

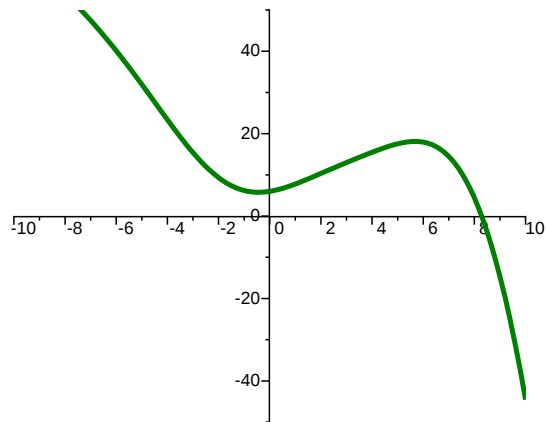
„Fizyka materii skondensowanej i struktur półprzewodnikowych” (1101-4FS22)

Tomasz Kazimierczuk

Zakład Fizyki Ciała Stałego
Instytut Fizyki Doświadczalnej
Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski

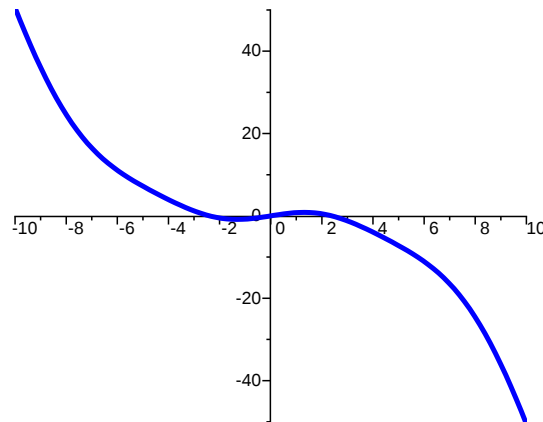
Oś symetrii $x=0$

$f(x)$



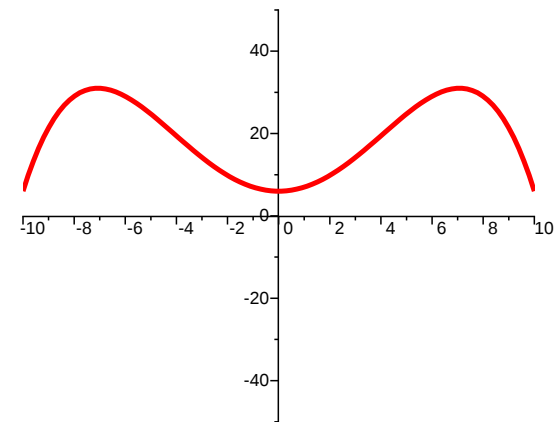
=

Część
antysymetryczna



+

Część
symetryczna



Symetrie punktowe

Operacje symetrii danego obiektu – przekształcenia nie zmieniające wyglądu tego obiektu

Symetrie punktowe – takie, dla których operacje symetrii zachowują przynajmniej jeden punkt przestrzeni

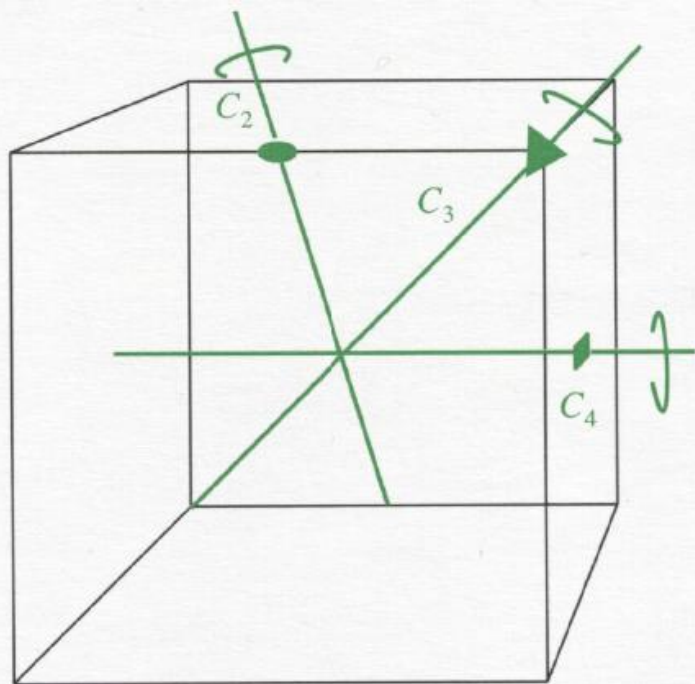
Podstawowe punktowe operacje symetrii:

