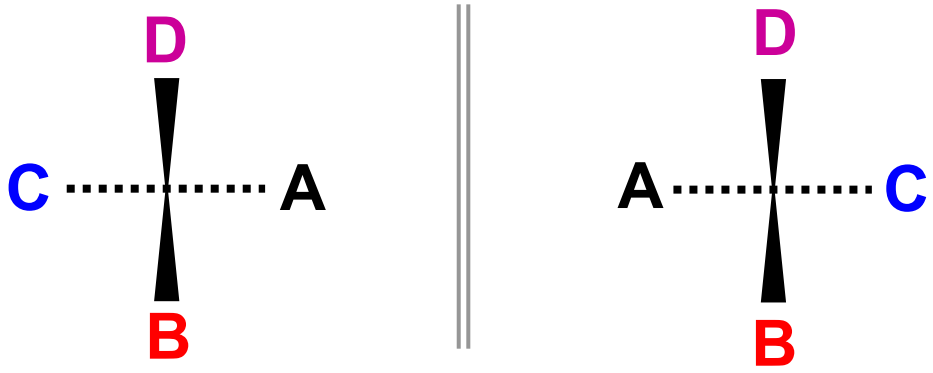
Лекция 3
Точечные группы (продолжение).

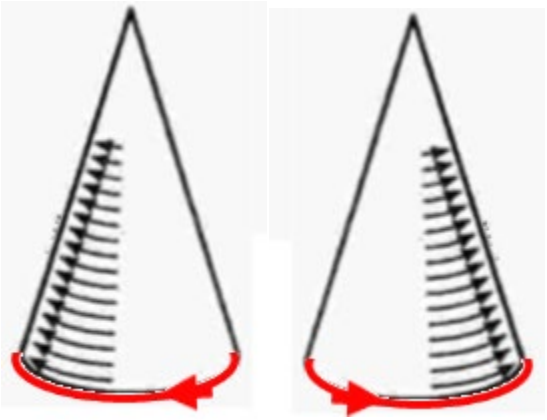
Система Шенфлиса. Полярность. Хиральность.

Орбиты точечных групп

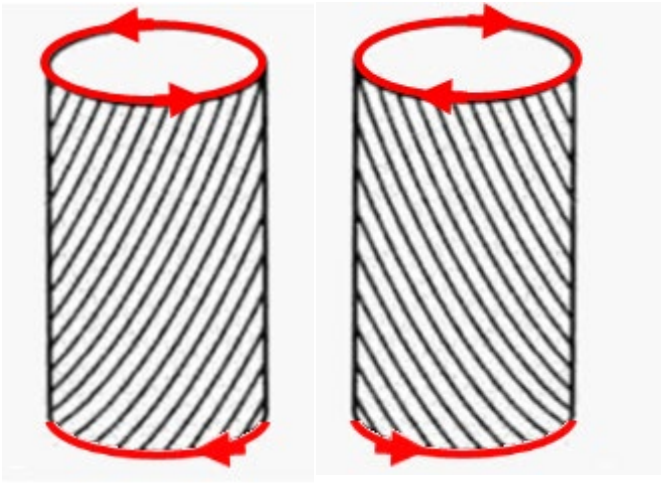
ХИРАЛЬНОСТЬ

Хиральная фигура существует в виде «левой» и «правой» форм, которые нельзя совместить в трехмерном пространстве



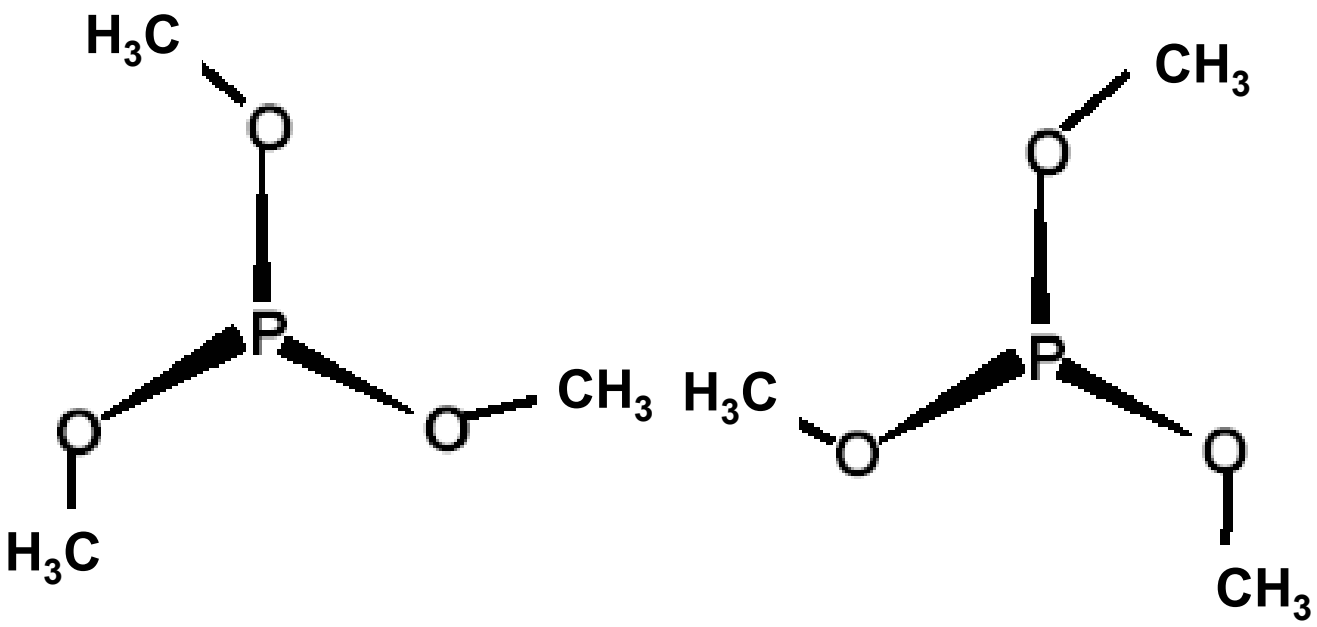


Семейство вращающегося конуса



Семейство скрученного цилиндра

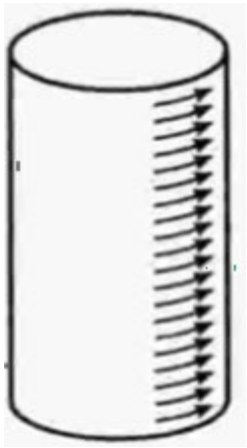
Хиральными будут те фигуры, у которой из всех элементов симметрии есть только поворотные оси (собственное вращение).



