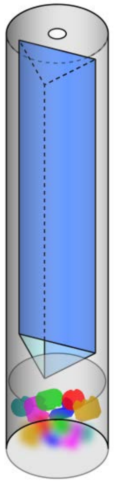
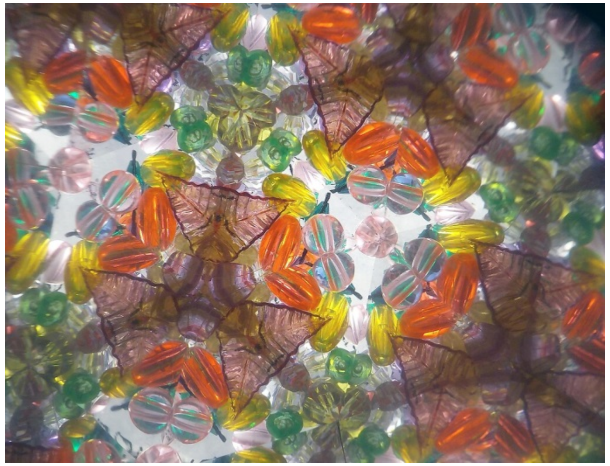
Семинар 1

1. Элементы симметрии. Операции симметрии.
2. Способы представления элементов и операций симметрии
3. Взаимодействие элементов симметрии.
4. Теория абстрактных математических групп в теории симметрии. Квадраты Кейли.

Любую операцию симметрии можно представить последовательным отражением в плоскостях

Поворот на сколько?



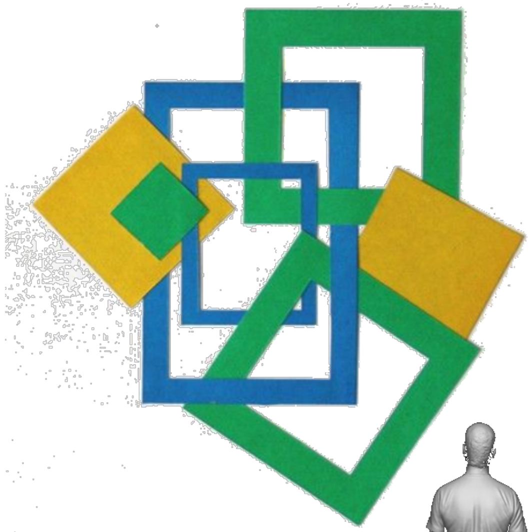


Поворот на 120 можно заменить последовательным отражением в двух пересекающихся под углом 60 плоскостях

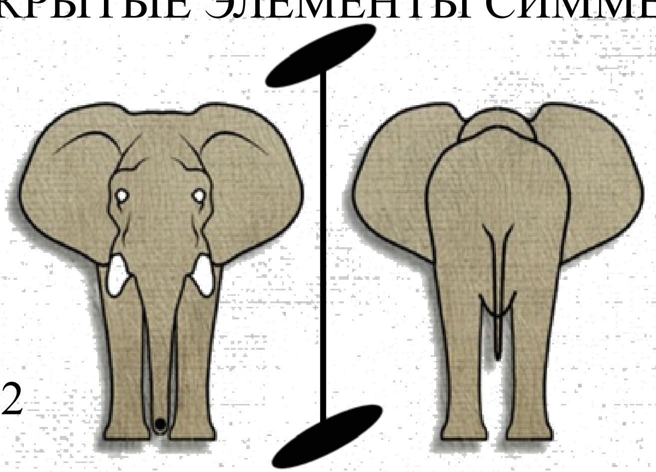
Поворот на сколько?

ЗАКРЫТЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ. ПРОСТЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ

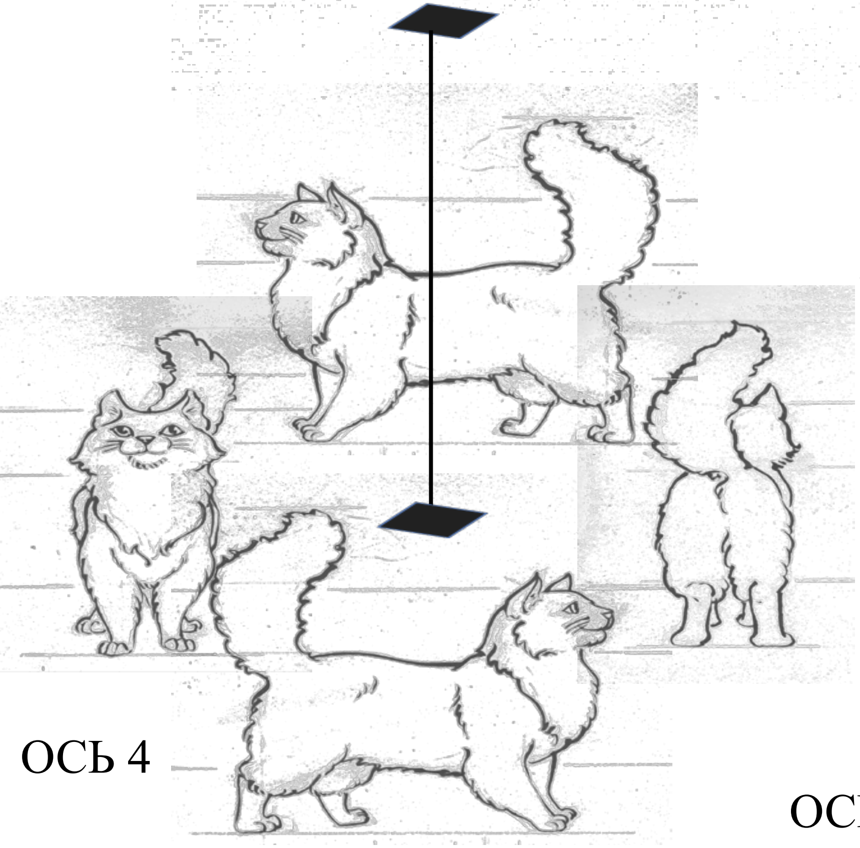
К простыми закрытым элементам симметрии относятся *только поворотные оси*