- Obroty właściwe
- Inwersja
- Odbicie zwierciadlane
- Obroty niewłaściwe (obróć i następujące po nim odbicie od płaszczyzny $\perp$ do osi)
- lub: • Obroty inwersyjne (obróć i następująca po nim inwersja)

Elementy symetrii, względem których wykonywane są dane operacje symetrii:

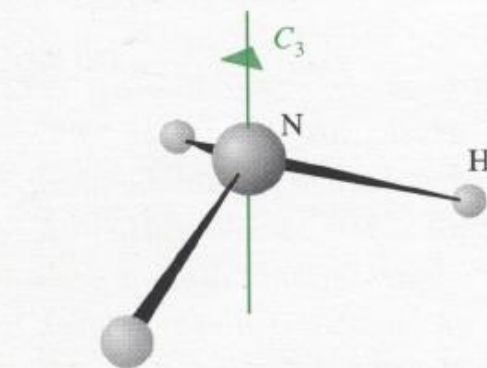
- $\Rightarrow$ *osie obrotu*
- $\Rightarrow$ *środek inwersji*
- $\Rightarrow$ *płaszczyzna zwierciadlana*
- $\Rightarrow$ *osie obrotów niewłaściwych*
- $\Rightarrow$ *osie inwersyjne*

Symetrie punktowe - obroty

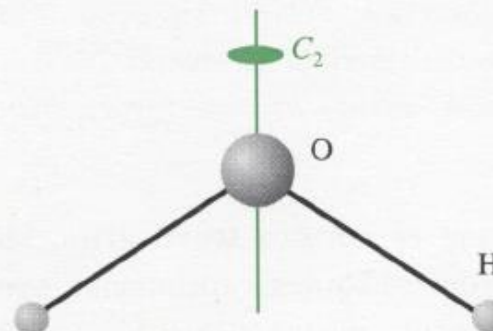


15.1 Niektóre elementy symetrii sześcianu. Oś dwukrotna, trójkrotna i czterokrotna zostały oznaczone zgodnie z obowiązującą konwencją

P.W. Atkins, Chemia fizyczna



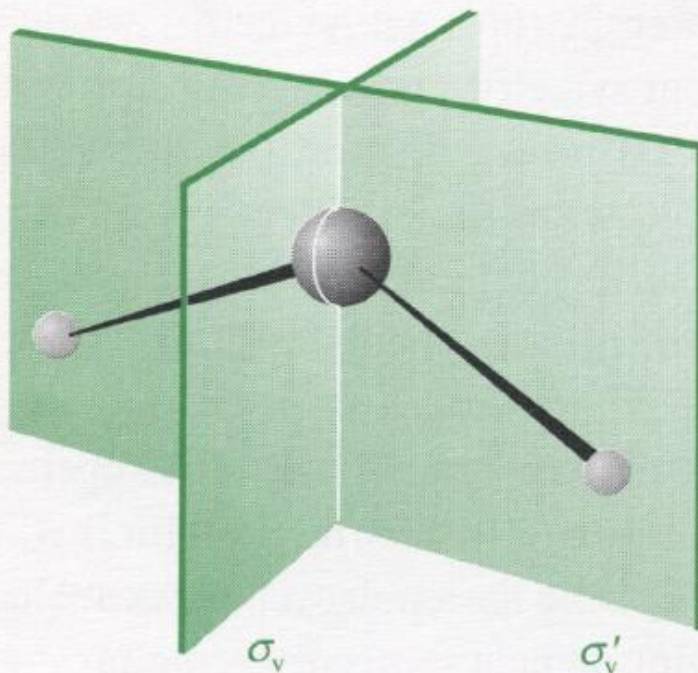
a)



b)

15.2 Częsteczka NH_3 (a) ma oś trójkrotną (C_3), natomiast częsteczka H_2O (b) ma oś dwukrotną (C_2). Obydwie częsteczki mają również inne elementy symetrii

