KLASIFIKACE BODOVÝCH GRUP

- konečné podgrupy $O(3)$ [a také $ISO(3)$] - grupy rotací a nevlastních rotací s pevným počátkem

  NB: • zrcadlení a inverze jsou speciální nevlastní rotace: $\sigma = S_1$, $i = S_2$

- transformace zachovávající vzdálenost 2 bodů v prostoru a počátkem jako pevným bodem

PRVKY SYMETRIE

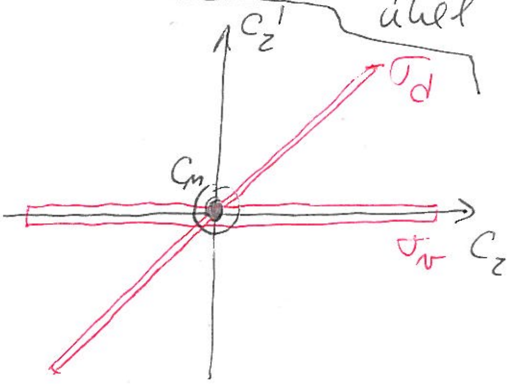
- osa otáčení C_n ... otočení o $\varphi = \frac{2\pi}{n}$ převede ekvivalentní body na sebe

  - hlavní osa - význačná osa otáčení s nejvyšším n

- rovina zrcadlení σ
  - σ_h ... rovina kolmá na hlavní osu C_n
  - σ_v ... rovina rovnoběžná s C_n (C_n v ní leží)
  - pokud existují $C_2 \perp C_n$ (kterých potom musí být nutně více), potom:

    σ_v ... rovina $\parallel$ s C_n a jednou z os C_2

    σ_d ... (dihedrální) rovina $\parallel$ s C_n a půlící úhel mezi dvěma C_2



• <u>nevlastní osa otáčení</u> S_n

 - operací symetrie je otočení o $\frac{2\pi}{n}$ kolem dané osy a zrcadlení přes rovinu kolmou na osu

 („příslušné" C_n a σ_h nemusí jako samostatné prvky symetrie existovat)

• <u>bod inverze</u> i

 - vždy počátek (resp. geom. těžiště)

<u>NB:</u> $\forall\ \sigma, C_n, S_n$ musí také obsahovat počátek - pevný bod

---

<u>OPERACE SYMETRIE</u> - prvky příslušné bodové grupy

• stejné značení, např.

 - C_n^m je otočení kolem osy C_n o úhel $\frac{2\pi m}{n}$

 $(\Rightarrow C_n^n = E)$

• $i \equiv C_2\sigma_h = S_2$; $\sigma \equiv S_1$ $\Rightarrow$ lib. operaci lze klasifikovat jako C_n nebo S_n, zavádění i a σ jen pro přehlednost"

• $C_n^n = \sigma^2 = i^2 = E$; $S_n^n = \begin{cases} E & n \text{ sudé} \\ \sigma_h & n \text{ liché} \end{cases}$; $S_n^{2n} = E$

<u>Př:</u> $\boxed{C_{3h}}$ • prvky symetrie: $C_3 \parallel S_3, \sigma_h$

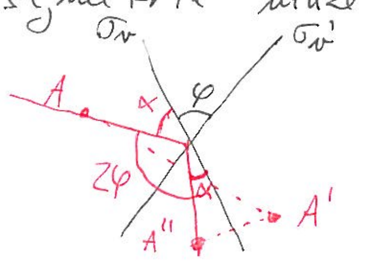
$C_3 \to C_3, C_3^2$; $\sigma_h \to \sigma_h$

$S_3 \to S_3, S_3^2 = C_3^2, S_3^3 = \sigma_h, S_3^4 = C_3, S_3^5$

$\Rightarrow \boxed{C_{3h} = \{E, C_3, C_3^2, \sigma_h, S_3, S_3^5\}}$

<u>NB:</u> • existence některých prvků symetrie může vynucovat $\exists$ jiných:

σ_v a σ_v' svírají úhel φ $\Rightarrow$



$\Rightarrow \sigma_v\sigma_v' = C(2\varphi)$

KLASIFIKACE GRUP

1, pouze n-násobná vlastní osa C_n $\Rightarrow$ grupa $\boxed{C_n}$

2, $C_n + n \times C_2 \perp C_n \Rightarrow$ grupa $\boxed{D_n}$ (dihedral)