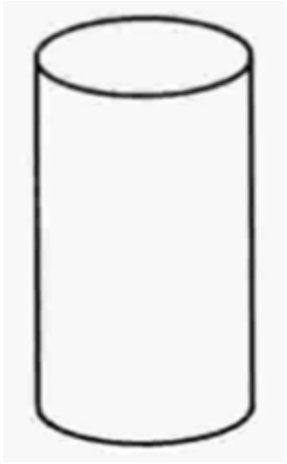
пример: молекула $P(OCH_3)_3$



Семейство неподвижного конуса



Семейство вращающегося цилиндра



Семейство неподвижного цилиндра

Трехмерная фигура (конечная или бесконечная), у которой есть элементы **не**собственного вращения, будет **не**хиральна (**ахиральна**).

Точечные группы симметрии низшей и средней категории

I. Семейство групп вида n			
1	3	5	…
2	4	6	…
II. Семейство групп вида $n2$ или $n22$			
2	32	52	…
222	422	622	…
III. Семейство групп вида nm или nmm			
m	$3m$	$5m$	…
$2mm$	$4mm$	$6mm$	…

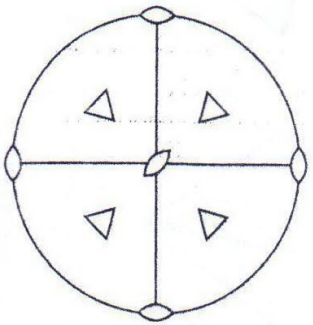
IV. Семейство групп вида $\bar{n}$ или n/m			
$\bar{1}$	$\bar{3}$	$\bar{5}$ …	$\bar{4}$ $\bar{8}$ …
$(\bar{2})$	$\bar{6}$ …	$2/m$ $4/m$ …	
V. Семейство групп вида $\bar{n}m$, $\bar{n}m2$, $\bar{n}2m$, или n/mmm			
$(\bar{1}m)$	$\bar{3}m$ …	$\bar{4}2m$ …	
$(\bar{2}m2)$	$\bar{6}m2$ …	mmm $4/mmm$ …	

Примечание. Некоторые группы, стоящие в началах рядов, повторяются (в различных проекциях). Обычно не употребляемые варианты обозначений групп заключены в скобки. Вместо символа $\bar{2}$ используется обозначение m, вместо $\bar{1}$m – 2/m, вместо $\bar{2}$m2 – mm2.

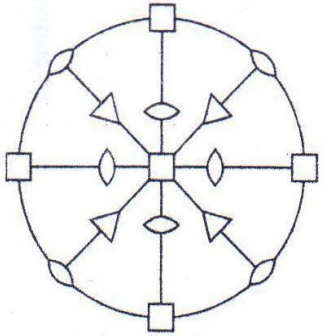
Точечные группы симметрии высшей категории

Семейство VI (хиральные группы)

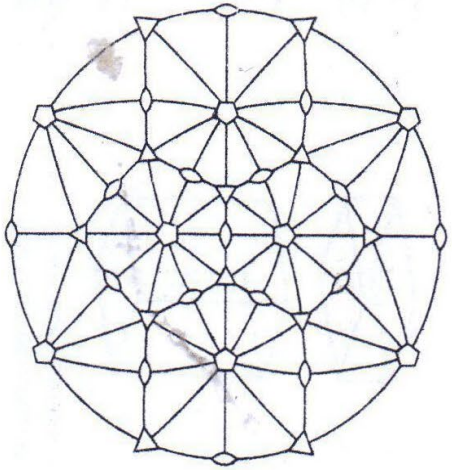
23



432

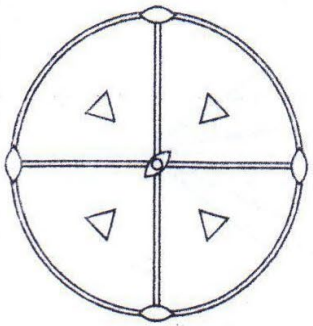


235

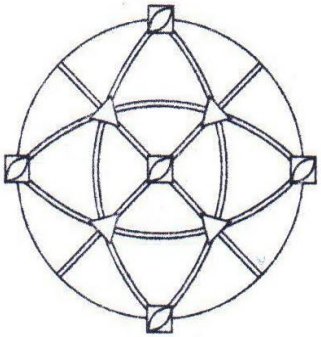


Семейство VII (ахиральные группы)