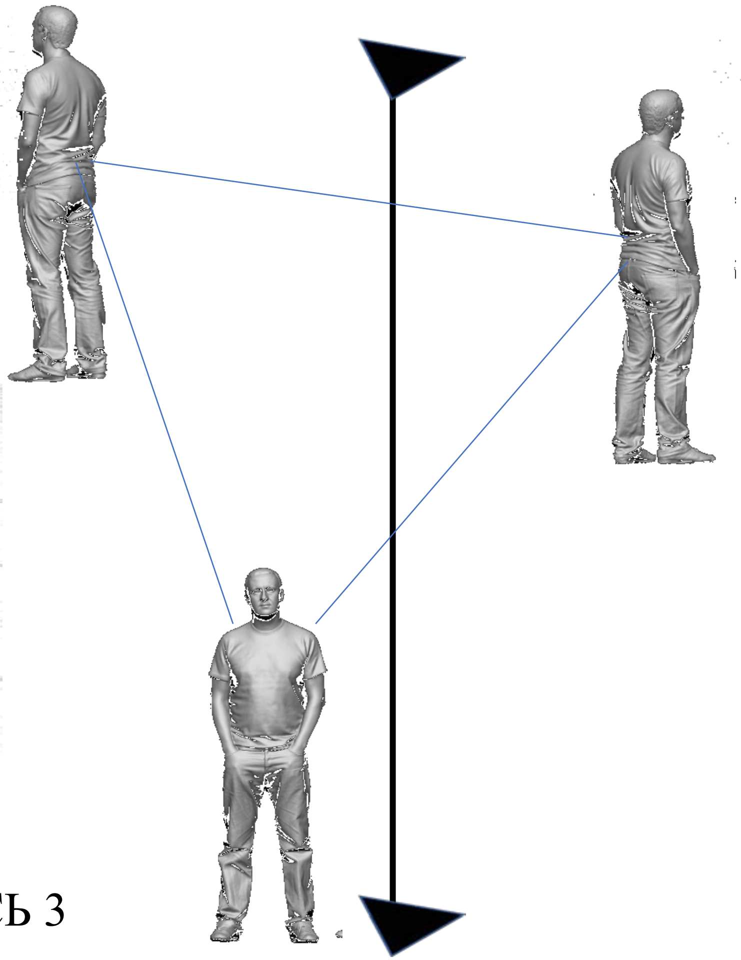
ОСЬ 1



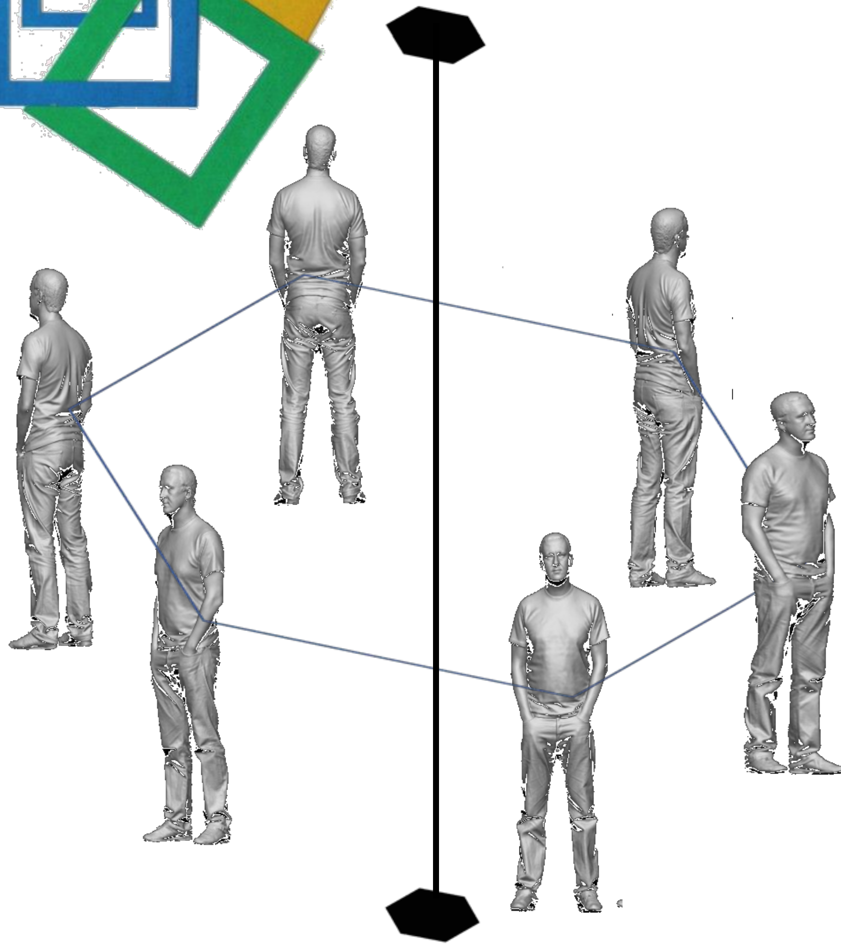
ОСЬ 2



ОСЬ 4



ОСЬ 3

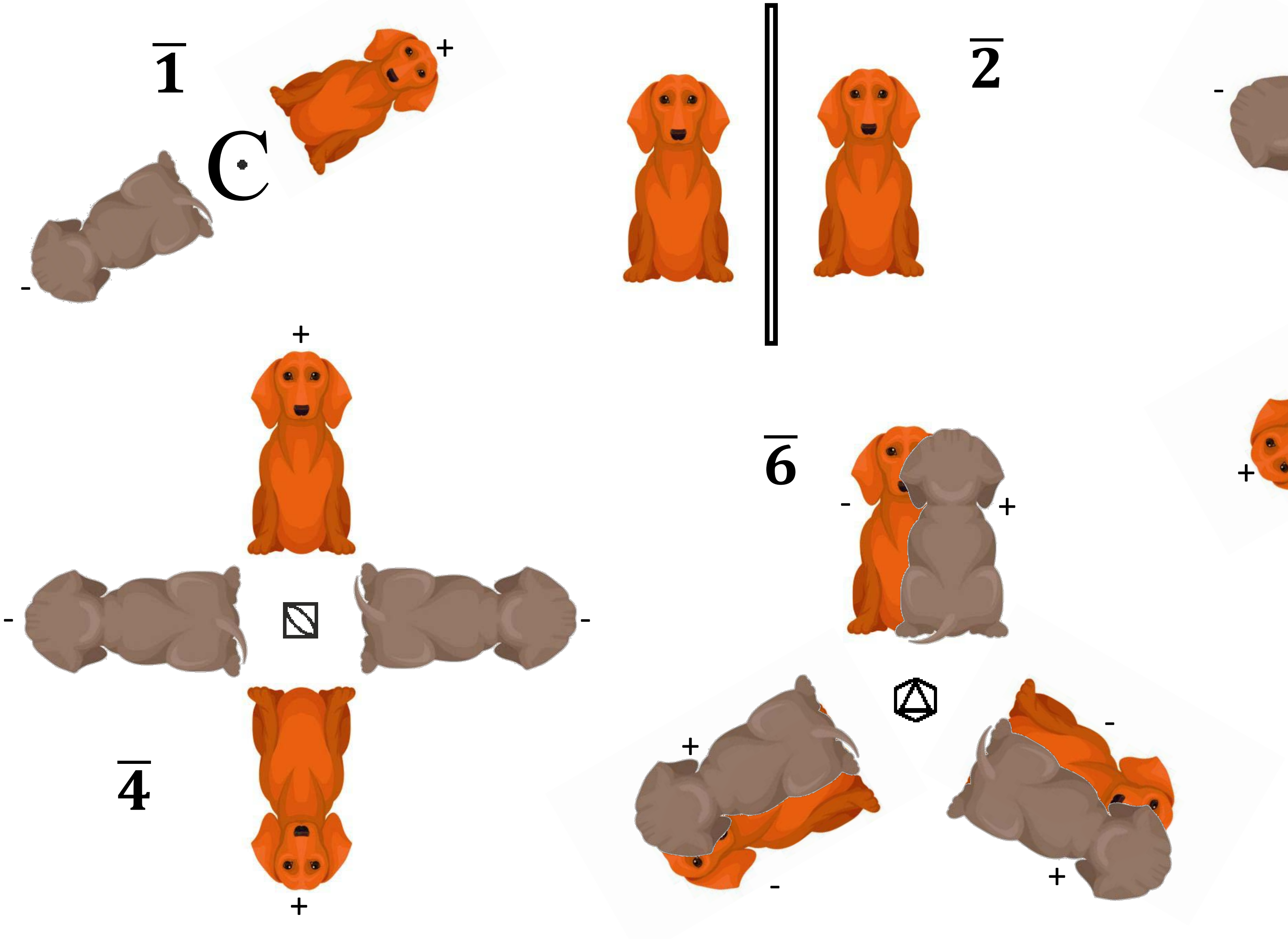


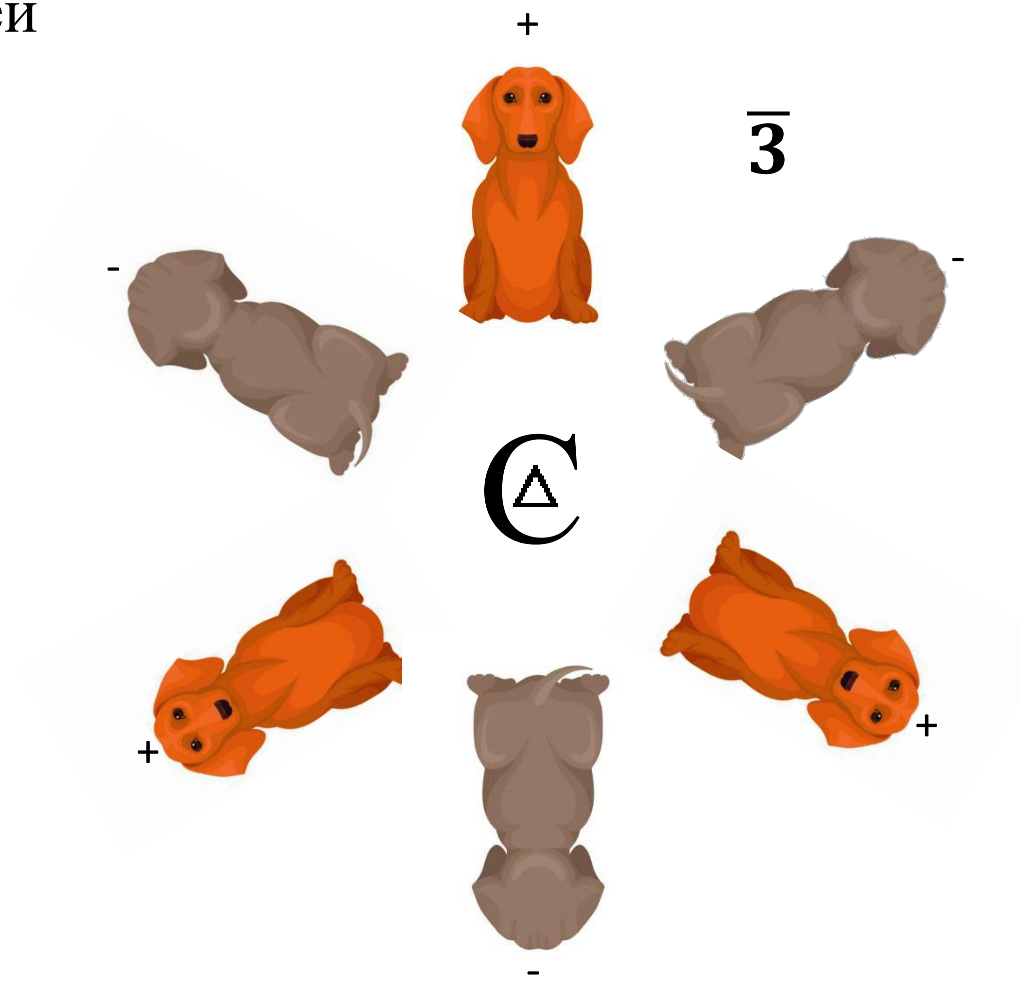
ОСЬ 6

ЗАКРЫТЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ. ПРОСТЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ

№	Эл. симм	Гр. знак	n	α	I/II род	Низш/ высш	Вел. симм.	Операции симметрии	Матрицы операций симметрии
1	1		1	360	I	Низш.	1	$\{e\}$	$\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
2	2		2	180	I	Низш.	2	$\{e, 2^1\}$	$2_z \begin{matrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$ $2_x \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$
3	3		3	120	I	Высш.	3	$\{e, 3^1, 3^2\}$	$3^1{}_z \begin{matrix} \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$ $3^2{}_z \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
4	4		4	90	I	Высш.	4	$\{e, 4^1, 4^2{=}2, 4^3\}$	$4^3{}_z \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$ $4^1{}_z \begin{matrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
5	6		6	60	I	Высш.	6	$\{e, 6^1, 6^2{=}3^1, 6^3{=}2, 6^4{=}3^2, 6^5\}$	$6^1{}_z \begin{matrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$ $6^5{}_z \begin{matrix} 1 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$

