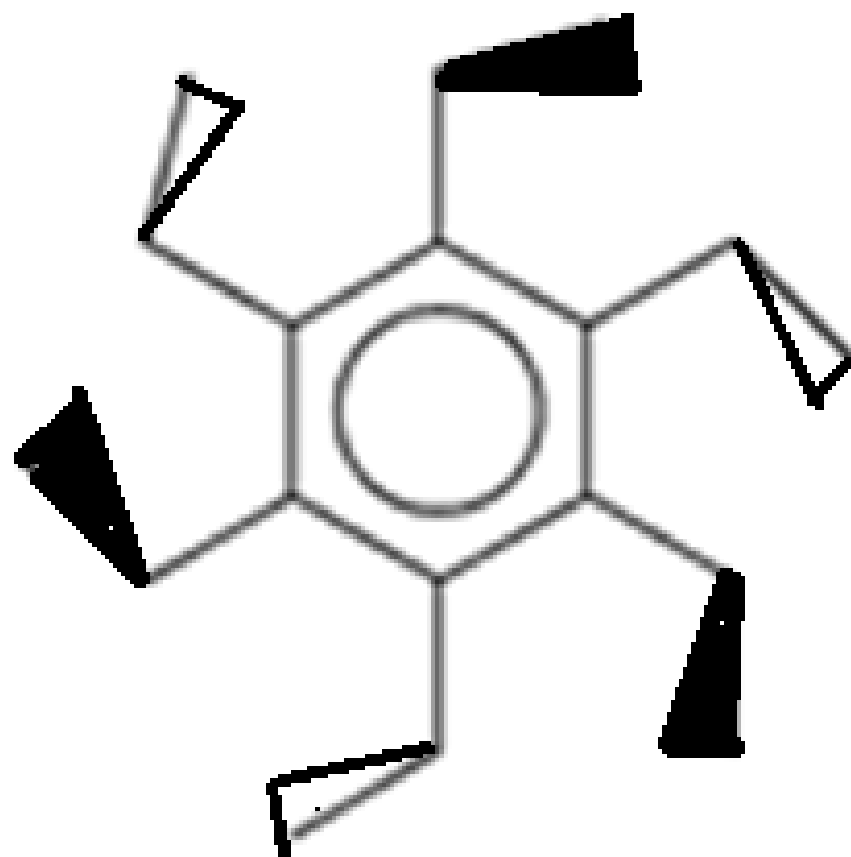
S_{10}

S_3

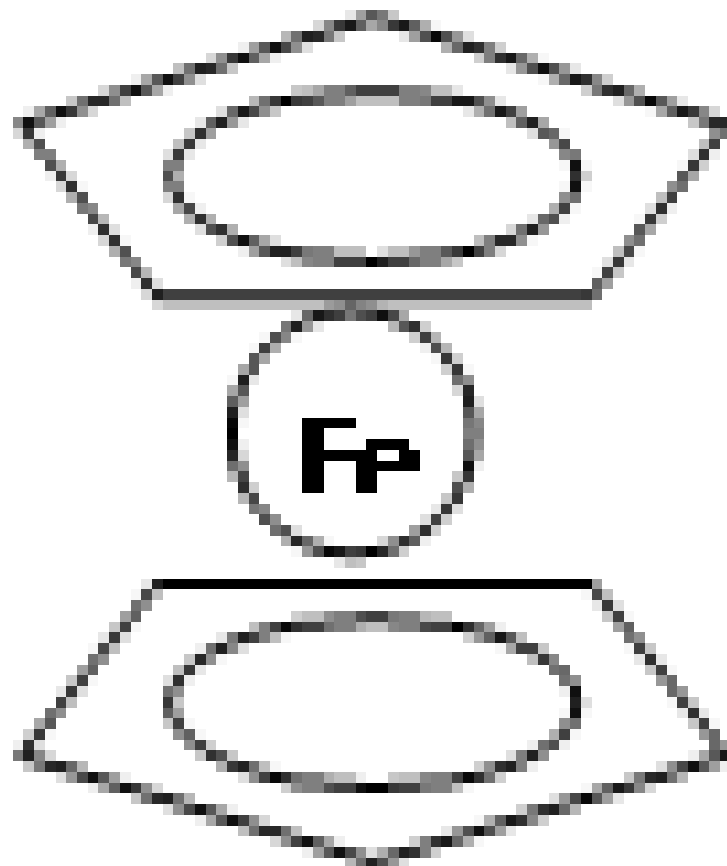
S_{14} $S_{8...}$... S_∞

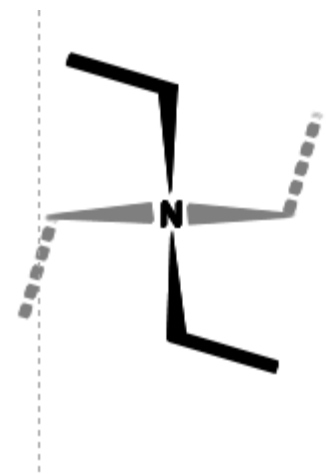
$\overline{3}$