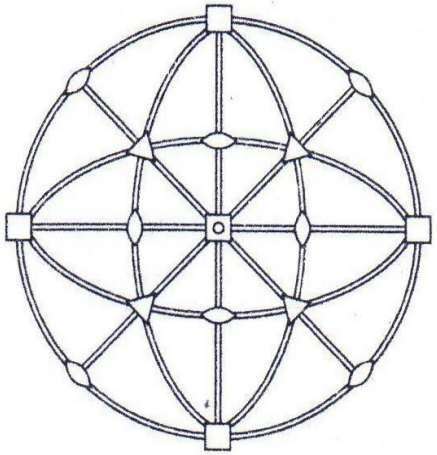
$m\bar{3}$



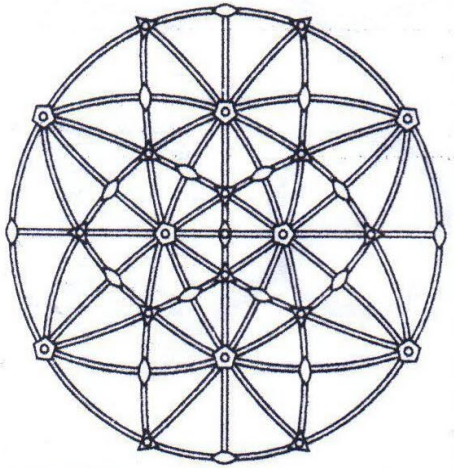
$\bar{4}3m$



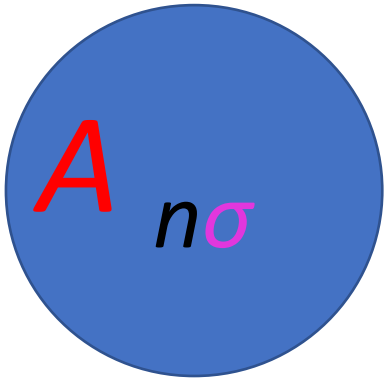
$m\bar{3}m$



$m\bar{3}\bar{5}$



СИМВОЛЫ ШЕНФЛИСА



n – порядок главной поворотной оси

C *– одна поворотная ось*

S *– только зеркально-поворотная ось*

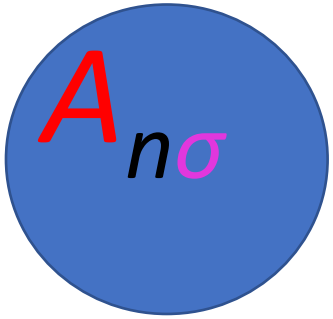
D *– есть побочные оси второго порядка*

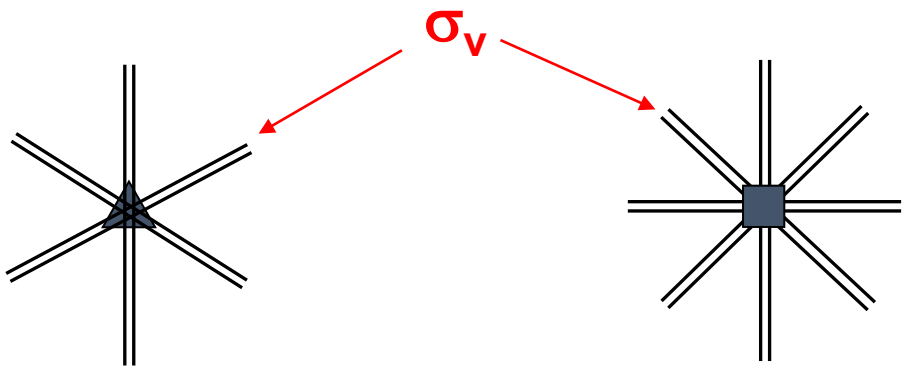
h –горизонтальная плоскость

v –вертикальные плоскости

d – вертикальные плоскости чередуются с осями второго порядка

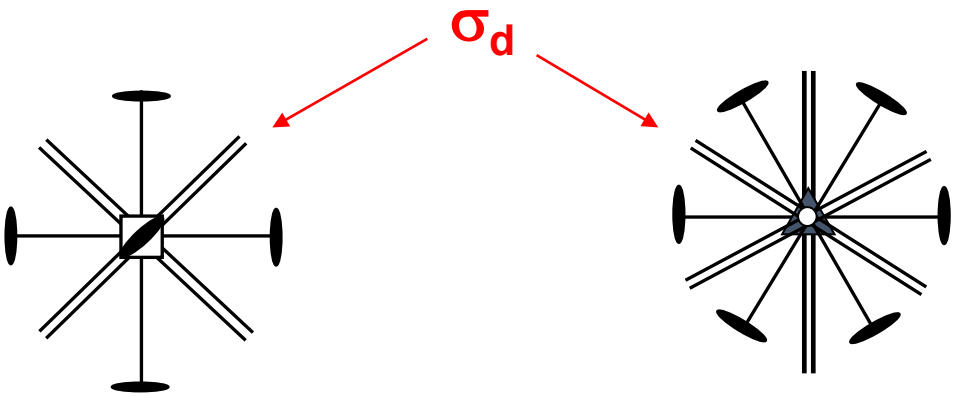
Положение плоскости по отношению к главной вертикальной оси:





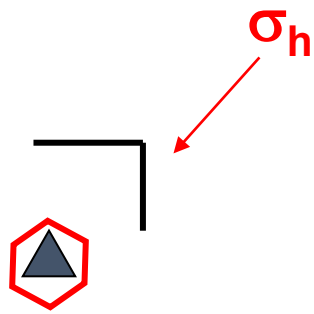
3m (C_{3v})

4mm (C_{4v})



$\bar{4}$2m (D_{2d})

$\bar{3}$m (D_{3d})



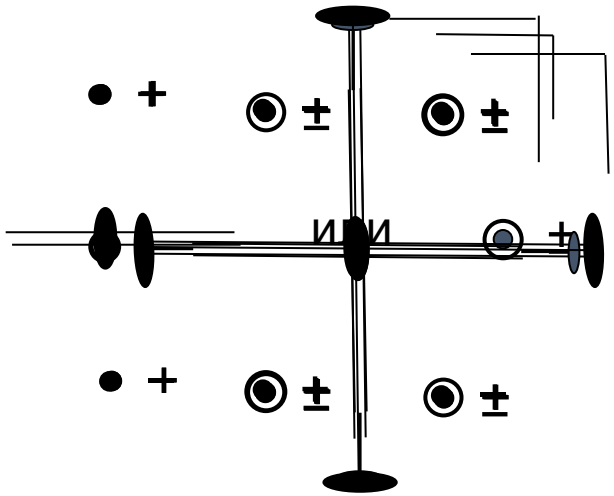
$\bar{6}$ (C_{3h})

Точечные группы низшей категории

x y z

$\bar{1}$ 1 по Г. – М.

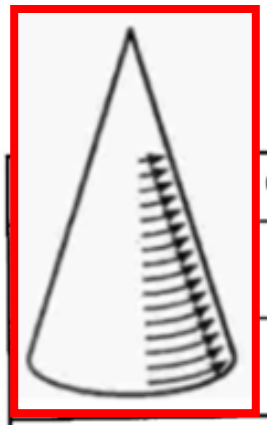
C_i C_1 по Ш.



7 нетривиальных групп низшей категории

Система точек, связанных операциями симметрии группы: орбита. Были показаны общие орбиты групп.