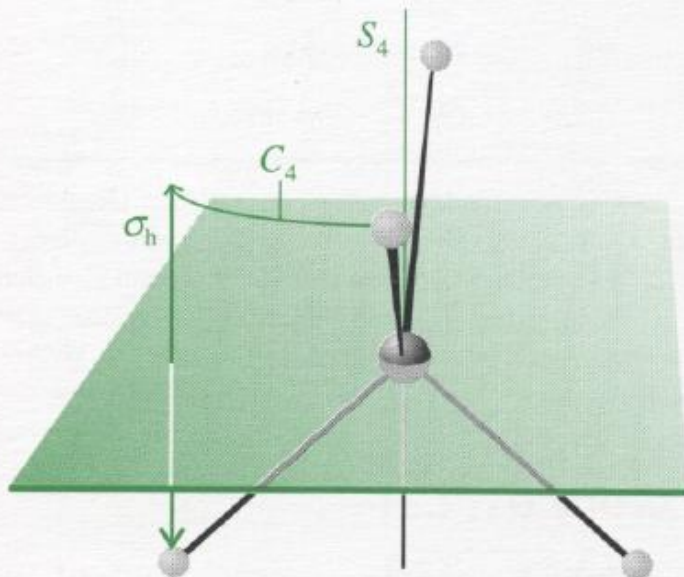
Symetrie punktowe - odbicia



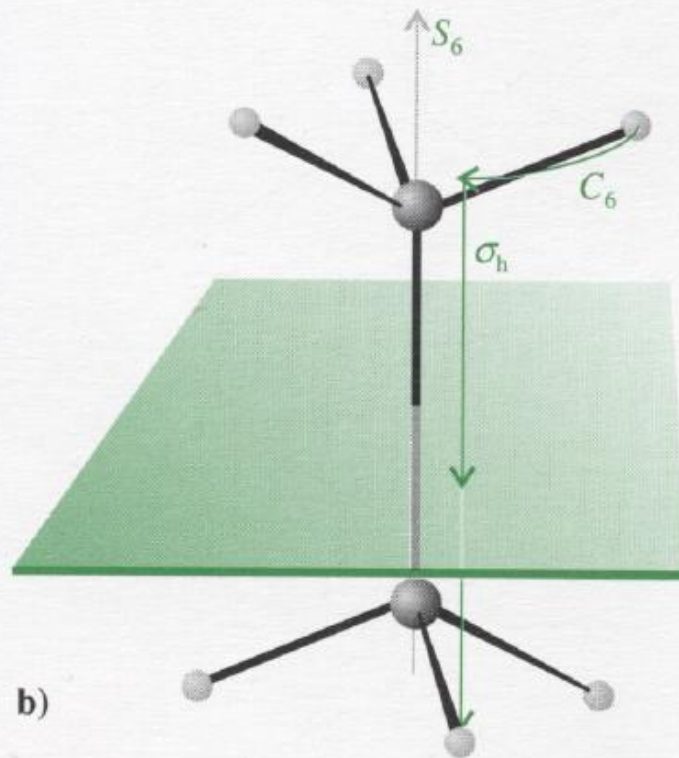
15.3 Cząsteczka H_2O ma dwie płaszczyzny zwierciadlane. Obydwie są płaszczyznami wertykalnymi (tzn. zawierają oś główną), oznacza się je więc jako σ_v i σ'_v

P.W. Atkins, Chemia fizyczna

Symetrie punktowe – obroty niewłaściwe



a)

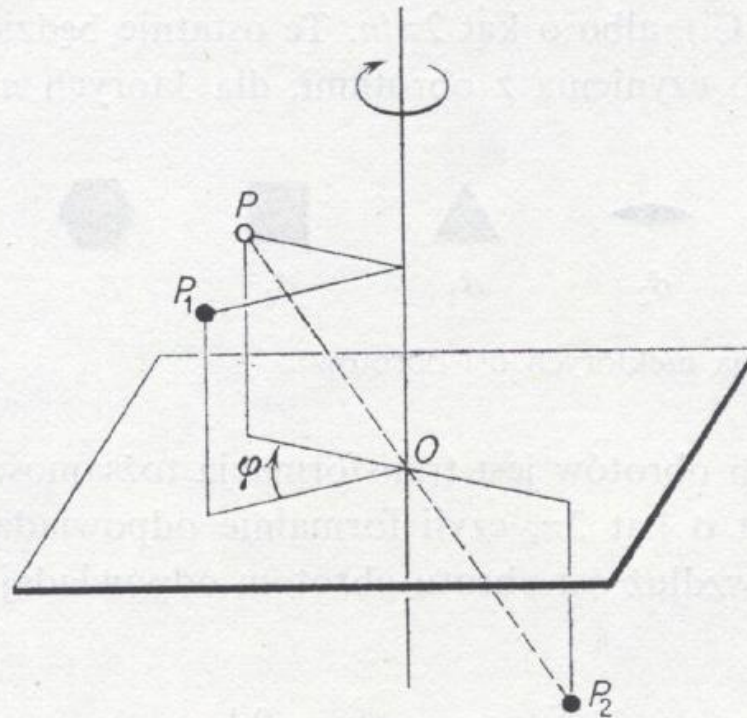


b)