S_6



$\overline{3}$
 Δ

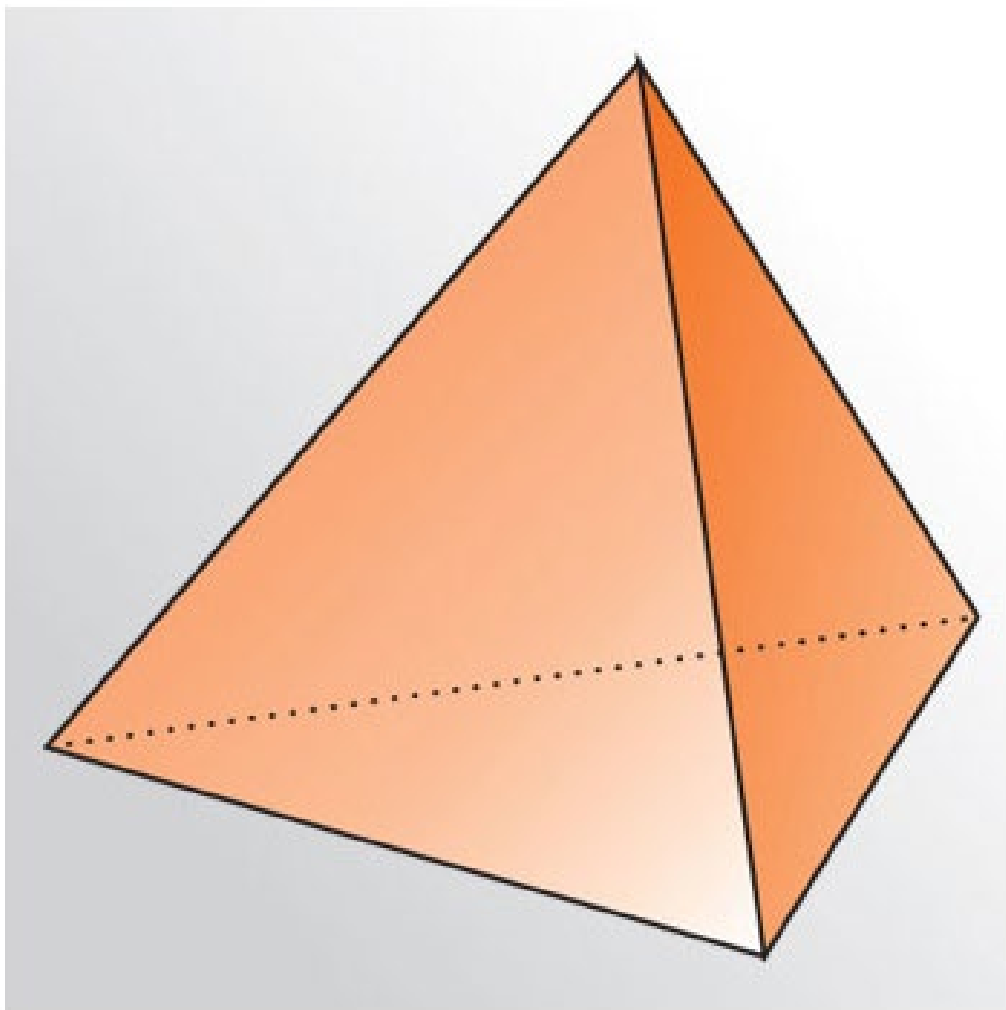


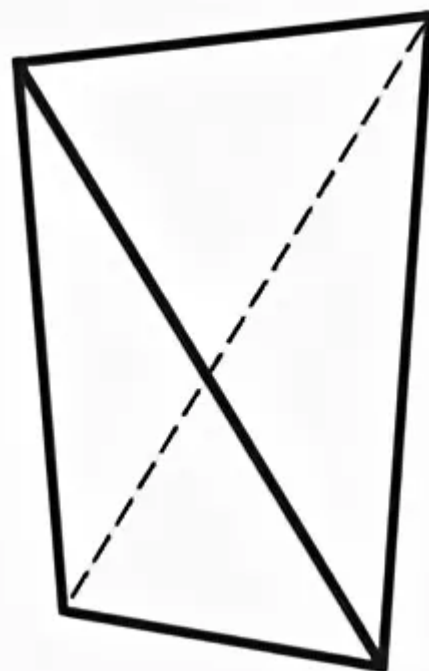
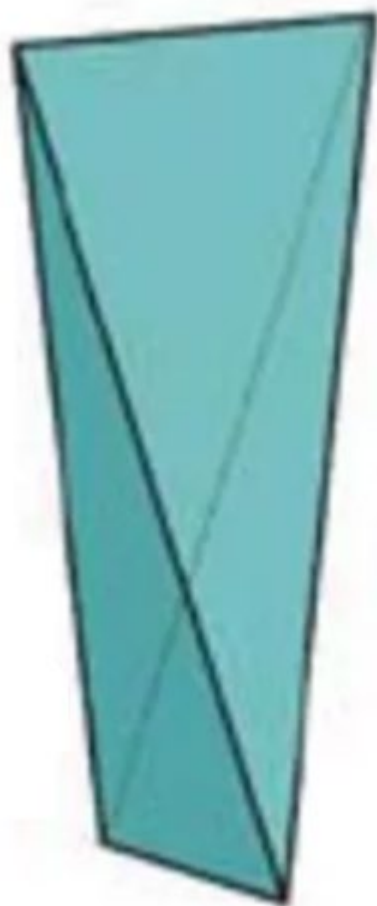


$\overline{4}$

S_4

