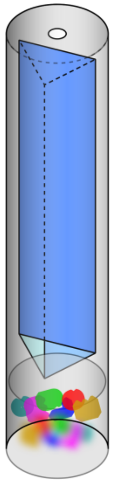
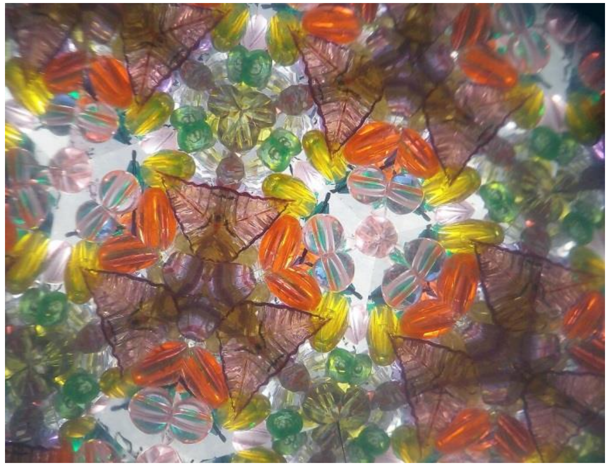
Семинар 1

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?

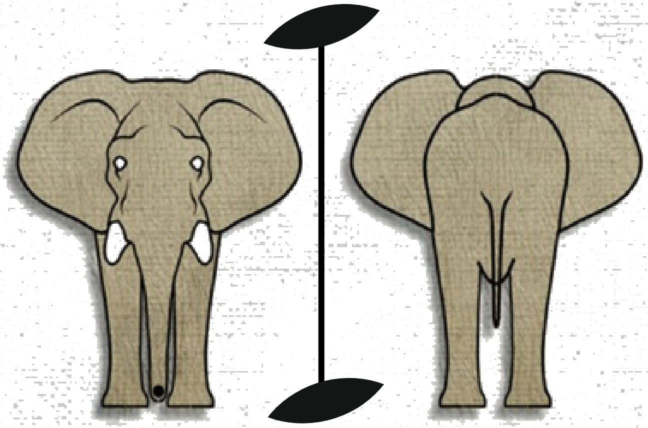




Поворот на 120 можно заменить последовательным отражением в двух пересекающихся под углом 60 плоскостях

Поворот на сколько?

ЗАКРЫТЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ. ПРОСТЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ. ОСОБЕННОСТИ

