# Cvičení: Bodové grupy

- jde o podgrupy grupy $O(3)$ = grupa všech vlastních a nevlastních rotací (včetně zrcadlení a inverze) v prostoru kolem os jdoucích počátkem (nebo lib. jiným bodem)

- zachovávají vzdálenosti všech bodů $\Rightarrow$ matice $3\times3$ s $\det = \pm 1$

(geometrické objekty) (geometrické transformace)

- rozlišujeme prvky symetrie a operace symetrie, ovšem často se značí stejně

1) vlastní rotace $C_n$ o úhel $\varphi = \frac{2\pi}{n}$

- prvek symetrie = osa otáčení $C_n$
- operace symetrie = rotace (otočení) o úhel $\frac{2\pi}{n}$ a násobky

$C_n, C_n^2, \ldots, C_n^{n-1}$, neboť $C_n^n = E$

(používají se nejjednodušší značení $\Rightarrow C_4^2 = C_2$)

- hlavní osa je osa otáčení $C_n$ s největším $n$

2) zrcadlení $\sigma_v, \sigma_d$ a $\sigma_h$

- rovina zrcadlení a samotné zrcadlení ($\sigma^2 = E$)
- používá se $\sigma_h$ pro rovinu $\perp$ k $C_n$

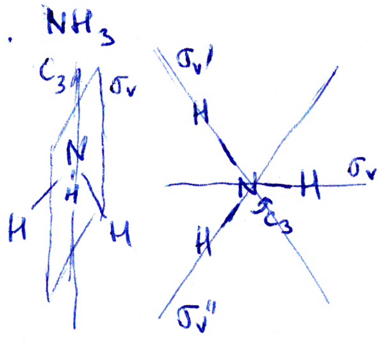
a $\sigma_v, \sigma_d$ pro roviny $\parallel$ s $C_n$

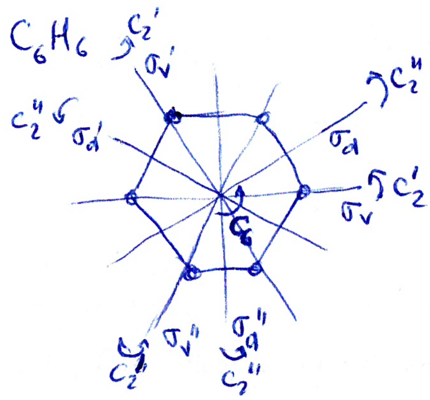
$\sigma_v$ se používá obecněji, jak v případech, kdy nejsou přítomny dvojčetné osy $C_2 \perp C_n$, tak i tehdy pokud jsou přítomny, kdy

$\sigma_v$ je rovina jdoucí $C_n$ a $C_2$

a $\sigma_d$ je typicky rovina půlící úhel mezi dvěmi $C_2$

Př. $NH_3$

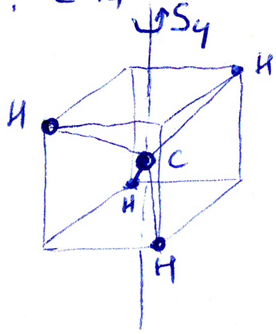



- zde jak $\sigma_v$, tak $\sigma_d$ jdou $C_6$ a $C_2 \perp C_6$ a obě půlí úhel mezi různými $C_2$
- záleží tedy na naší volbě

3) <u>nevlastní rotace $S_n$</u> o úhel $\varphi = \frac{2\pi}{n}$, kdy <u>zároveň</u> provádíme ještě zrcadlení $\sigma_h$ v rovině kolmé na $S_n$

Př. $CH_4$

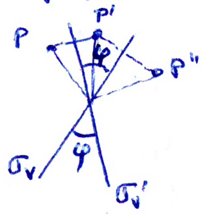



- prvkem symetrie je <u>nevlastní rotační osa</u>
- lze sice psát $S_n = \sigma_h C_n$, ale pozor, $\sigma_h$ a $C_n$ nemusí být samostatné prvky symetrie, i když $S_n$ je přítomná jako symetrie
- sudé „mocniny" dávají vlastní rotace $S_n^{2k} = C_n^{2k}$
- $\sigma_h = S_1$ (neprovádíme rotaci)
- $S_n^n = -E$ pro sudé $n$; $\sigma_h$ pro liché $n$, neboť $S_n^n = \underset{E}{\underset{\parallel}{C_n^n}}\,\sigma_h^n$ ($C_n$ a $\sigma_h$ komutují)

4) <u>inverze $i$</u> skrze <u>bod</u> inverze (obvykle počátek)
- změna znaménka všech souřadnic $x_i \leftrightarrow -x_i$
- $i = S_2$ (rotace změní znaménko u dvou os a pak zrcadlení u té ~~třetí~~ třetí)

- $i$ a $\sigma_h$ (a též $\sigma_v$ či $\sigma_d$) jsou tedy jen speciální případy $S_n$, ale pro jednoduchost (přehlednost) se uvádějí zvlášť speciálními symboly
- jakmile jsou přítomny některé prvky symetrie, další jiné můžou být vynuceny, např.
  je-li přítomna osa $C_n$ a $C_2 \perp C_n$, pak musí být přítomno dalších $n-1$ $C_2$ os $\perp C_n$

  nebo dvě vertikální roviny zrcadlení $\sigma_v$ a $\sigma_v'$ svírající úhel $\varphi$ dávají otočení o úhel $2\varphi$: $\sigma_v \sigma_v' = C(2\varphi)$




  apod.

## <u>Klasifikace bodových grup</u>

- viz algoritmus níže k určení bodové grupy
- 7 nekonečných řad – $\underbrace{C_n, S_{2n}, C_{nh}, C_{nv}}_{\text{pouze jedna osa otáčení + roviny zrcadlení}}$, $\underbrace{D_n, D_{nd}, D_{nh}}_{\text{dihedrické grupy s } C_2 \perp C_n}$
  speciálně $C_i = S_2$, $C_s = C_{1h} = C_{1v}$
- 7 samostatných bod. grup – $T, T_d, T_h, O, O_h, I, I_h$ ← čtyřstěn → $T_d$, krychle → $O_h$, dvacetistěn → $I_h$
- a limity pro $n \to \infty$: $C_{\infty v}$ a $D_{\infty h}$ ← lineární molekuly

## 10.3. *Schéma k určení bodové grupy symetrie*