Тетраэдр

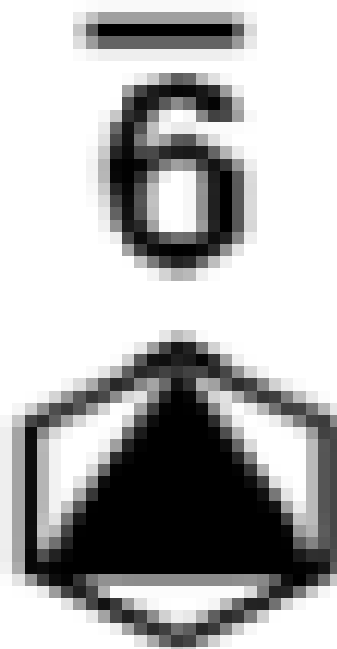
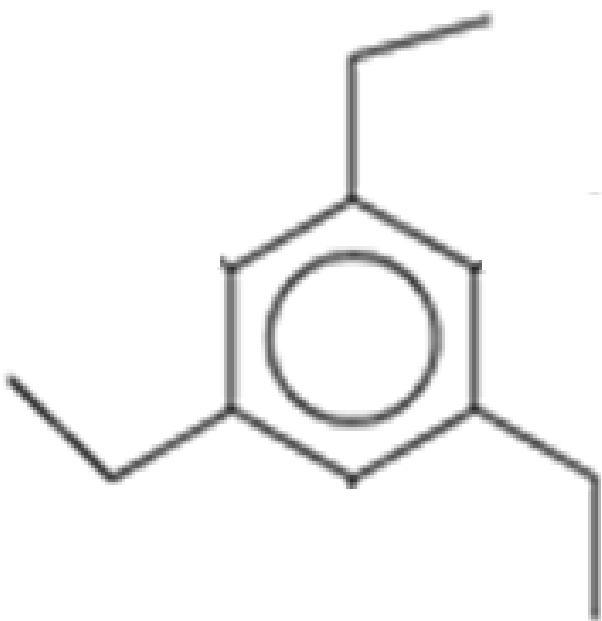




**ТЕТРАГОНАЛЬНЫЙ
ТЕТРАЭДР**

$\overline{6}$

S_3



Как распознать ось $\bar{N}$?