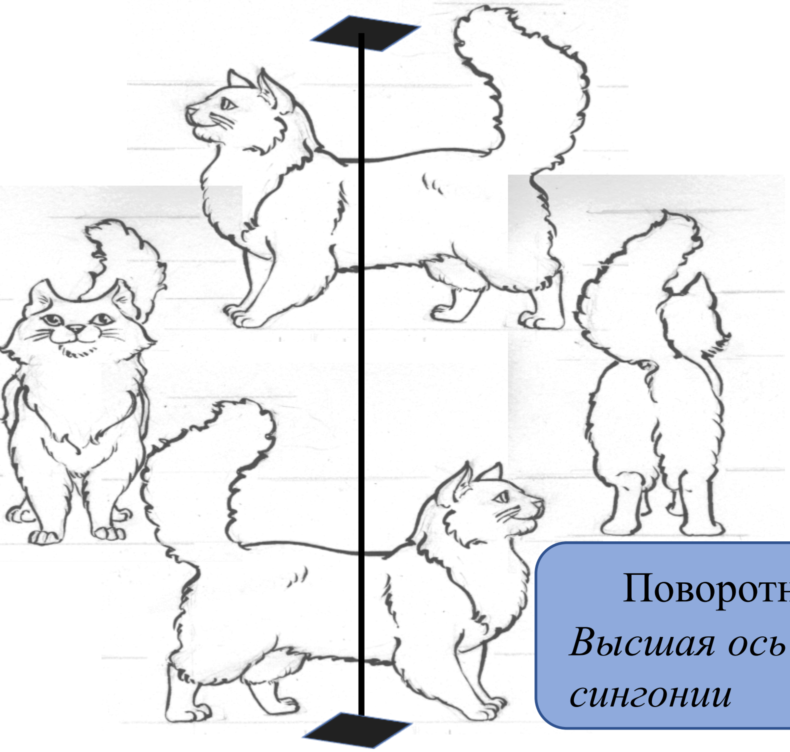


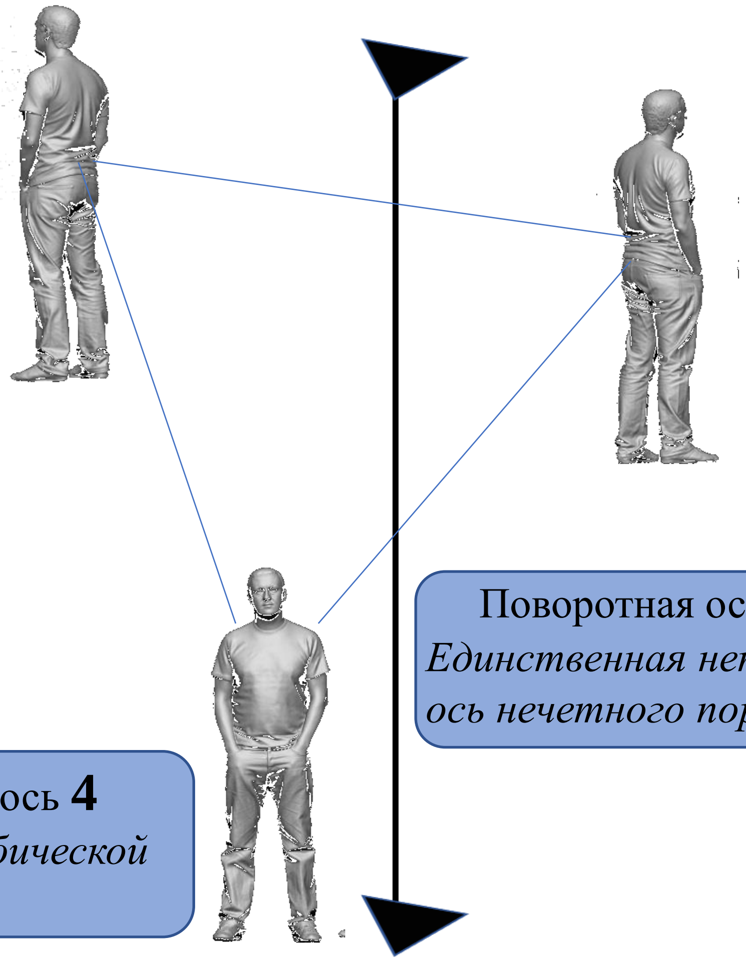
Поворотная ось **1**

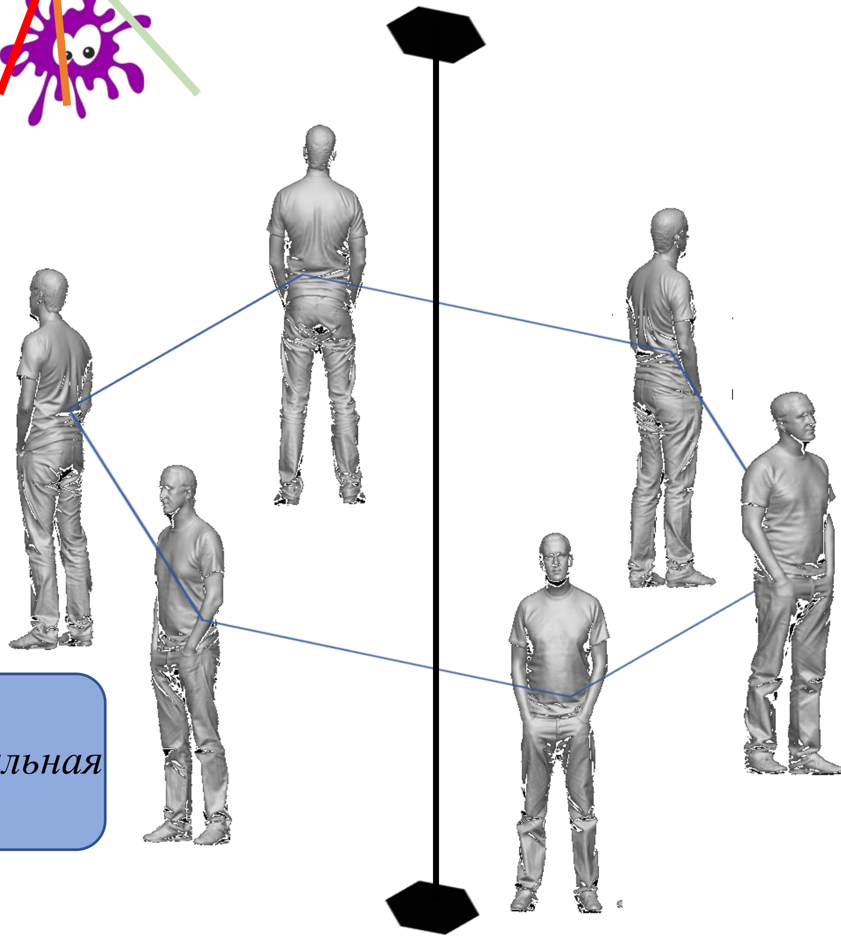
Тривиальная ось

Поворотная ось **3**

Единственная нетривиальная низшая ось







Поворотная ось **3**

Единственная нетривиальная ось нечетного порядка!

Поворотная ось **4**

Высшая ось кубической сингонии

Поворотная ось **6**

Не совместима с осями высших порядков!

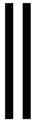
К простыми закрытым элементам симметрии относятся *только поворотные оси*

ЗАКРЫТЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ. ПРОСТЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ

№	Эл. симм	Гр. знак	n	α	I/II род	Низш/ высш	Величина симм.	Операции симметрии	Матрица преобразования координатных осей для 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	$\{e, 2^1\}$	$2_z \begin{matrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$ $2_x \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$ $2_y \begin{matrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$
3	3	▲	3	120°	I	Высш.	3	$\{e, 3^1, 3^2\}$	$3^1{}_z \begin{matrix} \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$ $3^2{}_z \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$ $3^1{}_{xyz} \begin{matrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{matrix}$
4	4	■	4	90°	I	Высш.	4	$\{e, 4^1, 4^2=2, 4^3\}$	$4^3{}_z \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$ $4^1{}_z \begin{matrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$ $4^3{}_x \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & 1 & 0 \end{matrix}$
5	6	⬢	6	60°	I	Высш.	6	$\{e, 6^1, 6^2=3^1, 6^3=2, 6^4=3^2, 6^5\}$	$6^1{}_z \begin{matrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$ $6^5{}_z \begin{matrix} 1 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$

ЗАКРЫТЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ. СЛОЖНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ.

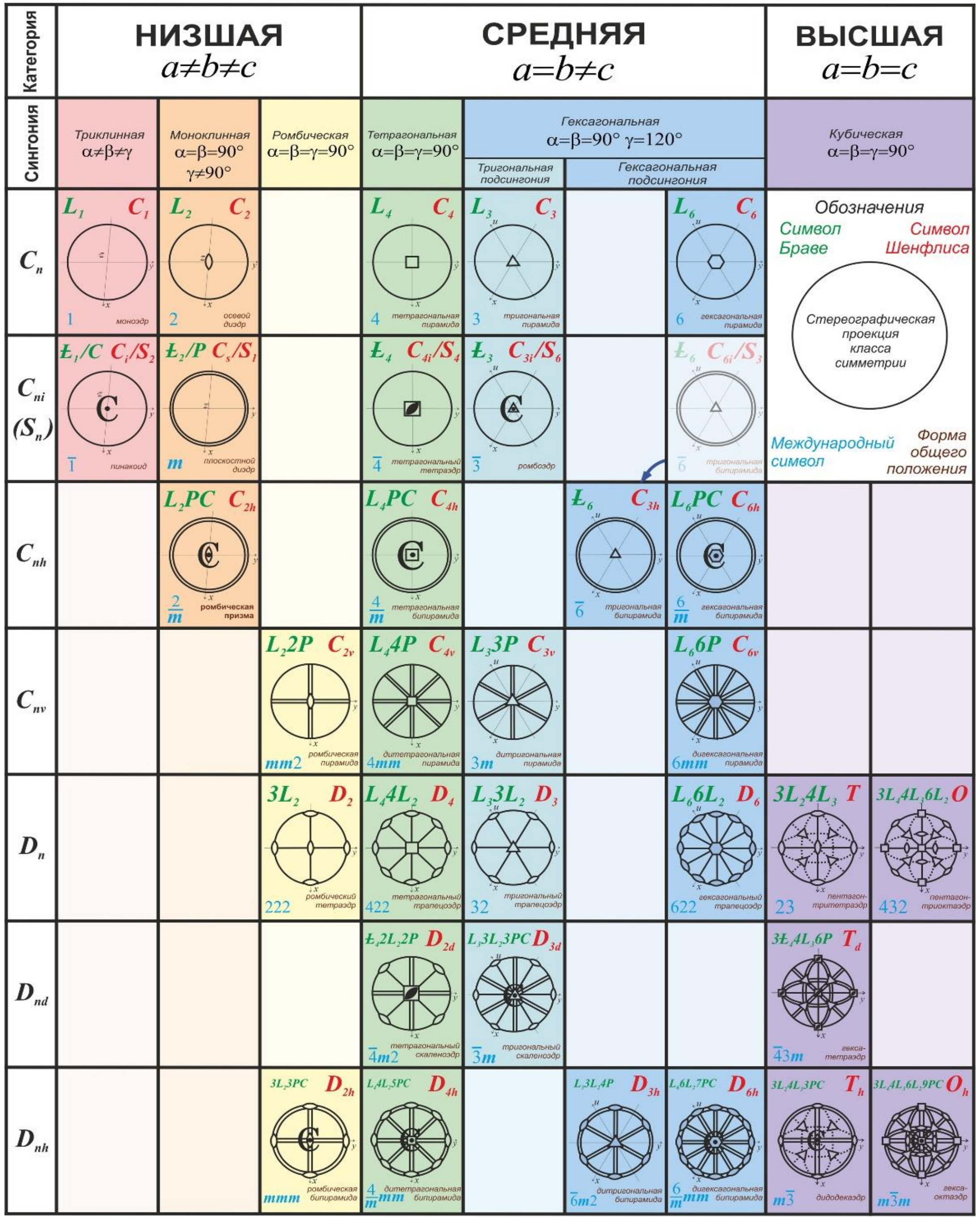
ЗАКРЫТЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ. СЛОЖНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ

№	Эл. симм	Гр. знак	n	α/ пов.*	I/II род	Низш/ высш	Вел. симм.**	Групповое представление (операции симм.)	Матрица преобразования координатных осей для 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	$\{1=e,\ m\}$	$\bar{2}_z \begin{matrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & \bar{1}\end{matrix}$ $\bar{2}_x \begin{matrix}\bar{1} & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{matrix}$ $\bar{2}_{xy} \begin{matrix}0 & \bar{1} & 0\\ \bar{1} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{matrix}$
8	$\bar{3}$		3	120	II	Высш.	6	$\{1=e,\ 3^1,\ 3^2\}$	$\bar{3}^1{}_z \begin{matrix}1 & 1 & 0\\ \bar{1} & 0 & 0\\ 0 & 0 & \bar{1}\end{matrix}$ $\bar{3}^2{}_z \begin{matrix}0 & \bar{1} & 0\\ 1 & 1 & 0\\ 0 & 0 & \bar{1}\end{matrix}$
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	$\{1=e,\ \bar{6}^1,\ \bar{6}^2=3^1,\ \bar{6}^3=2,\ \bar{6}^4=3^2,\ \bar{6}^5\}$	$\bar{6}^1{}_z \begin{matrix}0 & 1 & 0\\ \bar{1} & \bar{1} & 0\\ 0 & 0 & \bar{1}\end{matrix}$ $\bar{6}^5{}_z \begin{matrix}\bar{1} & \bar{1} & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \bar{1}\end{matrix}$

*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.

32 КЛАССА СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ



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 $a * a^{-1} = a^{-1} * a = e$.

Немного об абстрактной теории групп в теории симметрии

Например бесконечной группой является множество целых чисел относительно операции сложения. Проверим это. Вставить бесконечный ряд целых чисел

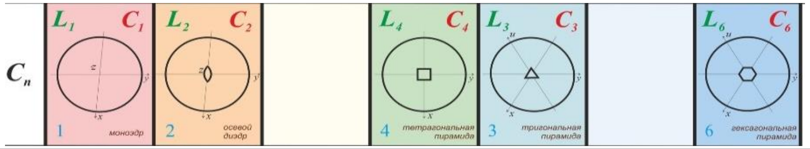
…	-7	-6	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5	6	7	…

- сумма любой пары элементов множества целое число, а, следовательно, элемент этого множества.

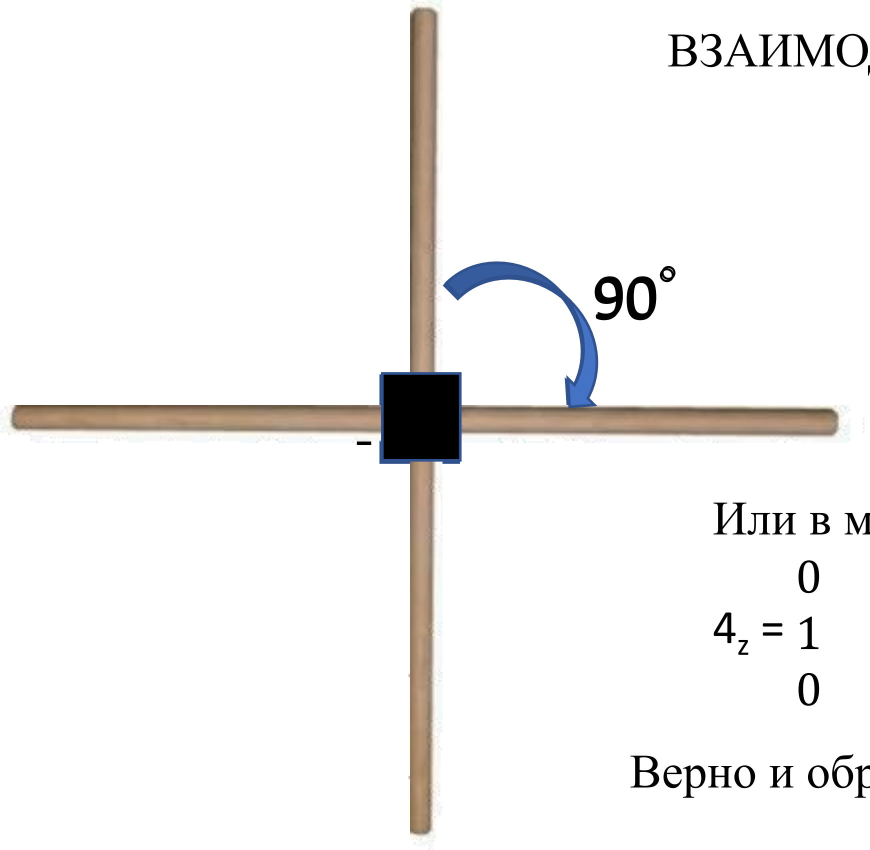
– ***ассоциативности*** – $(a * b) * c = a * (b * c)$ – от перемены мест слагаемых сумма не меняется,