Иллюстрация действия инверсионных осей кристаллографических порядков



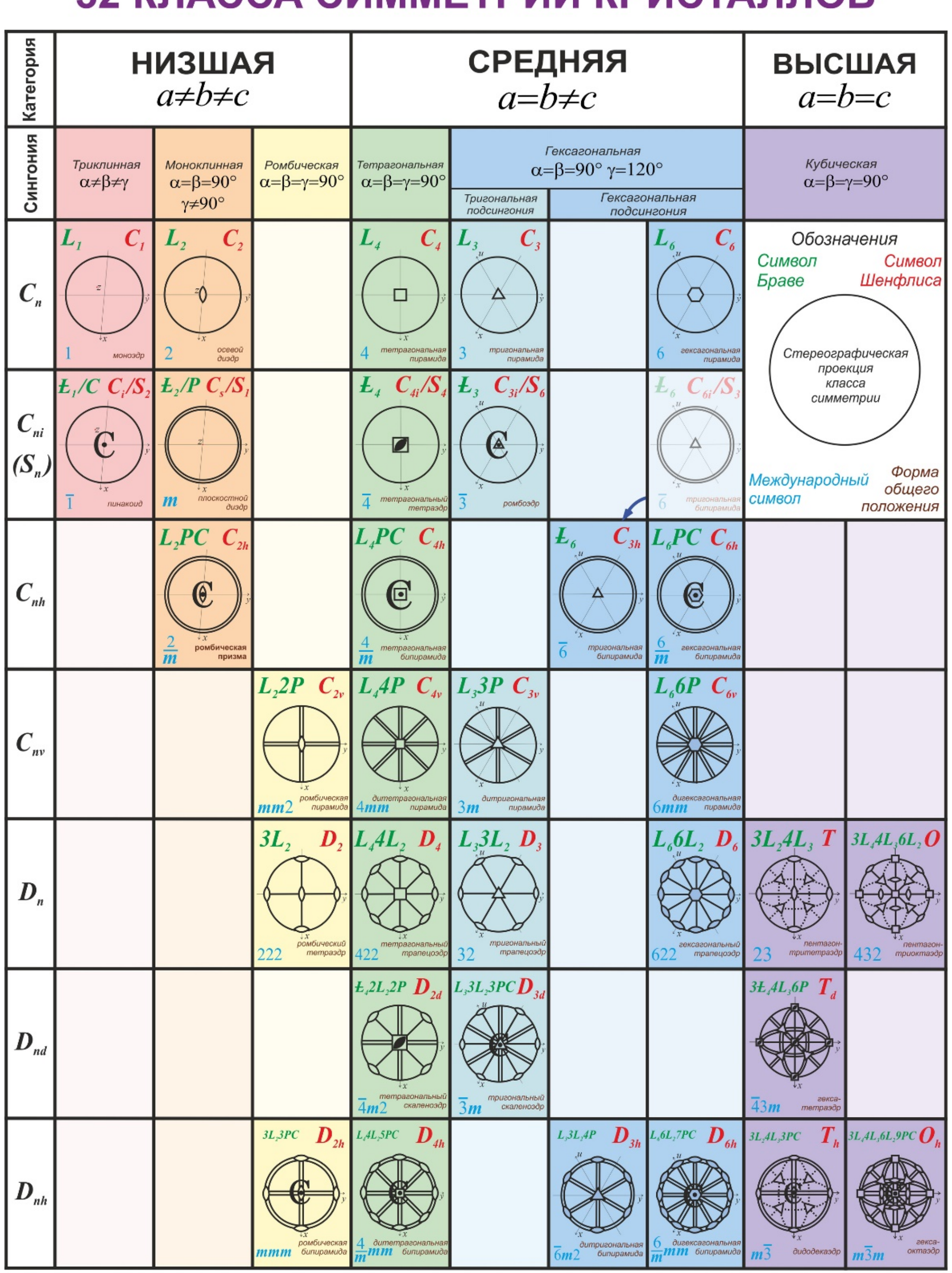


ЗАКРЫТЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ. СЛОЖНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ

№	Эл. симм	Гр. знак	n	α/ пов.*	I/II род	Низш/ высш	Вел. симм.**	Операции симметрии	Матрицы операций симметрии
6	$\bar{1}$		1	360	II	Низш.	2	$\{1=e, \bar{1}\}$	$\begin{matrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$
7	$\bar{2}$ m		2	180/360	II	Низш.	2	$\{1=e, m\}$	$\bar{2}_z \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$ $\bar{2}_x \begin{matrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
8	$\bar{3}$		3	120	II	Высш.	6	$\{1=e, 3^1, 3^2\}$	$\bar{3}^1_z \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$ $\bar{3}^2_z \begin{matrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$
9	$\bar{4}$		4	90/ 180	II	Высш.	4	$\{1=e, \bar{4}^1, \bar{4}^2=2, \bar{4}^3\}$	$\bar{4}^1_z \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$ $\bar{4}^3_z \begin{matrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$
10	$\bar{6}$		6	60/ 120	II	Высш.	6	$\{1=e, \bar{6}^1, \bar{6}^2=3^1, \bar{6}^3=2, \bar{6}^4=3^2, \bar{6}^5\}$	$\bar{6}^1_z \begin{matrix} \bar{1} & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$ $\bar{6}^5_z \begin{matrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$

*Для осей нечетного порядка элементарный угол поворота равен минимальной поворотной составляющей, а для осей четного – вдвое больший.

**А величина симметрии наоборот: для осей четного порядка соответствует порядку, а для нечетных – вдвое большая.



Скачать оригинал этой таблицы в формате А4 можно по гиперссылке http://cryst.geol.msu.ru/appliances/pics/32.jpg.

Немного об абстрактной теории групп в теории симметрии

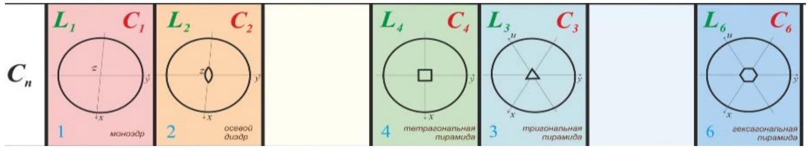
Группой называется множество объектов (G) любой природы с заданной бинарной операцией ($*$), если для любой пары элементов (a и b) этого множества G определен третий результирующий элемент $c = a * b$ того же множества. В общем случае $a * b \neq b * a$. Это значит, что результат зависит от того, в какой последовательности производится умножение элементов группы. Применительно к операциям симметрии это означает, что результирующие операции могут оказаться различными, если поменять порядок выполнения исходных операций.

При этом группой будет лишь такое множество с заданной бинарной операцией, для которого выполняются следующие условия:

– ***ассоциативности*** – $(a * b) * c = a * (b * c)$,

– существования ***единичного члена*** **(*e*)** - такого единичного элемента, что для любого элемента группы будет выполняться равенство $e * a = a * e = a$,

– ***обратимости*** – для любого элемента a существует элемент a^{-1} из того же множества, называемый *обратным элементом* к элементу a, такой, что $a * a^{-1} = a^{-1} * a = e$.

Некоторые определения теории групп	**В приложении к группам симметрии**
Порядок группы – число элементов группы G	Размножающая способность или величина симметрии
Подгруппа – множество H⊂G, замкнутое относительно той же групповой операции, что и G, удовлетворяющее всем условиям группы	Все классы сингонии являются подгруппами голоэдрии этой сингонии.
Надгруппа – множество G для H,	Кубическая голэдрия – надгруппа для всех классов, кроме гексагональной подсингонии. Голоэдрия гексагональной подсингонии – надгруппа для всех классов гексагональной сингонии
Теорема Лангранжа - порядок подгруппы в целое число раз меньше порядка содержащей ее группы	Величина симметрии группы $P3m$ (6) в 2 раза меньше таковой для ее надгруппы $P\bar{3}m$ (12)  Общая простая форма класса 222 – ромбический тетраэдр - содержит в 2 раза меньше граней ромбической бипирамиды - простой формы класса mmm
Абелевы группы – все операции симметрии коммутативны: $a * b = b * a$.	Группы C_{nv}, D_n, D_{nd}, D_{nh} – при n>2 все неабелевы, а, например C_{4h} – абелева
Циклические группы – все элементы группы можно получить умножением одного элемента на самого себя	Все группы C_n 
Генераторы группы – такие элементы, произведениями которых можно получить всю группу	Элементы симметрии m_x, 3^1_z и 2_x – генераторы группы $\bar{3}m$ $3^1_z \begin{matrix} \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$ $2_x \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$ $\bar{2}_x \begin{matrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$