Нечетная ($\bar{3}, \bar{5}, \bar{7}, \dots$)

$N=2k+1$: поворотная ось N + центр $\bar{1}$

Условия необходимые и достаточные

Четная, не кратная 4 ($\bar{6}$ и т.д.)

$N=4k+2$: поворотная ось $N/2$ + перпендикулярная плоскость m

Условия необходимые и достаточные

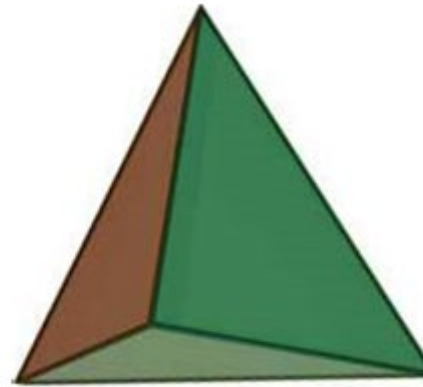
Четная, кратная 4 ($\bar{4}, \bar{8}$ и т.д.)

$N=4k$: ТОЛЬКО поворотная ось $N/2$;

НЕТ плоскости m и центра $\bar{1}$

Условия необходимые, но не достаточные

Поворот с инверсией ($\bar{N}$) и зеркальный поворот (S_n)

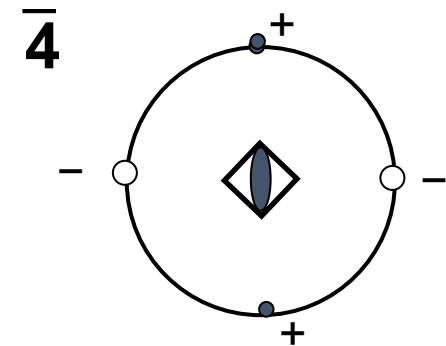
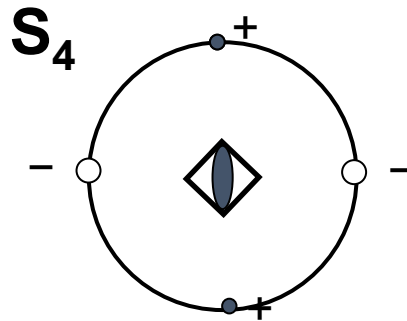


Тетраэдр

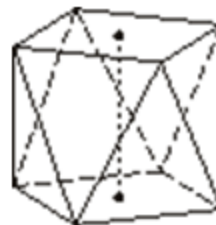
$$N = 4k:$$

$$n = N$$

нет ни m ,
ни $\bar{1}$



вершины
антипризмы
с поворотной
осью
четного
порядка



Тетрагональная антипризма
 $\bar{8} S_8$

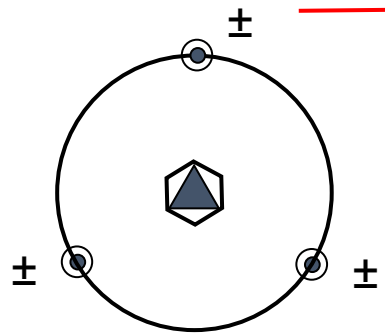
Поворот с инверсией ($\bar{N}$) и зеркальный поворот (S_n)