– ***единичный член* (*e*)** такого множества – 0. Добавление нуля к любому числу, а также добавление любого числа к нулю не изменяет это число, т.е. для любого целого числа будет выполняться равенство $0 * a = a * 0 = a$,

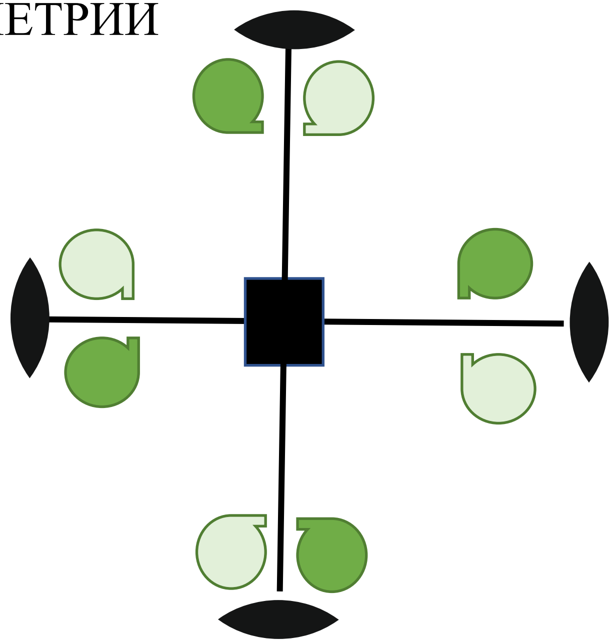
– ***обратимости*** – $a * a^{-1} = a^{-1} * a = e$. Для любого целого числа существуют число, равное по модулю, но с обратным знаком. Очевидно, что в сумме они дают 0, т.е. единичный элемент.

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. Уменьшение величины симметрии в 2 раза – гемиэдрия, в 4 раза - тетардоэдрия
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) /гемиэдрия/ в 2 раза меньше таковой для ее надгруппы $P\bar{3}m$ (12) /голоэдрия/   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, т.е. все элементы группы – степени одного операторв	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 $\bar{3}m$ $3^1_z \begin{matrix} \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$ $2_x \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$ $\bar{2}_x \begin{matrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
Изоморфные группы – каждому элементу одной группы можно поставить в строгом соответствии элемент другой	Классы *222, mm2, 2/m* - изоморфны, а *Pmm*2 *и Imm*2 - нет

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЗАКРЫТЫХ ЭЛЕМЕНТОВ СИММЕТРИИ



Модельный способ наглядно показывает, что пересечение оси 4_z и 2_x вызывает появление дополнительной оси 2-ого порядка 2_{xy}



Или в матричном виде:

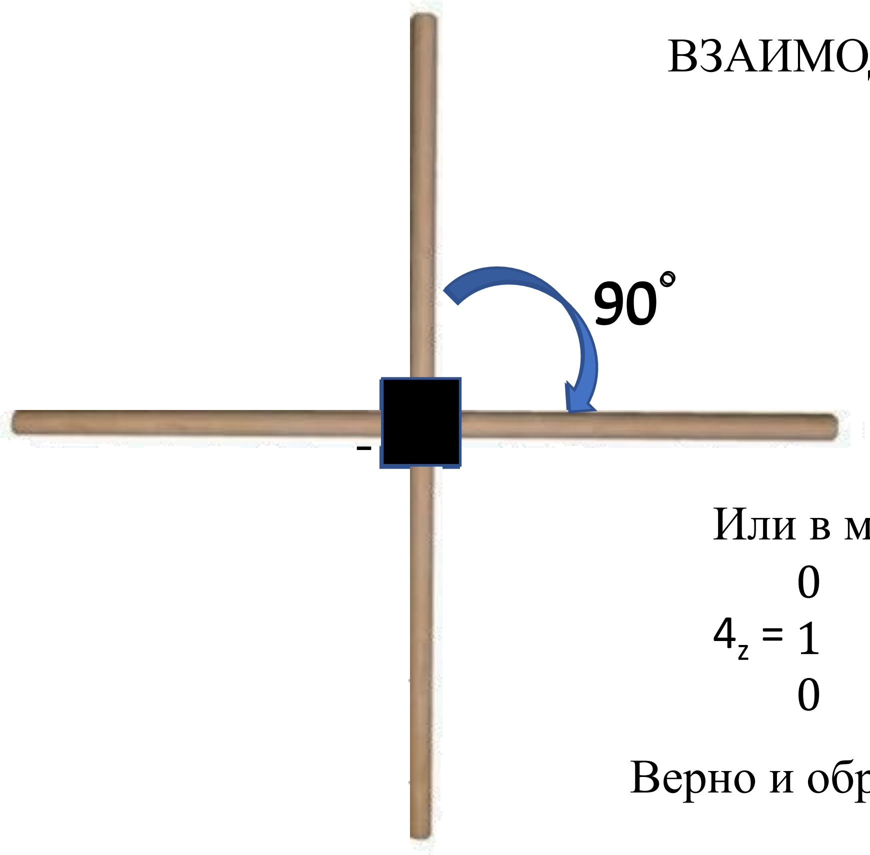
$$4_z = \begin{matrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix} \ \mathbf{x} \ 2_x = \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix} = \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix} = 2_{xy}$$

Верно и обратное: взаимодействие двух осей 2 под углом 45°

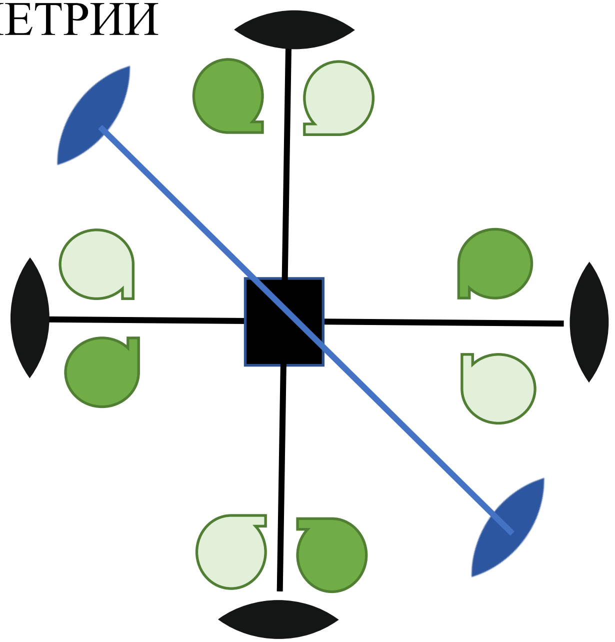
$$2_{xy} = \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}, \ \mathbf{x} \ 2_x = \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix} = \begin{matrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix} = 4_z$$