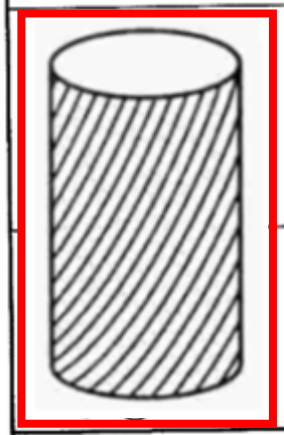
Точечные группы симметрии средней категории



Семейство групп вида n		
3 △	5 ⬠	…
4 □	6 ⬡	…

C_n

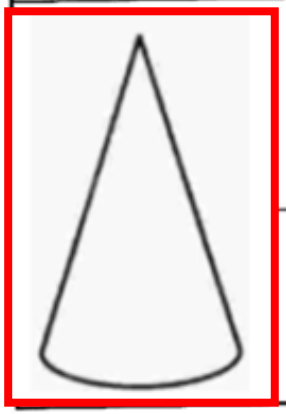
II. Семейство групп вида $n2$ или $n22$



32	52	…
422	622	…

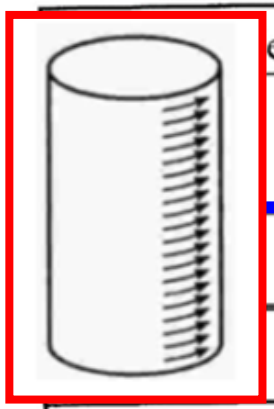
D_n

III. Семейство групп вида nm или nmm



$3m$	$5m$	…
$4mm$	$6mm$	…

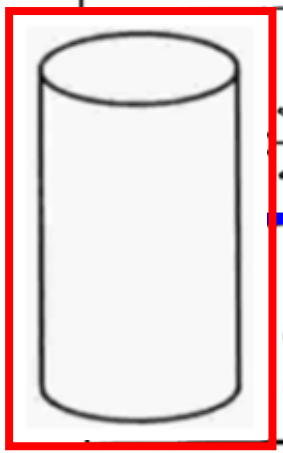
C_{nv}



Семейство групп вида $\bar{n}$ или n/m		
$\bar{5}$ ⬠	$\bar{4}$ ▨	$\bar{8}$ ⯃ …
$\bar{6}$ ⬡	$2/m$ ⌶	$4/m$ ⊡ …

S_n C_{nh}

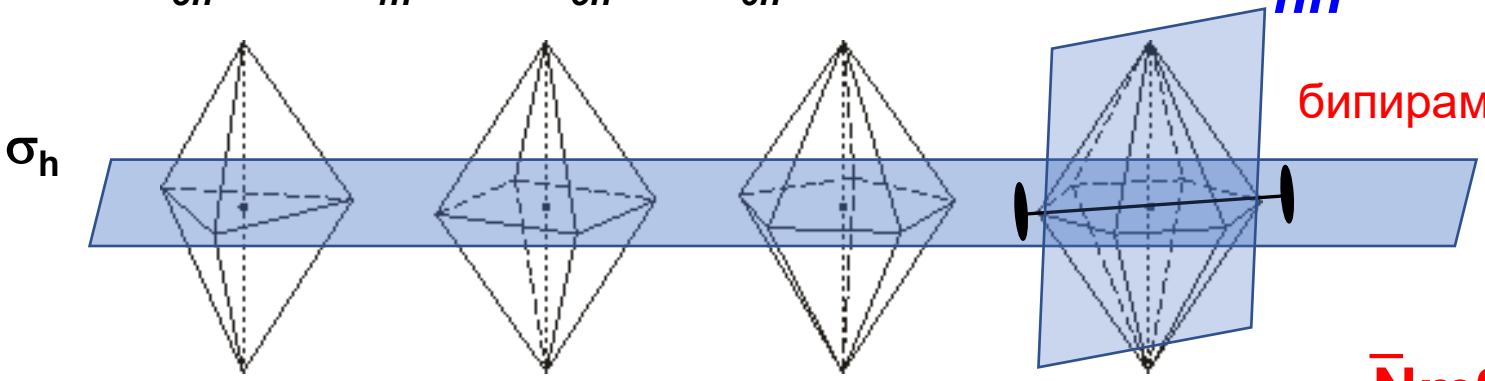
V. Семейство групп вида $\bar{n}m$, $\bar{n}m2$, $\bar{n}2m$, или n/mmm