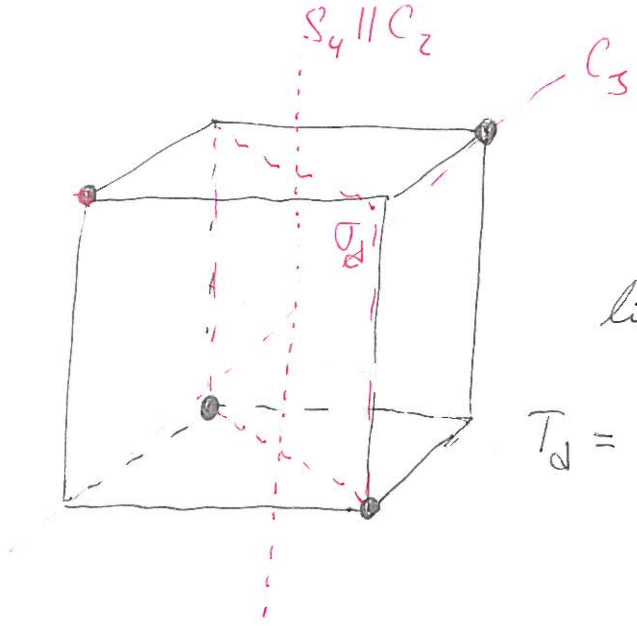
3, $C_n + \sigma_h \Rightarrow \boxed{C_{nh}}$ $\quad + n\, C_2 \perp C_n \Rightarrow \boxed{D_{nh}}$

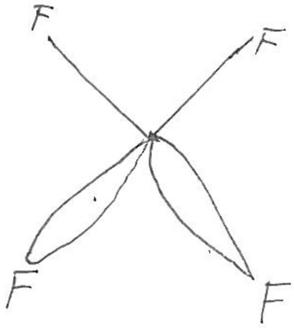
4, $C_n + \sigma_v = \boxed{C_{nv}}$ $\quad + n\, C_2 \perp C_n \Rightarrow \boxed{D_{nv}}$

5, $C_n + S_{2n} \parallel C_n \Rightarrow \boxed{S_{2n}}$ (S_{2n} nemůže $\exists$ bez C_n)

6, $C_n + i \Rightarrow$ $\boxed{\text{něco z výše uvedeného}}$ nebo $C_1 + i \Rightarrow C_i \sim C_s \sim S_2$

SiF_4 ... fluorid křemičitý





lin NE $\rightarrow 4\times C_3 \rightarrow$ inverze ne $\rightarrow T_d$

$$T_d = \{E,\ 4\times C_3,\ 4\times C_3^2,\ 3\times C_2,\ 4\times S_4,\ 4\times S_4^3,\ 6\times \sigma_d\}$$

Etan: C_2H_6

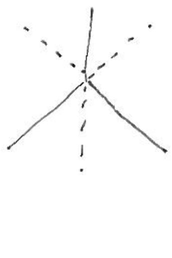
a, eclipsed

$\Rightarrow C_3 \rightarrow 3\times C_2 \perp C_3 \rightarrow \sigma_h \rightarrow \boxed{D_{3h}}$

$$D_{3h} = \{E,\ C_3,\ C_3^2,\ 3C_2,\ \sigma_h,\ S_3,\ S_3^5,\ 3\times\sigma_v\}$$

(12)

b, staggered

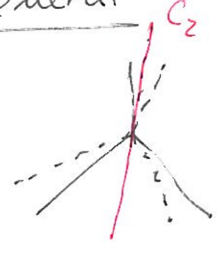


$\Rightarrow C_3 \rightarrow 3C_2 \perp C_3 \rightarrow \sigma_h$ ne $\rightarrow 3\sigma_d$ ano $\rightarrow \boxed{D_{3d}}$

$$D_{3d} = \{E,\ C_3,\ C_3^2,\ 3C_2,\ i,\ S_6,\ S_6^5,\ 3\sigma_d\}$$

(12)