Взаимодействие осей 2-ого порядка, поворотных или инверсионных приводит к появлению новой оси с элементарным углом поворота вдвое большим, чем угол пересечения порождающих элементов симметрии. Если исходные элементы однородны, то возникающая ось – поворотная, разнородны зеркально-поворотная или инверсионная.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЗАКРЫТЫХ ЭЛЕМЕНТОВ СИММЕТРИИ



Модельный способ наглядно показывает, что пересечение оси 4_z и 2_x вызывает появление дополнительной оси 2-ого порядка 2_{xy}



Или в матричном виде:

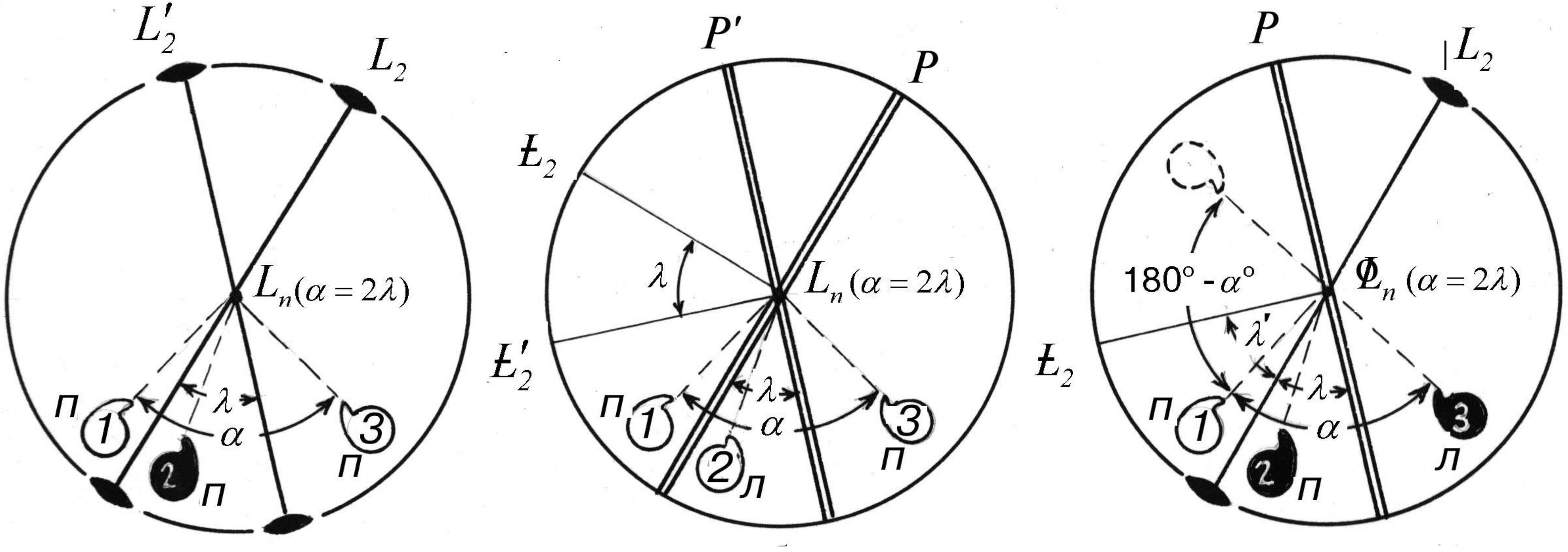
$$4_z = \begin{matrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix} \quad \mathbf{x} \quad 2_x = \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix} = \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix} = 2_{xy}$$

Верно и обратное: взаимодействие двух осей 2 под углом 45°

$$2_{xy} = \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}, \quad \mathbf{x} \quad 2_x = \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix} = \begin{matrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix} = 4_z$$

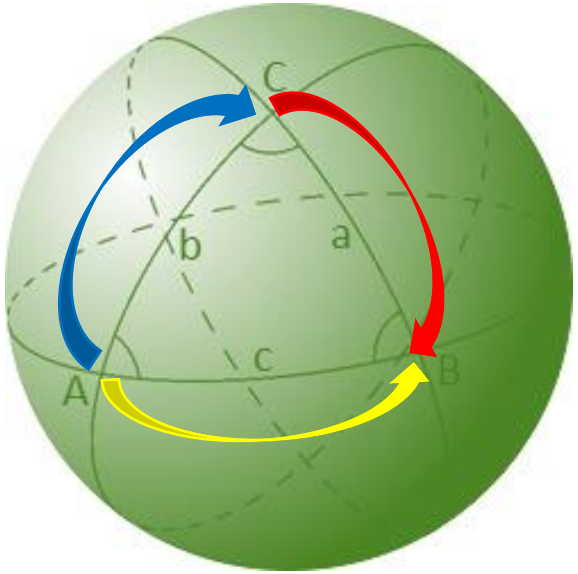
Взаимодействие осей 2-ого порядка, поворотных или инверсионных приводит к появлению новой оси с элементарным углом поворота вдвое большим, чем угол пересечения порождающих элементов симметрии. Если исходные элементы однородны, то возникающая ось – поворотная, разнородны зеркально-поворотная или инверсионная.

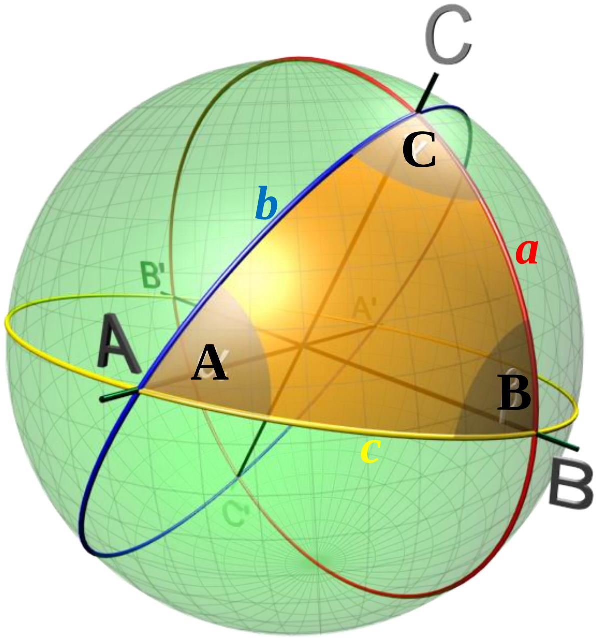
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЗАКРЫТЫХ ЭЛЕМЕНТОВ СИММЕТРИИ



Взаимодействие осей 2-ого порядка, поворотных или инверсионных приводит к появлению новой оси с элементарным углом поворота вдвое большим, чем угол пересечения порождающих элементов симметрии. Если исходные элементы однородны, то возникающая ось – поворотная, разнородны - зеркально-поворотная или инверсионная.