$\bar{3}m$	$\bar{4}2m$	…
$\bar{6}m2$	mmm	$4/mmm$ …

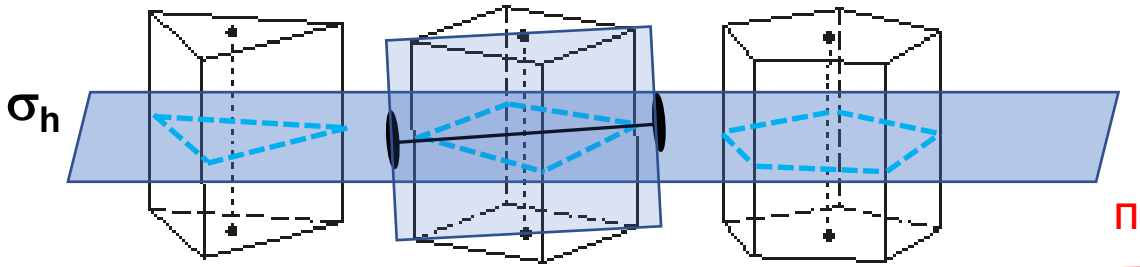
D_{nd} D_{nh}

D_{3h} D_{4h} D_{5h} D_{6h} семейство D_{nh}



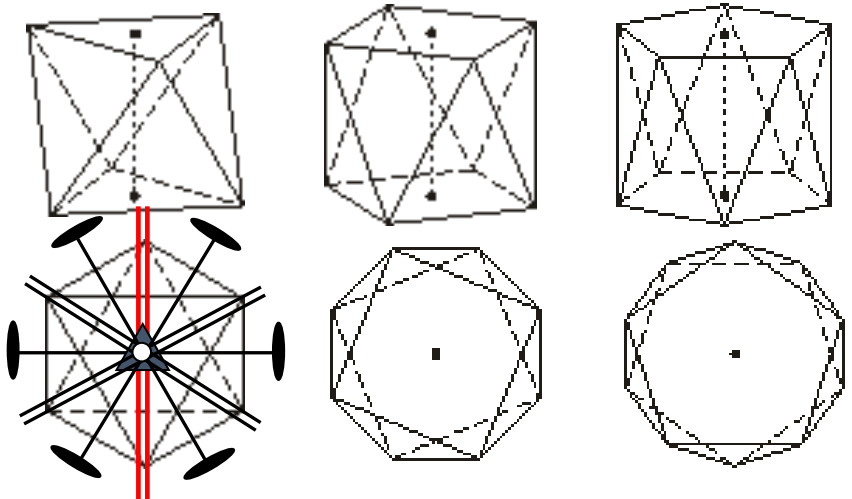
бипирамиды

$\bar{N}m2$, N/mmm



призмы

D_{3d} D_{4d} D_{5d} … семейство D_{nd}



антипризмы

$\bar{N}m$, $\bar{N}2m$

Порядок точечной группы



$$n \times A \times \sigma$$

n *– порядок главной поворотной оси*

C *– одна поворотная ось* ***x 1***

S *– только зеркально-поворотная ось* ***x 1***

D *– есть побочные оси второго порядка* ***x2***

h –горизонтальная плоскость ***x2***

v –вертикальные плоскости ***x2***

d – диагональные плоскости ***x2***

C_2 2 x 1 = 2

D_2 2 x 2 = 4

D_{2h} 2 x 2 x 2 = 8

НАБОР ЭЛЕМЕНТОВ В ГРУППАХ СРЕДНЕЙ КАТЕГОРИИ

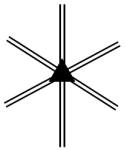
1. **C_n** одна поворотная ось C_n 

2. **S_n** одна «четная» ось S_n 

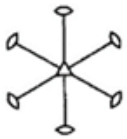


3. **C_{nh}** ось C_n + одна плоскость σ_h
(+ порожденные C_i или S_n)

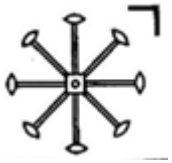




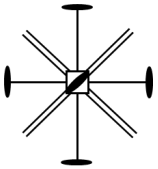
4. **C_{nv}** Ось C_n + n «вертикальных» плоскостей σ_v



5. **D_n** Ось C_n + n «горизонтальных» осей C_2



6. **D_{nh}** Ось C_n + n $C_2\perp$ + пл-сть σ_h (+ n пл-стей σ_v)