c, general

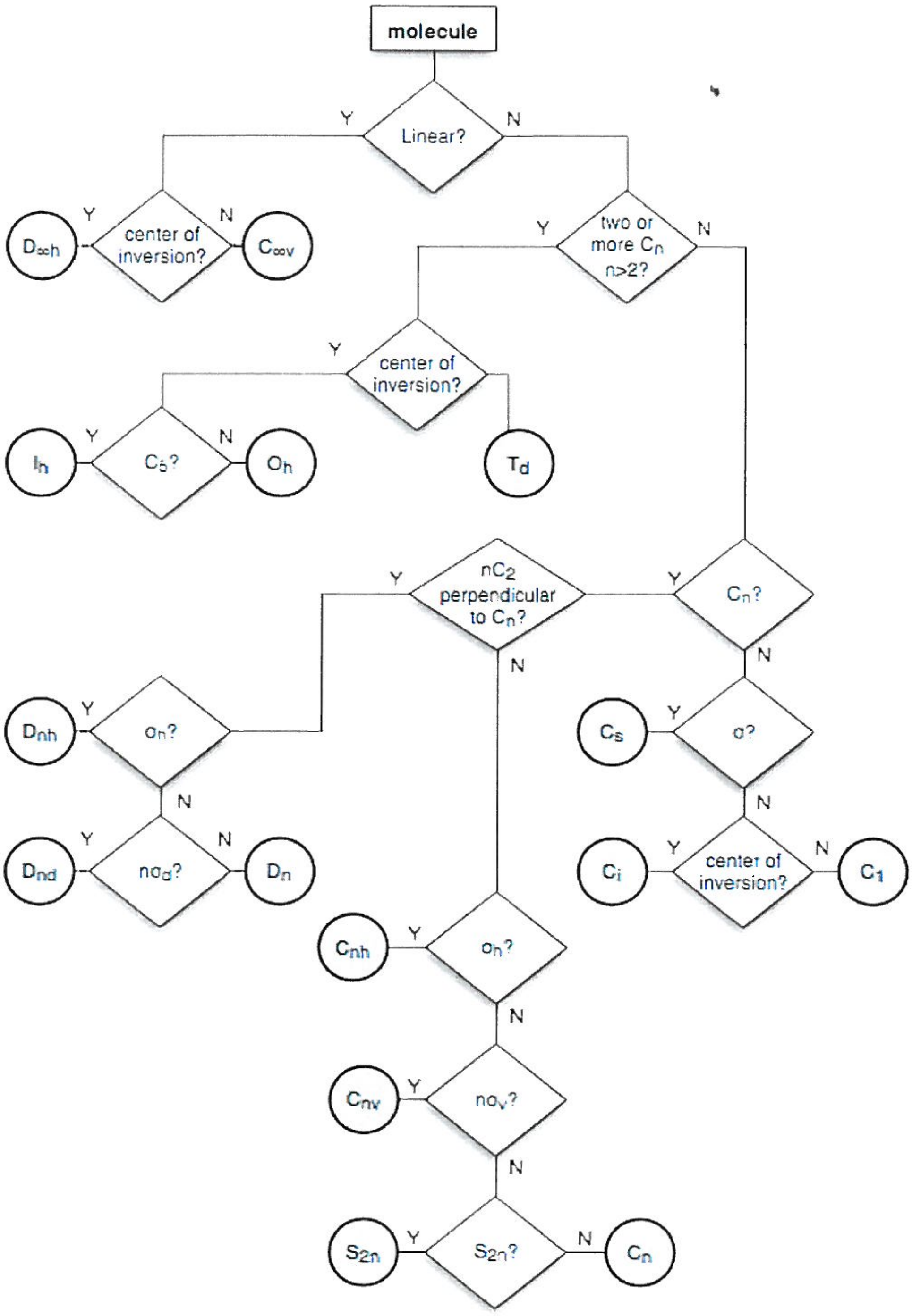


$\Rightarrow C_3 \rightarrow 3C_2 \perp C_3 \rightarrow \sigma_h$ ne, σ_d ne

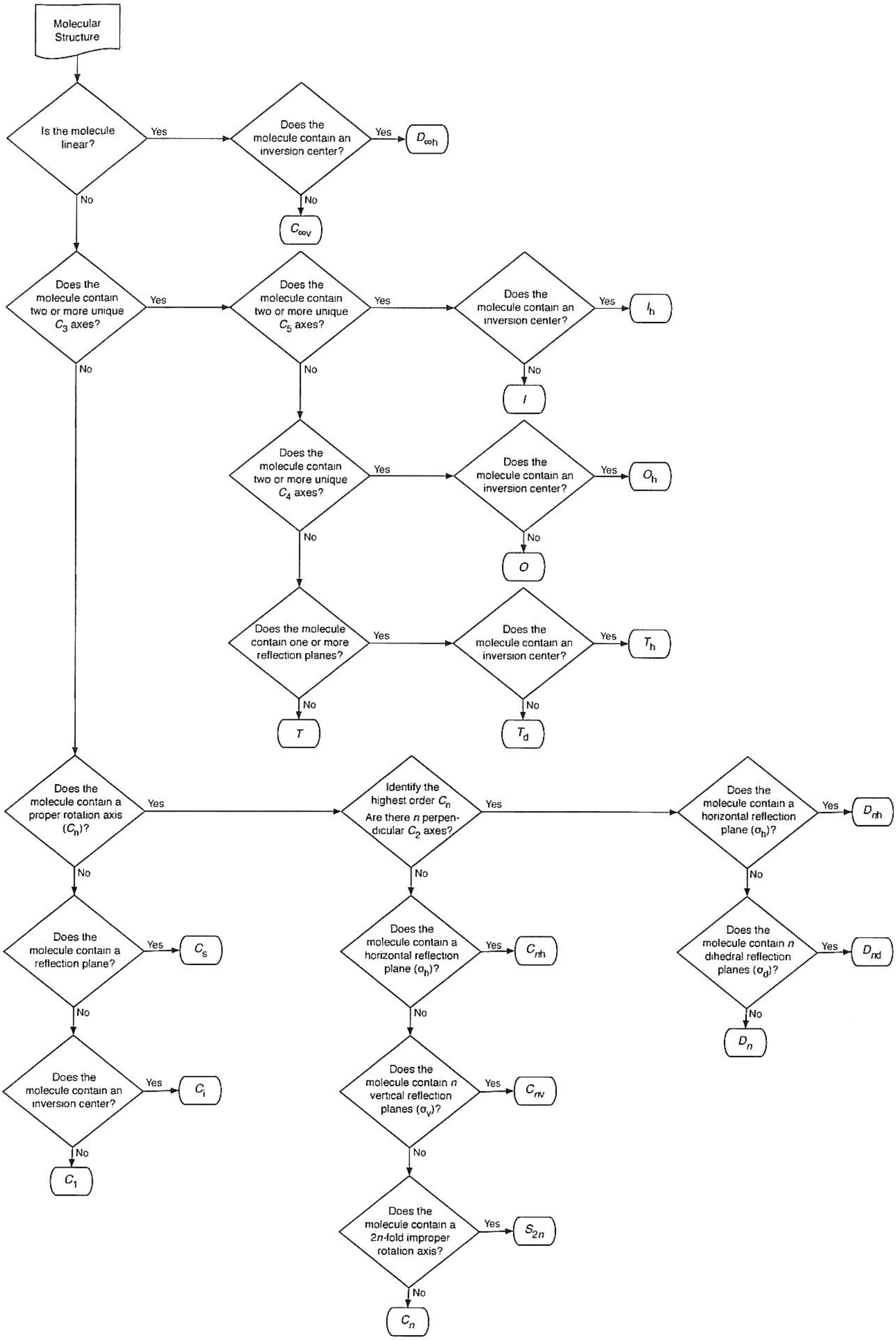
$\Rightarrow \boxed{D_3}$

$$D_3 = \{E,\ C_3,\ C_3^2,\ 3C_2\}$$

$D_3 \subset D_{3h},\ D_3 \subset D_{3d} \qquad D_{3h} \not\subset D_{3d}$



Flow chart for determining symmetry point groups


Molecular Structure
Is the molecule linear?
Yes
Does the molecule contain an inversion center?
Yes
$D_{\infty h}$
No
$C_{\infty v}$
No
Does the molecule contain two or more unique C_3 axes?
Yes
Does the molecule contain two or more unique C_5 axes?
Yes
Does the molecule contain an inversion center?
Yes
I_h
No
I
No
Does the molecule contain two or more unique C_4 axes?
Yes
Does the molecule contain an inversion center?
Yes
O_h
No
O
No
Does the molecule contain one or more reflection planes?
Yes
Does the molecule contain an inversion center?
Yes
T_h
No
T_d
No
T
No
Does the molecule contain a proper rotation axis (C_n)?
Yes
Identify the highest order C_n Are there n perpendicular C_2 axes?
Yes
Does the molecule contain a horizontal reflection plane (σ_h)?
Yes
D_{nh}
No
Does the molecule contain n dihedral reflection planes (σ_d)?
Yes
D_{nd}
No
D_n
No
Does the molecule contain a horizontal reflection plane (σ_h)?
Yes
C_{nh}
No
Does the molecule contain n vertical reflection planes (σ_v)?
Yes
C_{nv}
No
Does the molecule contain a $2n$-fold improper rotation axis?
Yes
S_{2n}
No
C_n
No
Does the molecule contain a reflection plane?
Yes
C_s
No
Does the molecule contain an inversion center?
Yes
C_i
No
C_1

10.3. Schéma k určení bodové grupy symetrie