

Bodové grupy symetrie SF_6

Doporučený termín odevzdání: pondělí 4. 11. 2024

- (5 bodů) Pro molekulu fluoridu sírového SF_6 (používá se jako izolační plyn v elektrotechnice) v její rovnovážné geometrii určete
 - její bodovou grupu symetrie (označme ji jako G_1),
 - třídy sdružených prvků této grupy
 - a zda je tato grupa přímý nebo polopřímý součin svých dvou podgrup.Své odpovědi pro body (b) a (c) vysvětlete na základě obecných výsledků probíraných na přednáškách.
- (10 bodů) Tři atomy fluoru molekuly SF_6 , které jsou ve stejné vzdálenosti od sebe, tvoří rovnostranný trojúhelník. Molekulu SF_6 můžeme zdeformovat otočením tohoto trojúhelníku o úhel φ kolem osy, která prochází těžištěm tohoto trojúhelníku a atomem síry.
 - Určete grupu symetrie této nové nerovnovážné konfigurace SF_6 pro $\varphi = 60^\circ$ (označme ji jako G_2) a také pro $0^\circ < \varphi < 60^\circ$ (grupa G_3).
 - Jsou tyto dvě grupy přímým nebo polopřímým součinem jejich dvou podgrup?
 - Jsou tyto grupy izomorfní nějaké podgrupě G_1 ?
 - Pro grupu G_2 najděte třídy sdružených prvků a pro dvě vybrané třídy, které mají více než jeden prvek, určete jejich stabilizátory (uvažujeme-li vnitřní automorfismus na grupě G_2) a také konstanty tříd pro jejich součin.
 - Najděte libovolnou podgrupu řádu 4 grupy G_2 a určete všechny její levé rozkladové třídy. Jde o normální podgrupu?
- (5 bodů) V kvantově-chemických výpočtech při použití některých konkrétních programů můžeme často zadat pouze komutativní bodové grupy symetrie, a to i pro molekuly s vyšší symetrií.
 - Jaké jsou největší komutativní podgrupy G_1 , G_2 a G_3 ? Jakým bodovým grupám jsou tyto podgrupy izomorfní? Jaké jsou mezi nimi vztahy?
 - Najděte příklady nerovnovážných konfigurací SF_6 , které mají jako grupy symetrie tyto komutativní podgrupy.