7. **D_{nd}** Ось C_n + n $C_2\perp$ + n «диагональных» σ_d

Группы высшей категории: 3 семейства

Семейство тетраэдра: T, T_h, T_d

Поворотные оси 2 порядка

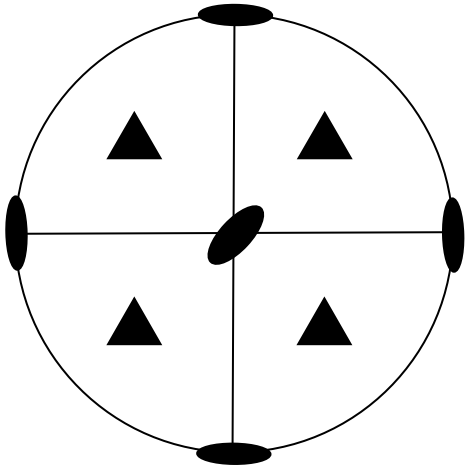
Семейство октаэдра: O, O_h

Поворотные оси 4 порядка

Семейство икосаэдра: I, I_h

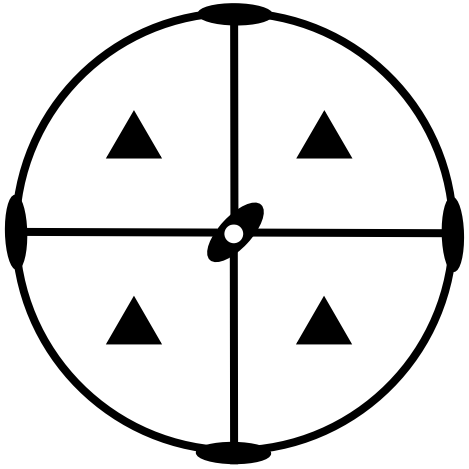
Поворотные оси 5 порядка

Семейство тетраэдра



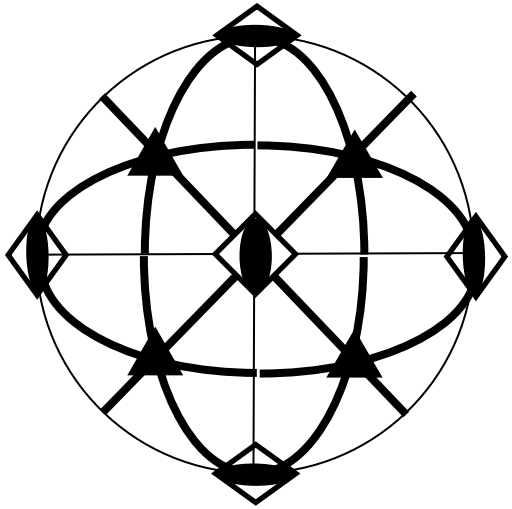
T *(23)*

группа поворотов тетраэдра ***T***



T_h *(m $\bar{3}$)*

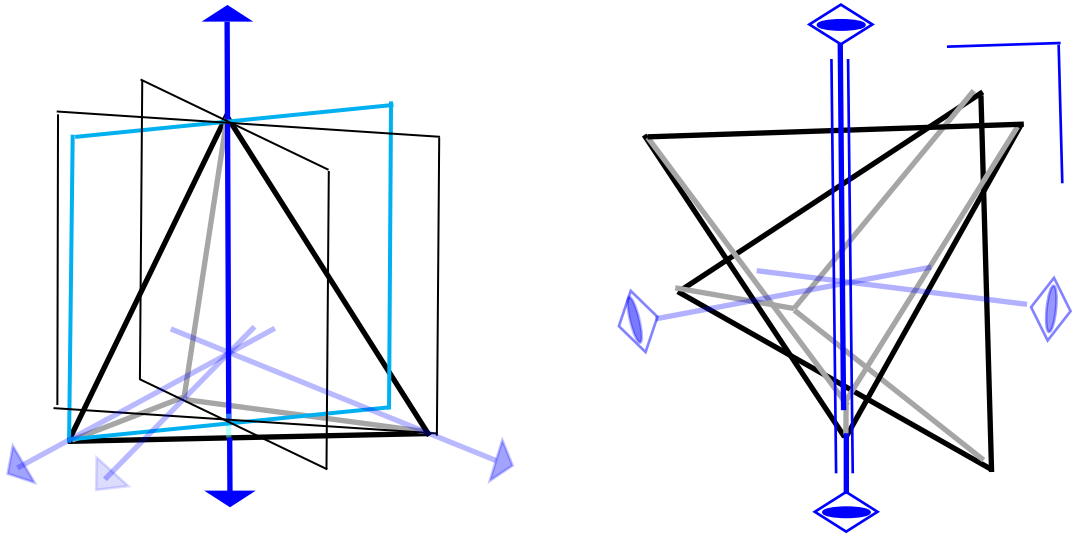
группа $T_h = T + i$



T_d *($\bar{4}$3m)*

группа симметрии тетраэдра T_d

Семейство тетраэдра



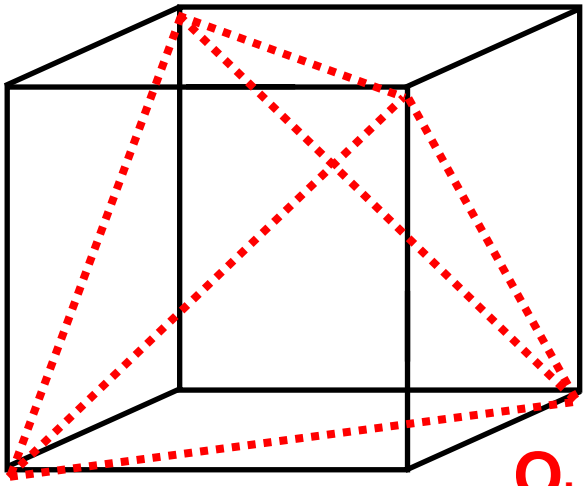
T_d (симметрия тетраэдра): четыре оси C_3, три оси $S_4 \supset C_2$, шесть плоскостей σ_d; НЕТ ЦЕНТРА ***i***, порядок = 24

T (все повороты тетраэдра): четыре оси C_3, три оси C_2, порядок = 12, ***хиральные фигуры***

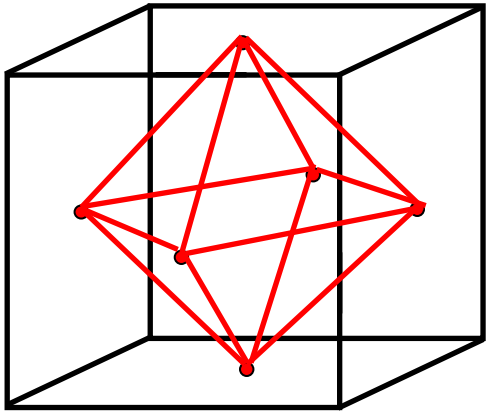
T_h: операции группы T + центр инверсии ***i*** , порядок = 24

$$T \subset T_d \; и \; T \subset T_h, \; T_d \cap T_h = T$$

Семейство октаэдра O (432) и O_h ($m\ \bar{3}\ m$)

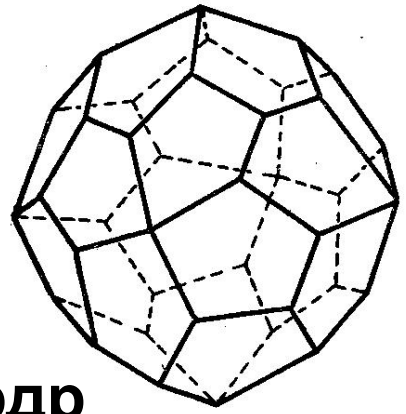


$O_h \supset T_d$



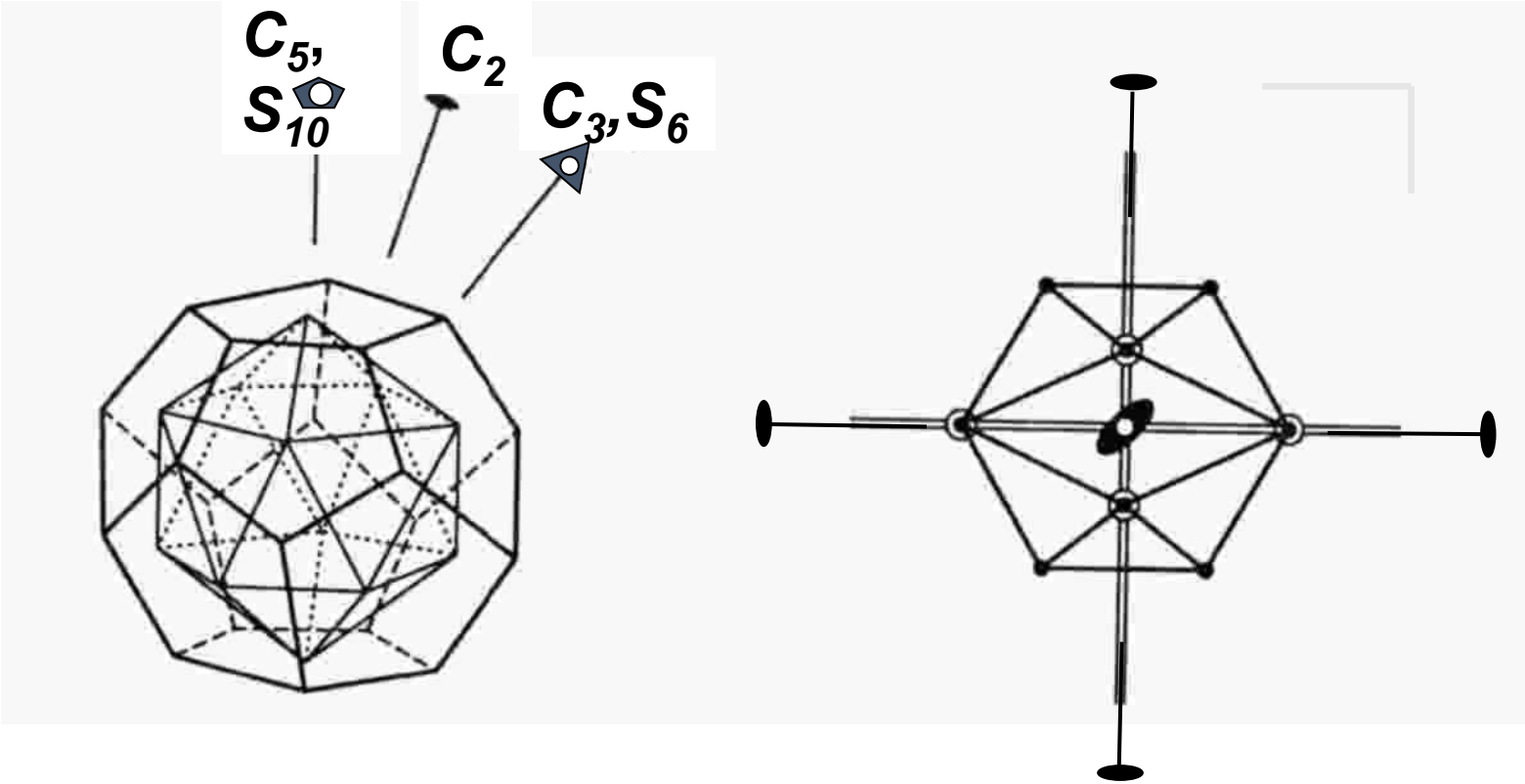
O_h: симметрия куба и октаэдра три оси C_4, четыре оси C_3 (S_6), шесть осей C_2, девять плоскостей σ, центр инверсии i;
порядок = 48