15.6 a) Cząsteczka CH_4 ma czterokrotną oś niewłaściwą (S_4); cząsteczka ta jest nieodróżnialna po obrocie o 90° i następującym po nim odbiciu w płaszczyźnie horyzontalnej, ale żadna z tych operacji z osobna nie jest operacją symetrii cząsteczki. b) Etan w konformacji naprzemianległej ma oś S_6 , która jest złożeniem obrotu o kąt 60° i odbicia

P.W. Atkins, Chemia fizyczna

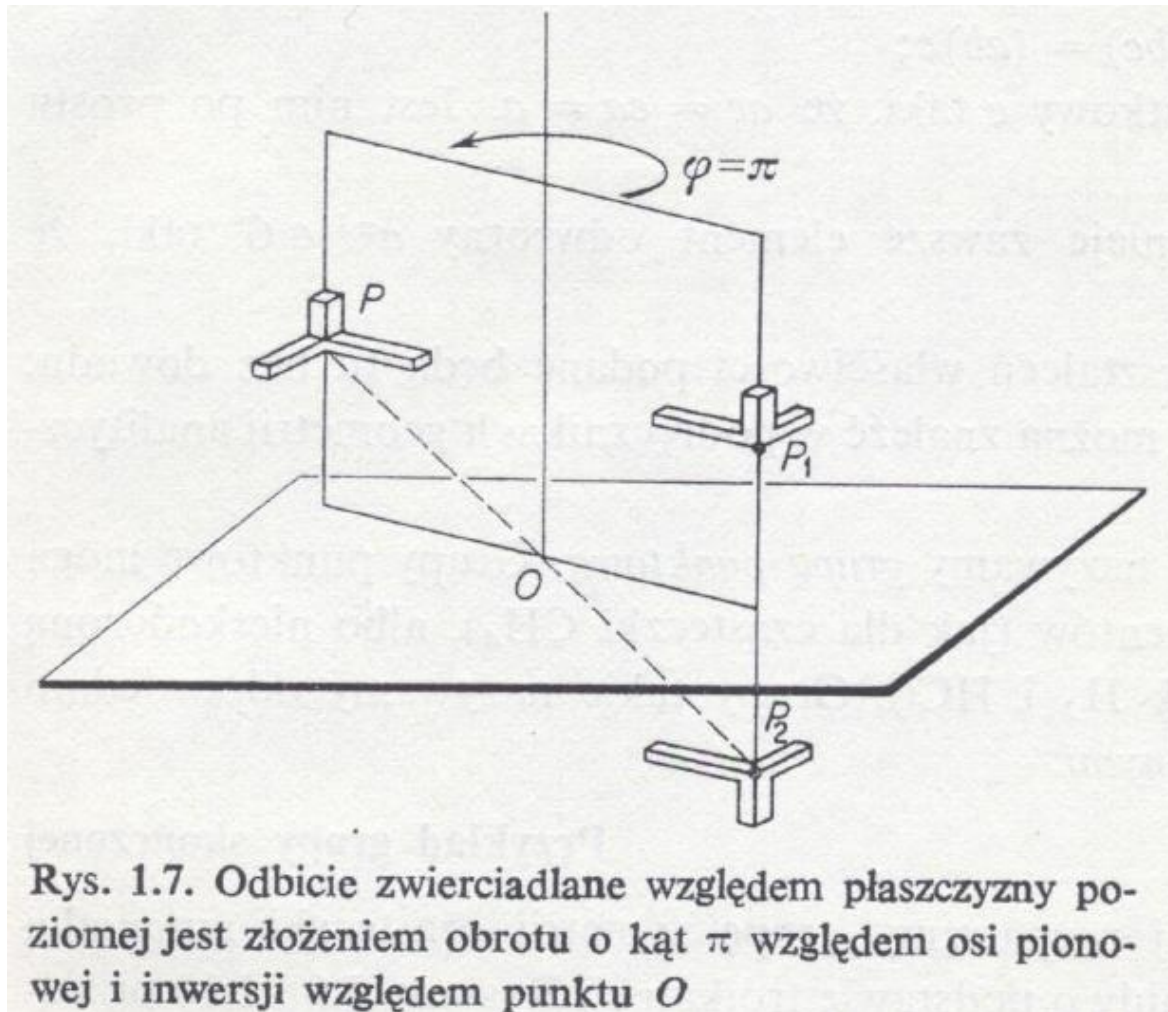
Symetrie punktowe – obroty inwersyjne



Rys. 1.5. Obrót inwersyjny. Punkt P_1 przechodzi w P pod wpływem obrotu o kąt φ względem osi pionowej, a następnie w punkt P_2 przez inwersję względem punktu O leżącego na osi obrotu