$$N=4k+2:$$

$$N = n / 2$$

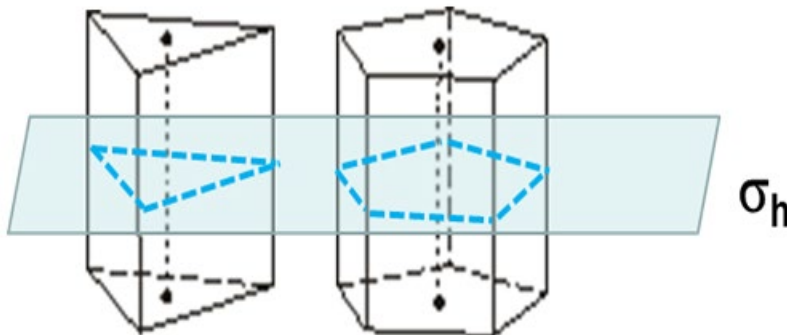
есть плоскость m

S_3



$$\bar{6}=3/m$$

вершины
призмы,
в основании
которой
правильный
многоугольник
с нечетным
числом сторон



Поворот с инверсией ($\bar{N}$) и зеркальный поворот (S_n)

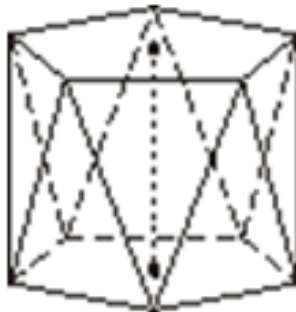
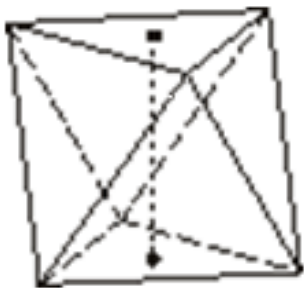
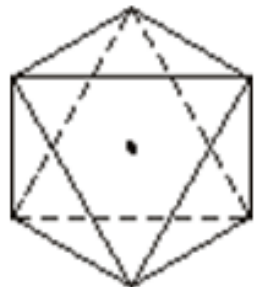
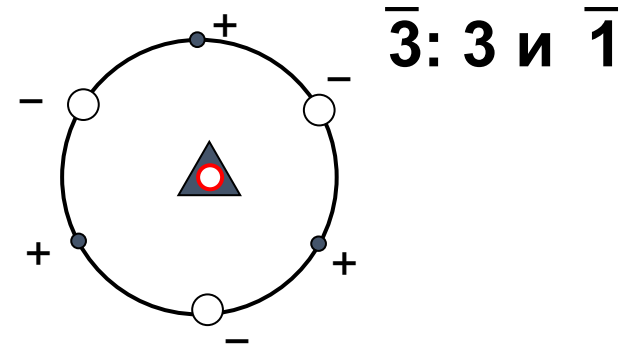
$N=2k+1$:

$n = 2N$

есть $\bar{1}$

(центр инверсии)

S_6



вершины
антипризмы
с поворотной
осью
нечетного
порядка

Ось высшего порядка – ось порядка $n > 2$

Категории симметрии

1. *Низшая категория:*

нет осей порядка высшего порядка

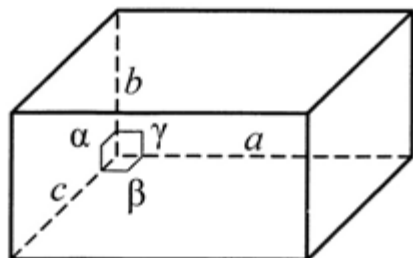
2. *Средняя категория:*

одна ось высшего порядка

3. *Высшая категория:*

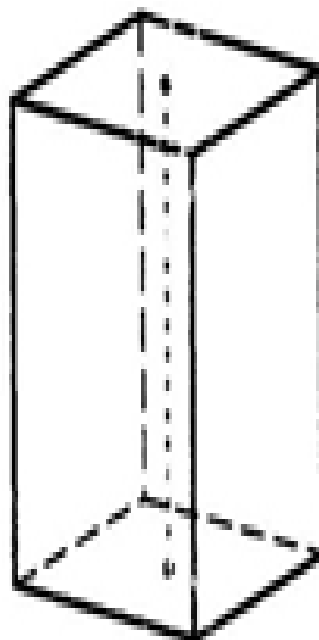
БОЛЬШЕ ОДНОЙ оси высшего порядка

прямоугольный
ПАРАЛЛЕЛЕПИПЕД



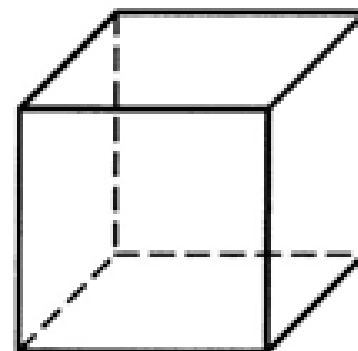
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