O: повороты куба и октаэдра
порядок = 24, хиральные фигуры,
$O_h \supset O$



пентагонтриоктаэдр

Семейство икосаэдра $I\ (2\ 3\ 5)$ и $I_h\ (m\ \bar{3}\ \bar{5})$

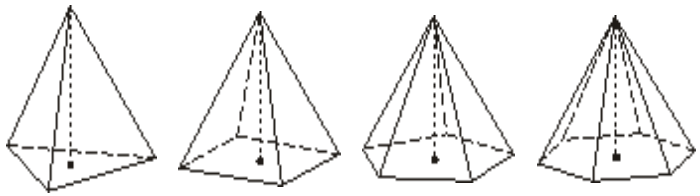


I_h: симметрия икосаэдра и пентагондодекаэдра
шесть осей C_5 (S_{10}), 10 осей C_3 (S_6), 15 осей C_2,
15 плоскостей σ, центр инверсии i; порядок = 120

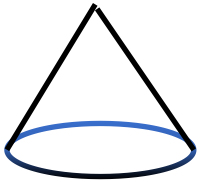
I: повороты икосаэдра и пентагондодекаэдра
порядок = 60, хиральные фигуры, $I_h \supset I$

«Пределы» в рядах полиэдров и предельные группы (группы Кюри)

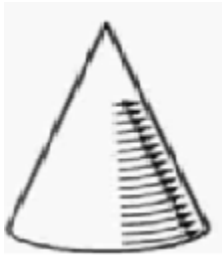
$n \to \infty$



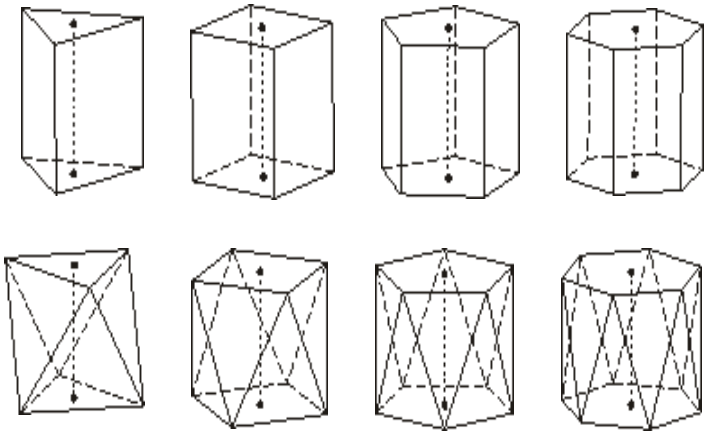
$C_{nv} \to$



$C_{\infty v}$

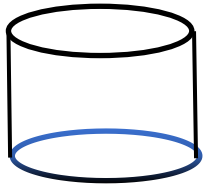


C_∞

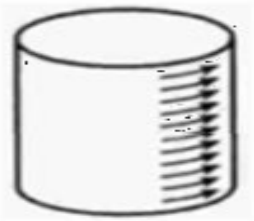


$D_{nh} \to$

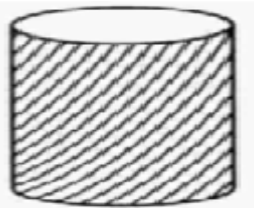
$D_{nd} \to$



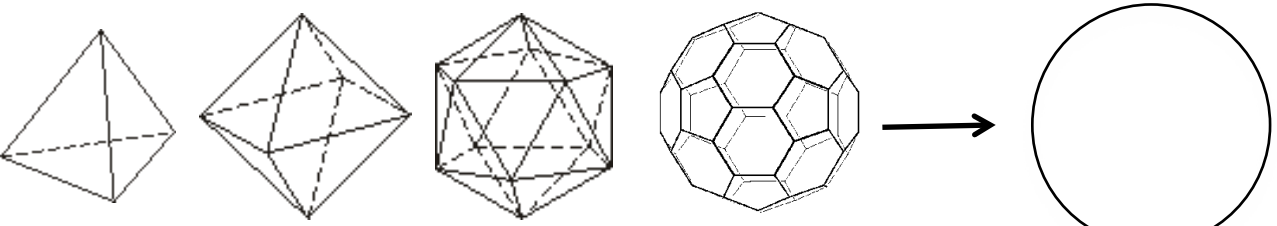
$D_{\infty h}$



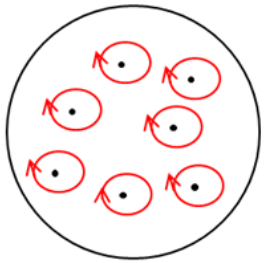
S_∞



D_∞



T_d O_h I_h I_h K_h



K

Точечные группы (по Шенфлису)