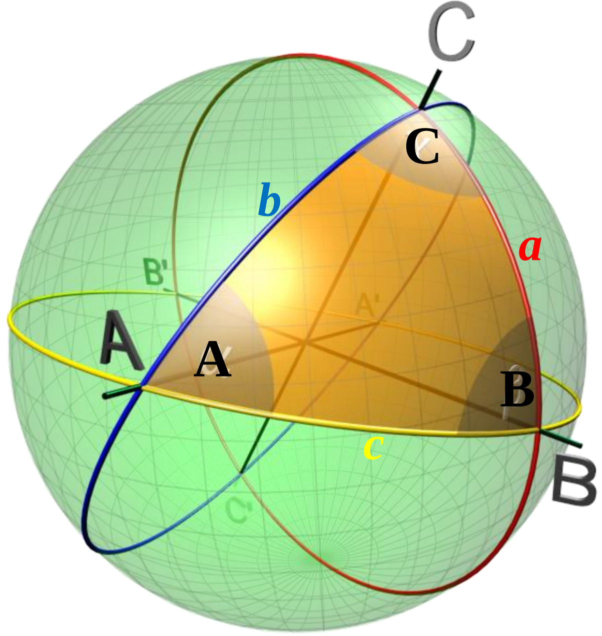
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЗАКРЫТЫХ ЭЛЕМЕНТОВ СИММЕТРИИ В АСПЕКТЕ СФЕРИЧЕСКОЙ ТРИГОНОМЕТРИИ





Любое перемещение по сферической поверхности можно представить отрезком окружности максимального диаметра, которая в стереографической проекции превращается в отрезок меридиана Сферическая тригонометрия рассматривает треугольники, стороны которого такие отрезки. Т. е. стороны сферического треугольника – отрезки сферических проекций плоскостей, проходящих через центр сферы. В симметрийном аспекте стороны сферического треугольника отражают поворот вокруг оси, перпендикулярной плоскости данной окружности, а его вершины – выходы поворотных осей n-ого порядка, проходящих по линии пересечения этих плоскостей. Причем угол пересечения вдвое меньше элементарного угла поворота такой оси.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЗАКРЫТЫХ ЭЛЕМЕНТОВ СИММЕТРИИ

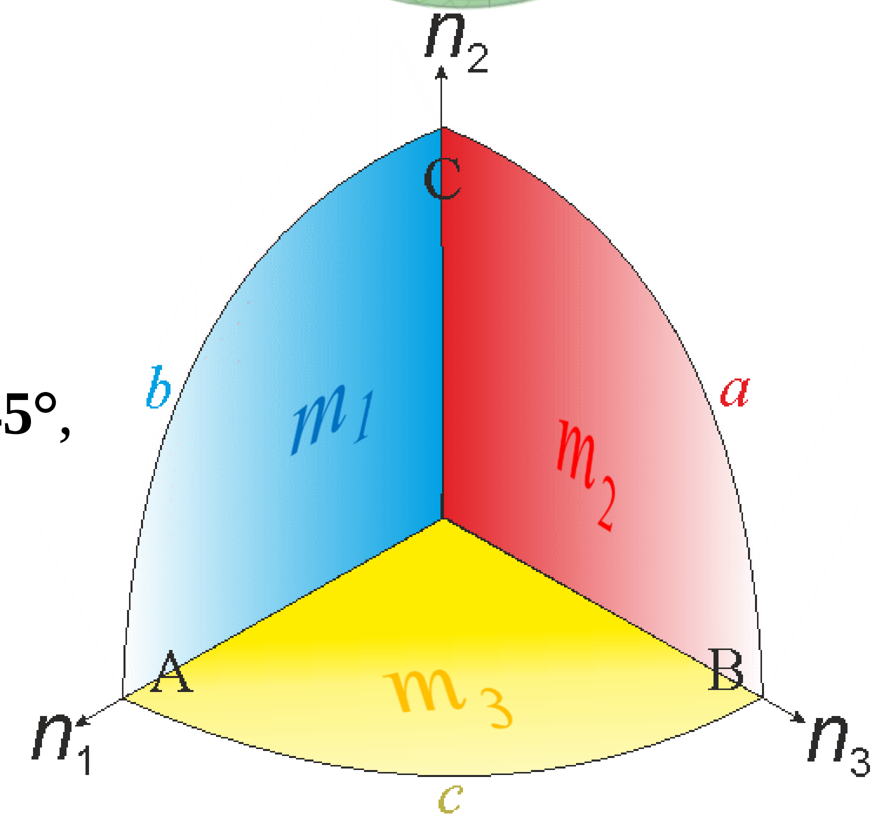


Построим сферический треугольник, вершины которого – выходы осей 2. Углы при этих вершинах такого сферического треугольника равны 90° (180°/2). Угол при третьей вершине есть элементарный угол поворота результирующей оси. Его можно посчитать по сферической теореме косинусов:

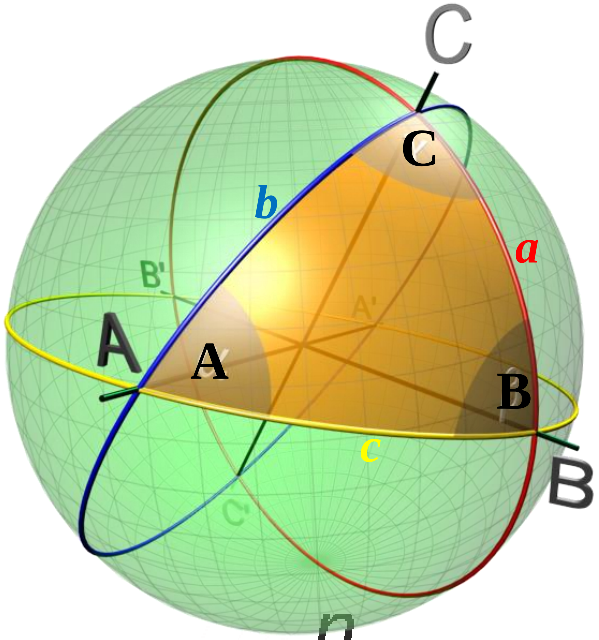
$$\mathbf{\cos A = -\cos B \cos C + \sin B \sin C \cos \mathit{a}}$$

где **A,B,C-** углы сферического треугольника, каждый из которых равен половине элементарного угла поворота соответствующей оси
a – длина противолежащей стороны, равная углу между соответствующими осями

$$\mathbf{\arccos A = -\cos 90° \cos 90° + \sin 90° \sin 90° \cos 45° = \arccos \sqrt{2}/2 = 45°},$$



Учитывая, что этот угол есть половина элементарного угла поворота оси, появляющейся в результате пересечения осей 2-ого порядка под углом 45°, результирующая ось оказывается 4-ого порядка, что полностью соответствует модельному и матричному подходу.