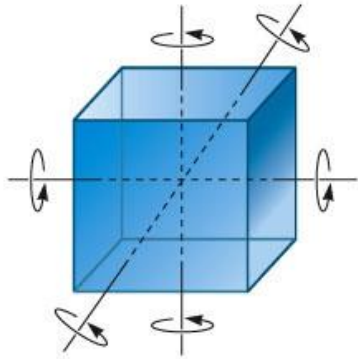
J. Ginter, Wstęp do fizyki atomu, cząsteczki i ciała stałego

Symetrie punktowe – obroty inwersyjne

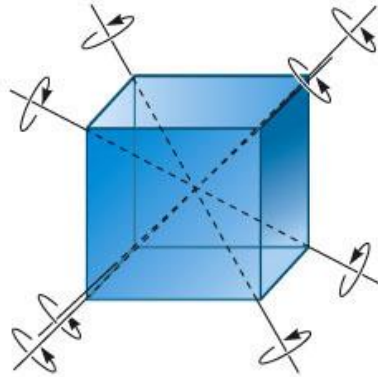


J. Ginter, Wstęp do fizyki atomu, cząsteczki i ciała stałego

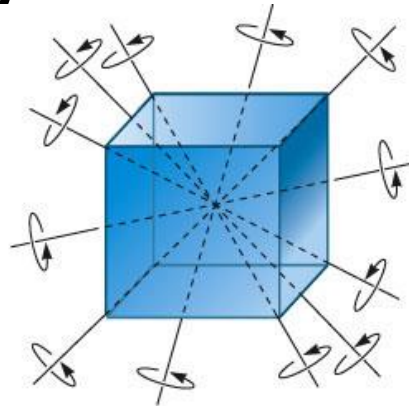
Podstawowe symetrie sześciangu



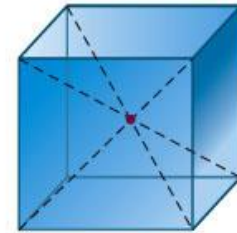
Three 4-fold axes



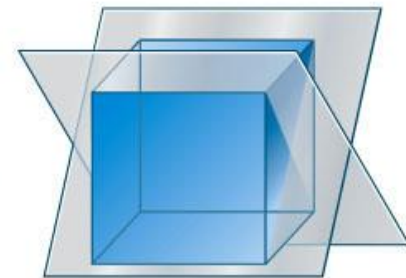
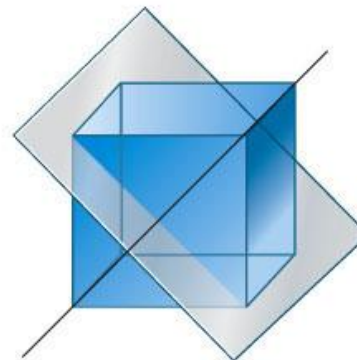
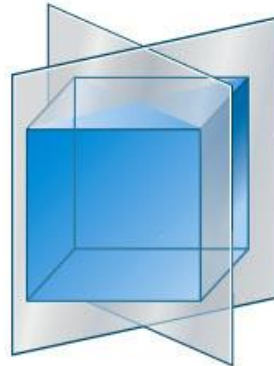
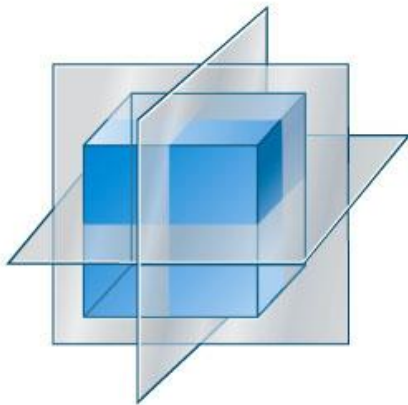
Four 3-fold axes