1 *тривиальная* группа низшей категории C_1

7 *нетривиальных* групп низшей категории

C_2, C_s, C_i, C_{2h}, C_{2v}, D_2, D_{2h}

7 *семейств* групп средней категории

C_n, S_n (n=2k), C_{nh}, C_{nv}, D_n, D_{nd}, D_{nh}

7 *конечных* групп высшей категории

T, T_h, T_d, O, O_h, I, I_h

7 *предельных* групп средней и высшей категории

C_∞, $S_\infty(=C_{\infty h})$, $C_{\infty v}$, D_∞, $D_{\infty h}$, K, K_h

7 + 7 + 7 + 7 +1

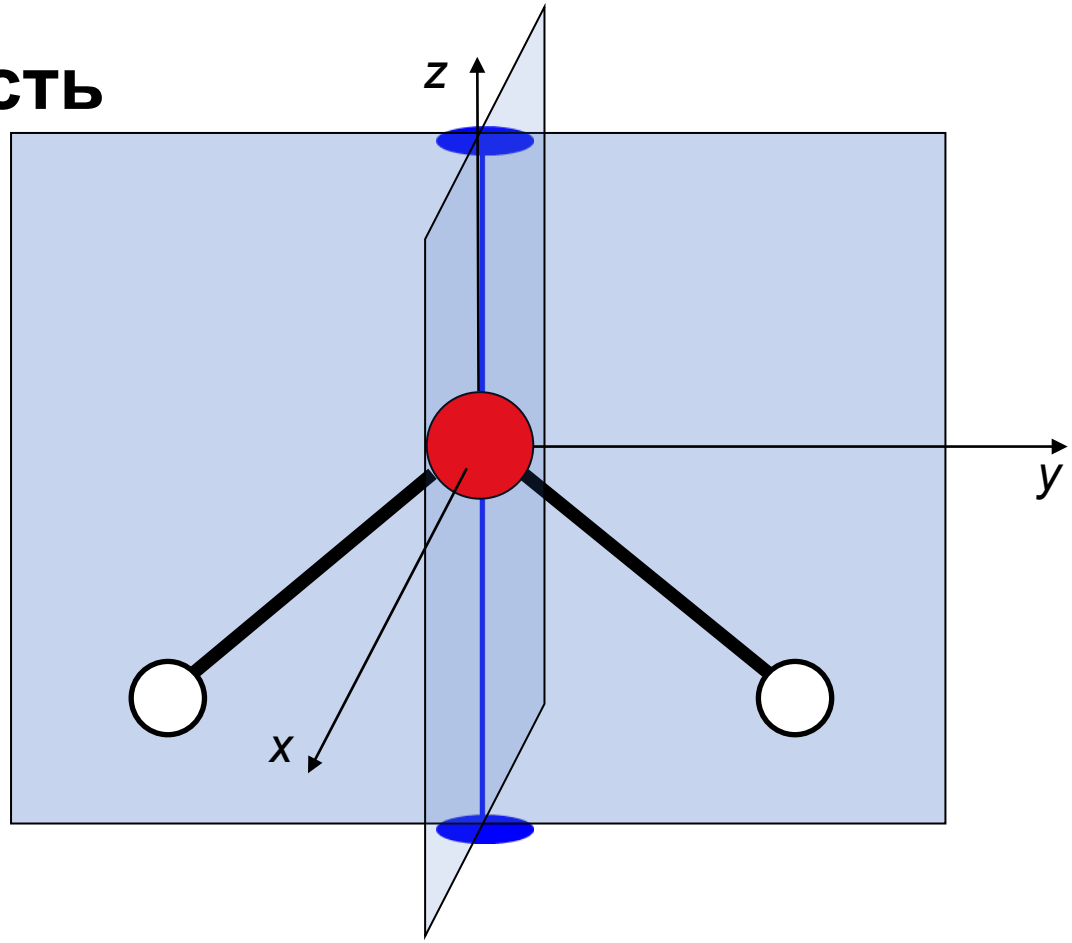
Число элементов в конечных точечных группах

C_2, C_s, C_i	C_{2h}, C_{2v}, D_2,	D_{2h}
2	**4**	**8**

C_n, S_n (n=2k)	C_{nh}, C_{nv}, D_n	D_{nd}, D_{nh}
n	**2 x n**	**4 x n**

T	T_h, T_d, O	O_h,	I	I_h
12	**24**	**48**	**60**	**120**

Группа: совокупность взаимосвязанных элементов



$\sigma_{yz}\,\sigma_{xz} = C_2^{(z)}$

Поворотная ось 2-го порядка

$C_{2v}\ \{\sigma_{xz},\ \sigma_{yz},\ C_2^{(z)},\ e\}$

Плоскости

Единичный элемент

Молекула H_2O

Группа C_{2v}:{e, σ_{xz}, σ_{yz}, $C_2^{(z)}$}



Группа C_2: {e, C_2}

Если в группе **G** есть такие операции симметрии,
которые сами образуют группу $\mathbf{G_1}$,
набор этих операций называется ***подгруппой***:
$\mathbf{G_1 \subset G}$

например, $C_2 \subset C_{2v}$

Группа C_{2v}: {e, σ_{xz}, σ_{yz}, $C_2^{(z)}$}



Группа C_2: {e, C_2}

Теорема Лагранжа для конечных групп

Порядок подгруппы является делителем порядка группы

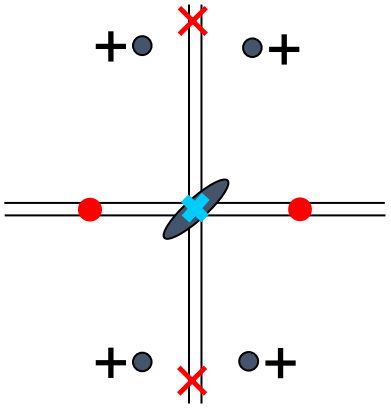
$$n = m \times r$$

n – порядок группы

r – порядок подгруппы

m – целое число (индекс подгруппы)

Совокупность точек, связанных операциями симметрии группы G, называется ***системой эквивалентных позиций***, или ***орбитой*** группы G. Каждая конечная группа имеет несколько разных орбит. Всякая орбита является подгруппой, но не всякая подгруппа будет орбитой.



C_{2v} (mm2)

симметрия положения G_1	кратность позиции
C_1 (1)	4
C_s (m)	2
C_s (m)	2
C_{2v} (mm2)	1

$$\textbf{кратность орбиты} = \frac{\textbf{порядок группы G}}{\textbf{порядок группы } G_1}$$

Полярность - наличие дипольного момента

С точки зрения симметрии это означает, что в объекте существует направление, которое:

1) *не размножается элементами симметрии (является единичным направлением);*
2) *Отсутствуют элементы симметрии, которые переводят противоположение концы этого направления друг в друга.*