ТЕТРАГОНАЛЬНАЯ
ПРИЗМА



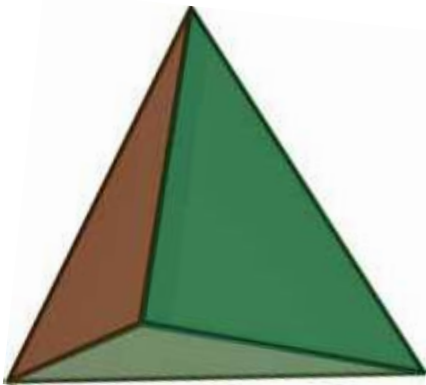
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

КУБ

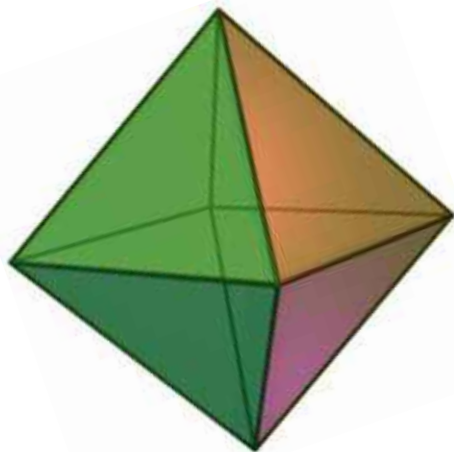


$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

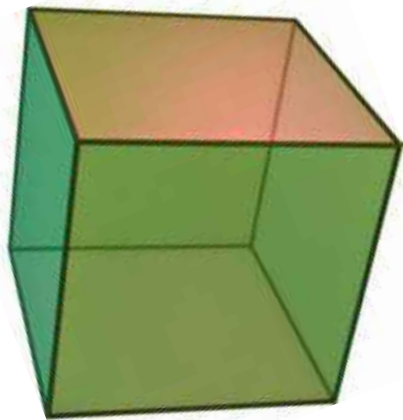
Платоновы тела: правильные полиэдры высшей категории



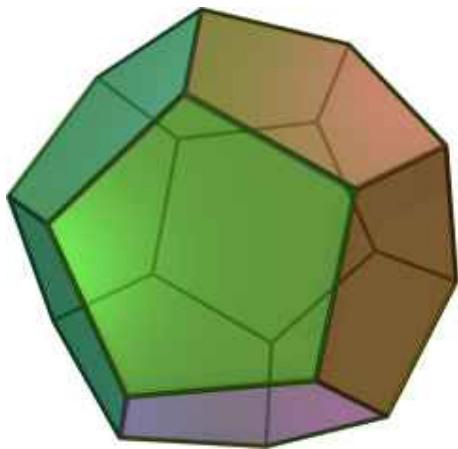
тетраэдр



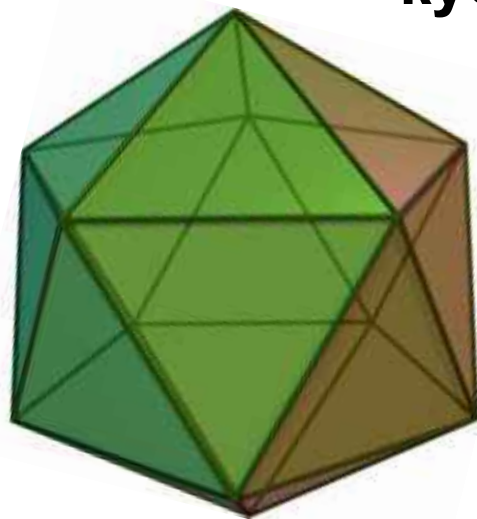
октаэдр



куб



пентагон-додекаэдр



икосаэдр