

Teorie grup a molekuly

Lenka Matěchová

26.5.2010

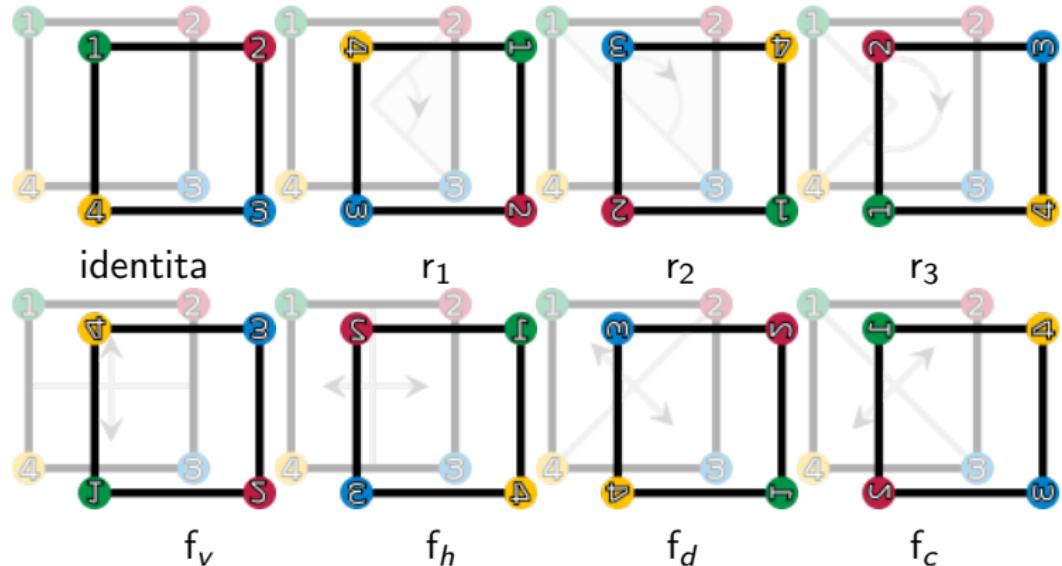
Grupa

- ▶ Množina spolu s operací
- ▶ 4 axiomy:
 - ▶ uzavřenosť
 - ▶ asociativita $a + (b + c) = (a + b) + c$
 - ▶ existence neutrálního prvku $a + 0 = 0 + a = a$
 - ▶ existence inverzních prvků $a + b = b + a = 0$

Cayleyho tabulka

x	i	a	b
i	i	a	b
a	a	a^2	ab
b	b	ba	b^2

Čtverec pro ilustraci



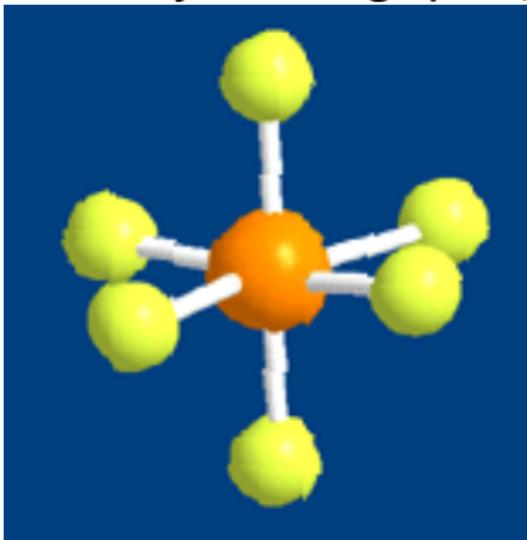
Čtverec pro ilustraci

•	id	r₁	r₂	r₃	f_v	f_h	f_d	f_c
id	id	r ₁	r ₂	r ₃	f _v	f _h	f _d	f _c
r₁	r ₁	r ₂	r ₃	id	f _c	f _d	f _v	f _h
r₂	r ₂	r ₃	id	r ₁	f _h	f _v	f _c	f _d
r₃	r ₃	id	r ₁	r ₂	f _d	f _c	f _h	f _v
f_v	f _v	f _d	f _h	f _c	id	r ₂	r ₁	r ₃
f_h	f _h	f _c	f _v	f _d	r ₂	id	r ₃	r ₁
f_d	f _d	f _h	f _c	f _v	r ₃	r ₁	id	r ₂
f_c	f _c	f _v	f _d	f _h	r ₁	r ₃	r ₂	id