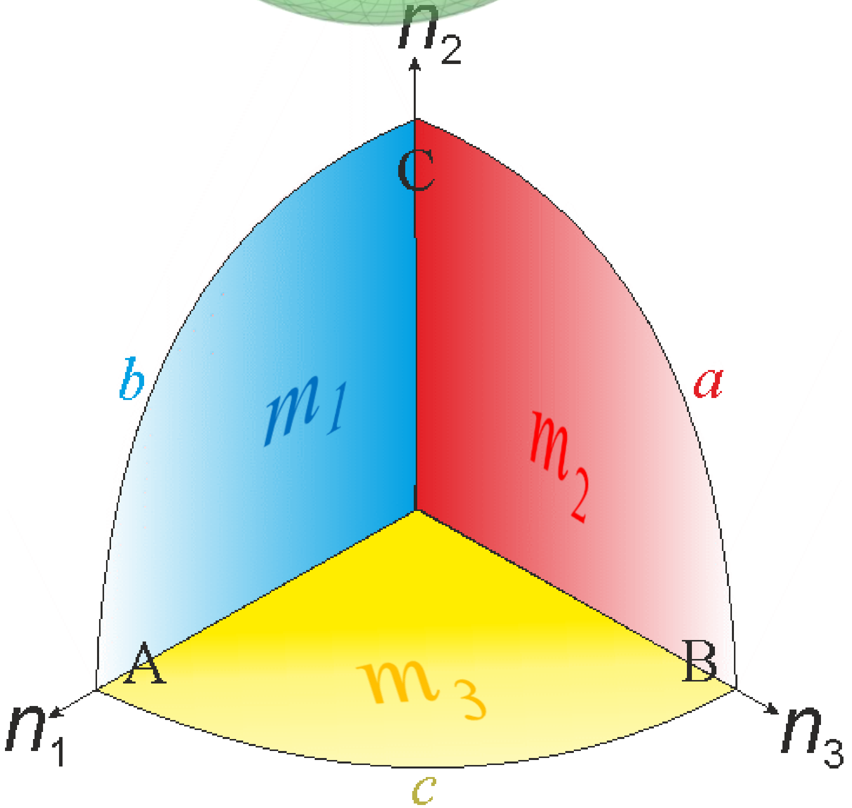


Теорема косинусов дает ответ на вопрос оси каких порядков и под какими углами могут пересекаться в реально существующих многогранниках: *существуют только такие многогранники, сумма углов при вершинах, образованных выходами его поворотных осей, больше 180°*:

$$A + B + C \; < 180°$$

или сумма обратных отношений их порядков больше 1:

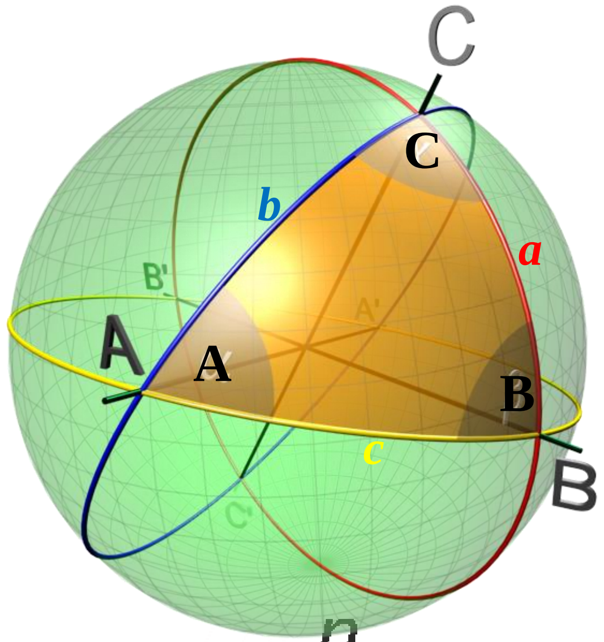
$$\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2} + \frac{1}{n_3} \; > 1$$

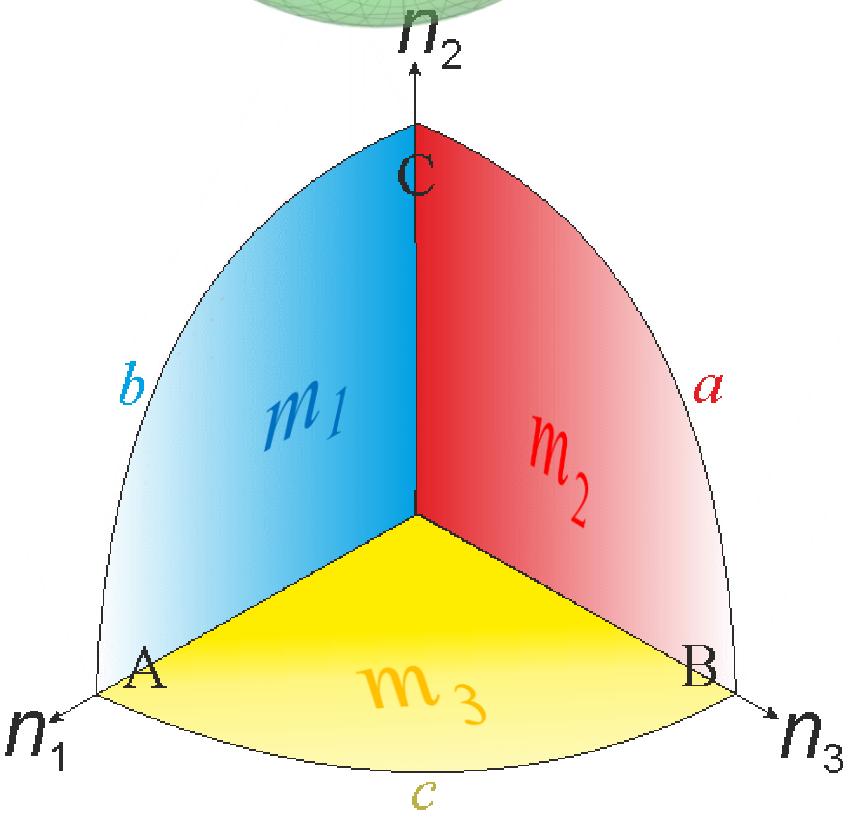


Из неравенства следует, что в случае пересечения осей высшего порядка существует только 3 набора осей:

1. $n_1=3$, $n_2=3$, $n_3=2$
2. $n_1=4$, $n_2=3$, $n_3=2$
3. $n_1=5$, $n_2=3$, $n_3=2$

Вывод справедлив не только для кристаллографических многогранников





Сдает ответ на вопрос под какими углами могут пересекаться поворотные оси данных порядков в реально существующих многогранниках

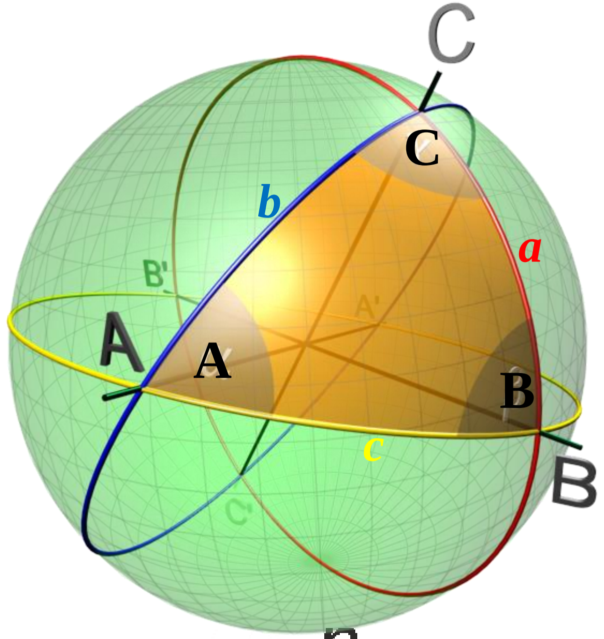
$$\cos a = \cos b \cos c + \sin b \sin c \cos A$$

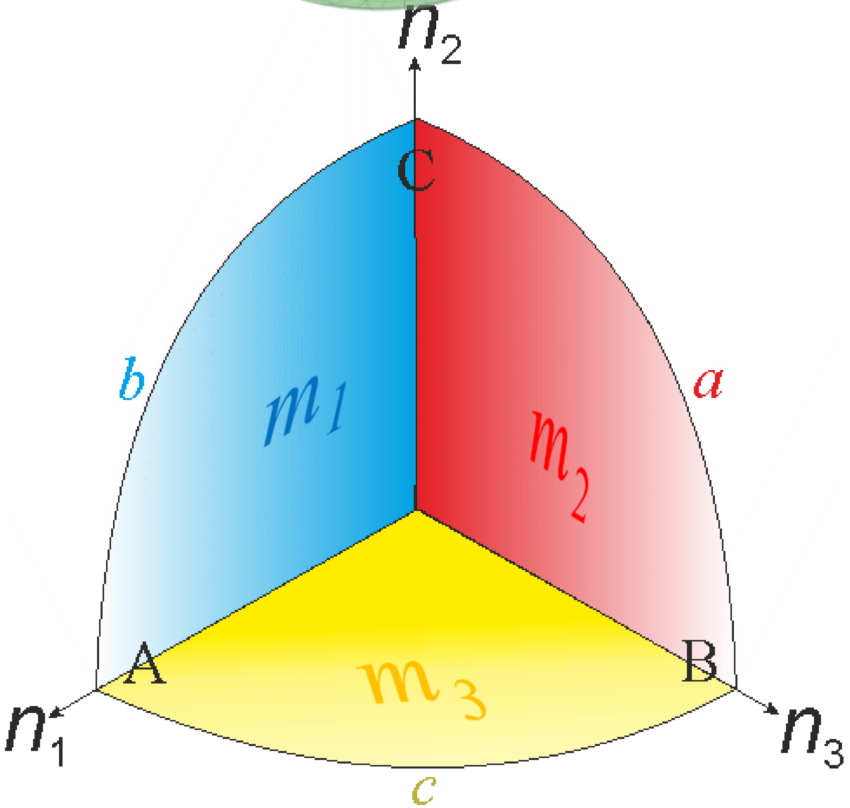
Откуда

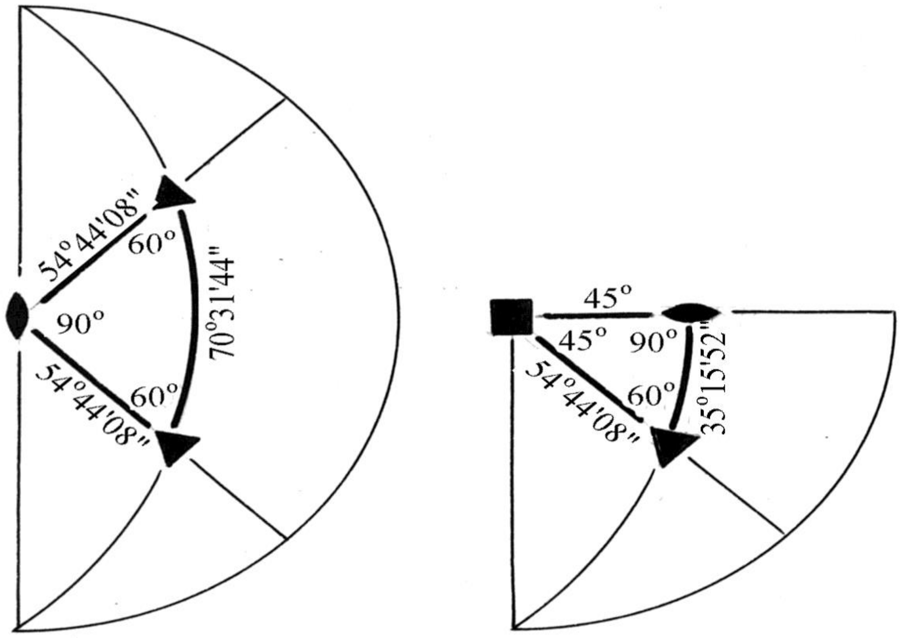
$$\arccos A = \arccos \frac{\cos a - \cos b \cos c}{\sin b \sin c}$$

*где **a, b, c** - **с**тороны сферического треугольника, **A** – угол, противолежащий стороне **a**, равный α/2 соответствующей оси*

Сдает ответ на вопрос под какими углами могут пересекаться поворотные оси данных порядков в реально существующих многогранниках







а *б*

На этом мы прощаемся с макросимметрией, но…