Six 2-fold axes



Center of inversion



Nine mirror planes

© 2007 Thomson Higher Education

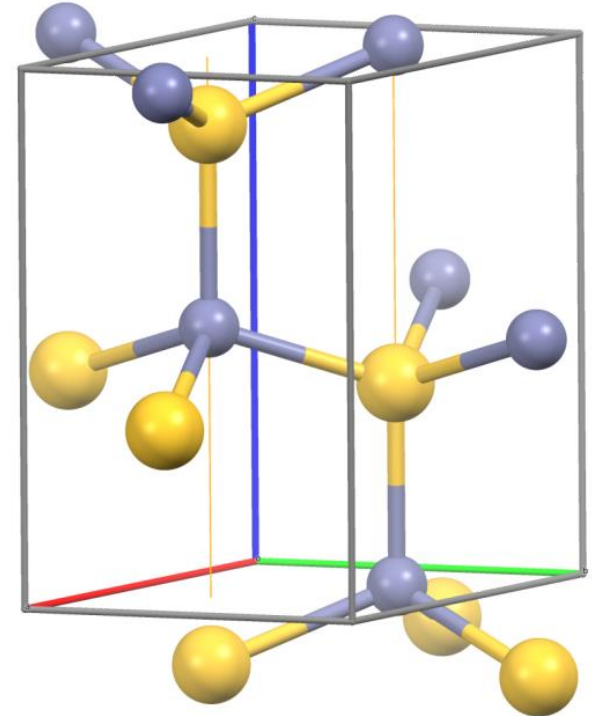
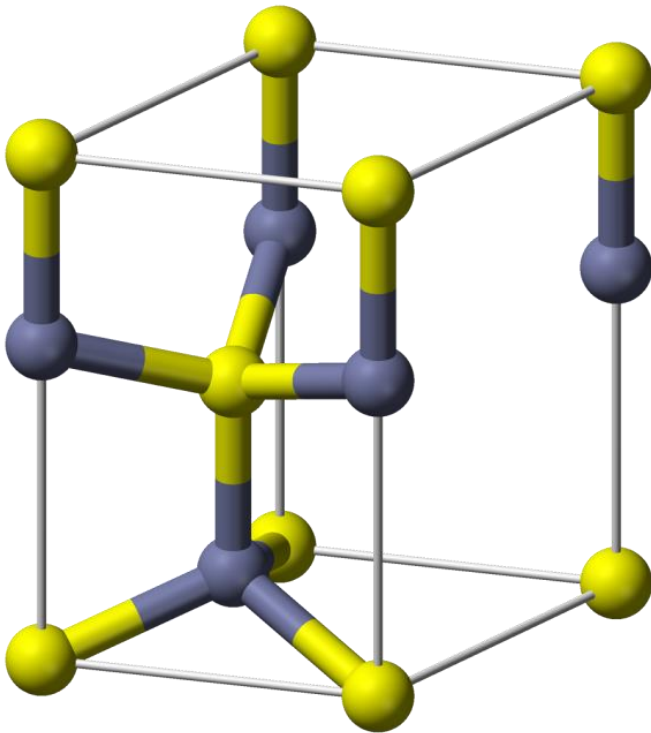
http://www.nyu.edu/classes/tuckerman/honors.chem/lectures/lecture_20/node1.html

Stosowane oznaczenia

Element symetrii	Schönflies (cząsteczki)	Hermann- Mauguin (kryształy)	Streitwolf (kryształy)	Operacja
Tożsamość	E	1	ε	1-krotny obrót
Oś obrotu	C_n	n	δ_n	n-krotny obrót ($360^\circ/n$)
Płaszczyzna symetrii	σ	m	ρ	odbicie
Środek symetrii	i	$\bar{1}$	i	inwersja
Oś obrotu niewłaściwego	S_n	—	—	n-krotny obrót + odbicie
Oś obrotu inwersyjnego	—	$\bar{n}$	σ_n	n-krotny obrót + inwersja

W kryształach możliwe są osie obrotu 1-, 2-, 3-, 4- i 6-krotne

Czy są jeszcze jakieś inne symetrie sieci krystalicznej?



<https://crystalsymmetry.wordpress.com/>

Grupy punktowe

Zbiór wszystkich punktowych operacji symetrii danego obiektu, wraz z działaniem polegającym na składaniu tych operacji ***tworzą grupę***

Grupy punktowe

(według: P. Kowalczyk, „Fizyka cząsteczek”)

Zbiór elementów G oraz działanie (mnożenie grupowe) tworzą grupę, jeśli:

- w zbiorze G istnieje element jednostkowy e , taki że $e \bullet a = a \bullet e = a$
- każdy element zbioru a ma w tym zbiorze element odwrotny a^{-1} , taki że $a^{-1} \bullet a = a \bullet a^{-1} = e$
- mnożenie grupowe jest łączne: $a \bullet (b \bullet c) = (a \bullet b) \bullet c$

Mnożenie grupowe nie musi być przemienne. Jeśli jest – grupa nazywa się **przemenną lub abelową**

Liczba elementów grupy nazywa się **rzędem grupy**

Grupy punktowe

	<i>e</i>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>f</i>
<i>e</i>	<i>e</i>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>f</i>
<i>a</i>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>e</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>c</i>
<i>b</i>	<i>b</i>	<i>e</i>	<i>a</i>	<i>f</i>	<i>c</i>	<i>d</i>
<i>c</i>	<i>c</i>	<i>f</i>	<i>d</i>	<i>e</i>	<i>b</i>	<i>a</i>
<i>d</i>	<i>d</i>	<i>c</i>	<i>f</i>	<i>a</i>	<i>e</i>	<i>b</i>
<i>f</i>	<i>f</i>	<i>d</i>	<i>c</i>	<i>b</i>	<i>a</i>	<i>e</i>