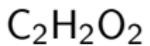
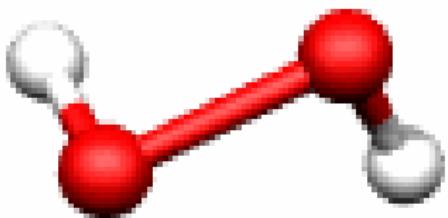
- ▶ Důkaz, že nelze nalézt obecný vzorec pro kořeny rovnice pátého stupně
- ▶ Krystalografie – popis krystalových mřížek
- ▶ Symetrie molekul
- ▶ Vibrace molekul
- ▶ Základ pro ještě abstraktnější matematické i fyzikální teorie

- ▶ *Písmeno O:* Symetrie osmistěnu/krychle
- ▶ *Písmeno T:* Symetrie čtyřstěnu, T_d s nevlastními operacemi, T_h s inverzí
- ▶ *C_n – cyklické grupy:* Otočení o úhel $\frac{2\pi}{n}$, C_{nh} s rovinou zrcadlení kolmou na osu rotace, C_{nv} s rovinou zrcadlení rovnoběžnou s osou rotace, pouze jedna n -četná osa rotace
- ▶ *S_n :* Pouze nevlastní rotace o $\frac{2\pi}{n}$, tzn. rotace a zrcadlení
- ▶ *D_n – diedrické grupy:* Rotační osa n -tého řádu a n os 2. řádu. D_{nh} a D_{nv} obdobně jako u cyklických grup

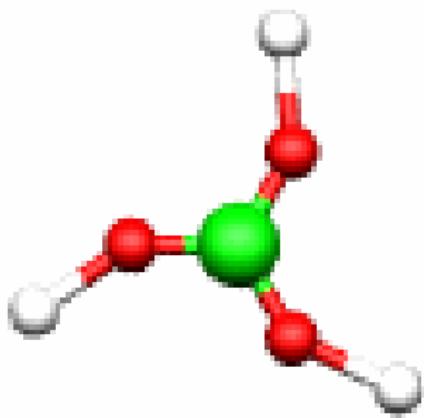
Kubická symetrie – grupa O_h



Monoklinická soustava – grupa C₂

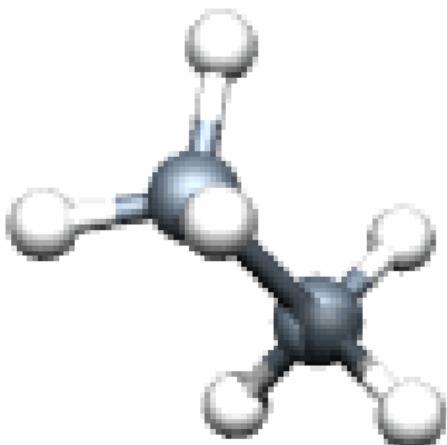


Šestiúhelníková soustava – grupa C_{3h}



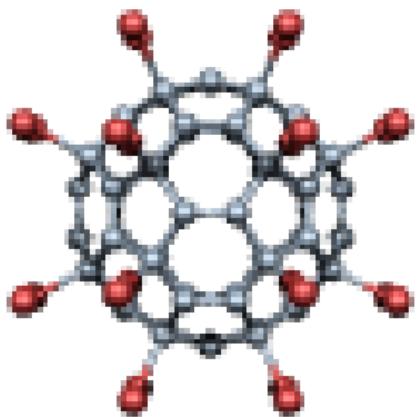
kyselina boritá

Šestiúhelníková soustava – grupa D_{3h}



etan

Kubická symetrie – grupa T_h



Co grupy ovlivňují u krystalů

- ▶ Stáčení roviny polarizace světla
- ▶ Piezoelektrické vlastnosti – pouze u krystalů z grup s polární osou a bez středu symetrie
- ▶ V mineralogii zařazení do soustavy (např. monoklinická, triklinická, rombická)

en.wikipedia.org

<http://www.staff.ncl.ac.uk/j.p.goss/symmetry/>

Litzman O., Sekanina M.: Užití grup ve fyzice