- rząd tej grupy wynosi 6
- grupa jest nieprzemienne
- np.: $c \bullet a = d$
 $a \bullet c = f$

P. Kowalczyk, Fizyka cząsteczek

Klasy elementów sprzężonych

Jeśli x i z są dowolnymi elementami grupy, to przekształcenie podobieństwa $y = z^{-1} \bullet x \bullet z$ prowadzi do elementu y sprzężonego do x za pomocą elementu z

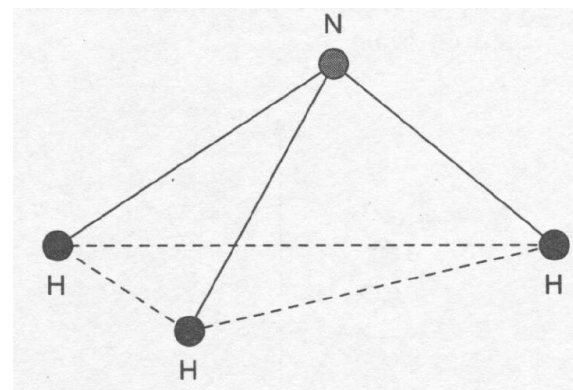
Pełny zbiór elementów grupy, które są ze sobą wzajemnie sprzężone (za pomocą dowolnych elementów grupy) *nazywa się klasą.*

Grupa symetrii cząsteczki amoniaku, C_{3v}

Tabela grupowa grupy C_{3v}
(notacja Schönfliesa)

	E	C_3	C_3^2	σ_1	σ_2	σ_3
E	E	C_3	C_3^2	σ_1	σ_2	σ_3
C_3	C_3	C_3^2	E	σ_2	σ_3	σ_1
C_3^2	C_3^2	E	C_3	σ_3	σ_1	σ_2
σ_1	σ_1	σ_3	σ_2	E	C_3^2	C_3
σ_2	σ_2	σ_1	σ_3	C_3	E	C_3^2
σ_3	σ_3	σ_2	σ_1	C_3^2	C_3	E

Cząsteczka NH_3



- rząd tej grupy wynosi 6
- grupa jest nieprzemienne
- grupa zawiera 3 klasy:
 - $\{E\}$ – klasa elementu neutralnego
 - $\{C_3, C_3^2\}$ – obroty
 - $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$ – odbicia

P. Kowalczyk, Fizyka cząsteczek

Macierze operacji symetrii

Punktowe operacje symetrii są izometriami, a więc każdej z nich można przypisać jakąś macierz ortogonalną M (tzn. taką, że $M^{-1} = M^T$ oraz $\det M = \pm 1$)

W oczywisty sposób macierze te będą spełniały reguły mnożenia grupowego:

$$\begin{array}{ll} \text{jeśli:} & \mathbf{a} \bullet \mathbf{b} = \mathbf{c} \\ \text{to:} & M(\mathbf{a}) \cdot M(\mathbf{b}) = M(\mathbf{c}) \end{array}$$

Zbiór takich macierzy, z działaniem mnożenia macierzy także będzie stanowił grupę – jedną z możliwych *reprezentacji grupy operacji symetrii G*

Macierze operacji symetrii

Na przykład:

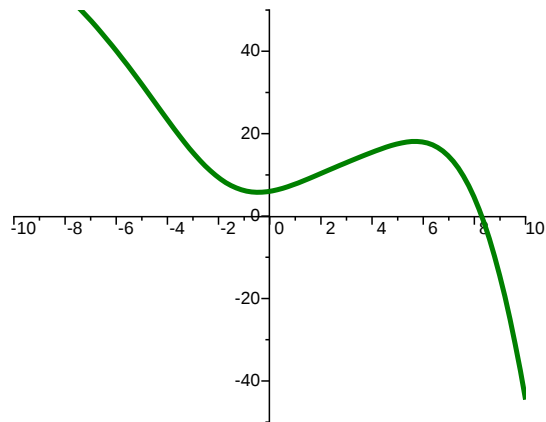
$$M(C_{z,\alpha}) = \begin{bmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad - \text{macierz obrotu wokół osi } z \text{ o kąt } \alpha$$

$$M(i) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad - \text{macierz inwersji}$$

$$M(\sigma_{xz}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad - \text{macierz odbicia w płaszczyźnie } y = 0$$

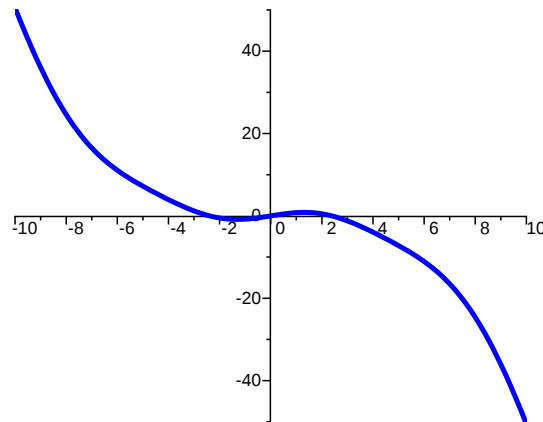
Oś symetrii $x=0$

$f(x)$



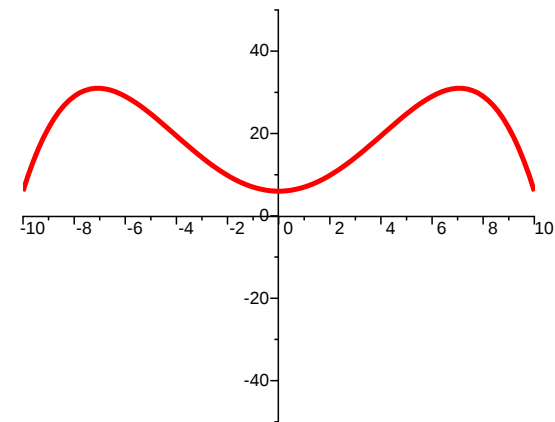
=

Część
antysymetryczna



+

Część
symetryczna



Oś symetrii $x=0$

- Rozważmy grupę z symetrią odbicia $x \rightarrow -x$
- Grupa ma 2 elementy: E, σ
- Tabela charakterów reprezentacji nieprzywiedlnych:

C_s	E	σ
A'	+1	+1
A''	+1	-1

Symetryczna: $f(-x) = f(x)$

Antysymetryczna: $f(-x) = -f(x)$

Część symetryczna: $(f(x) + f(-x)) / 2$

Część antysymetryczna: $(f(x) - f(-x)) / 2$

Oś symetrii $x=0$

- Ogólnie rzutowanie obiektu (tu: funkcji) na daną reprezentację:

$$f^{\Gamma}(x) = \sum_a \chi^{\Gamma}(a) f(a(x))$$

a – operacje symetrii w grupie
 $\chi^{\Gamma}(a)$ – charaktery danej reprezentacji

C_s	E	σ
A'	+1	+1
A''	+1	-1

Symetryczna: $f(-x) = f(x)$

Antysymetryczna: $f(-x) = -f(x)$

Część symetryczna: $(f(x) + f(-x)) / 2$

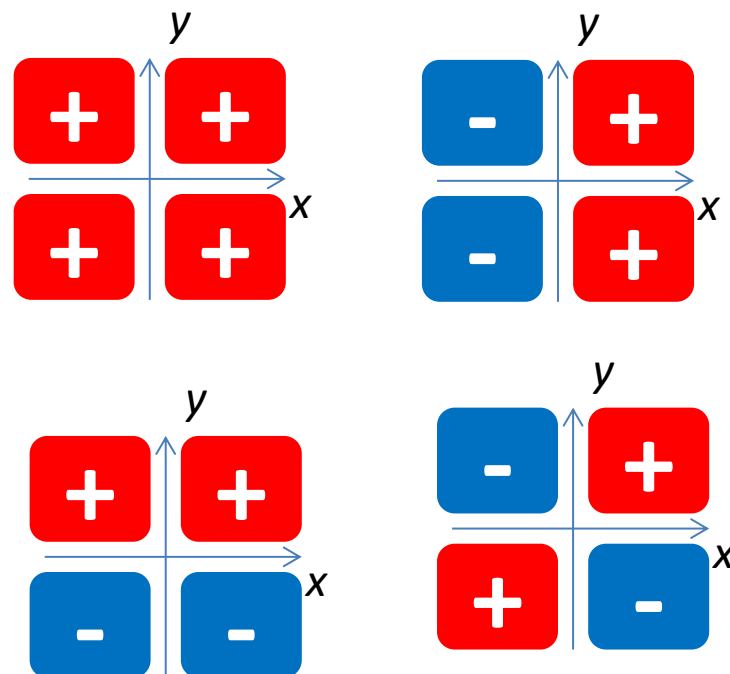
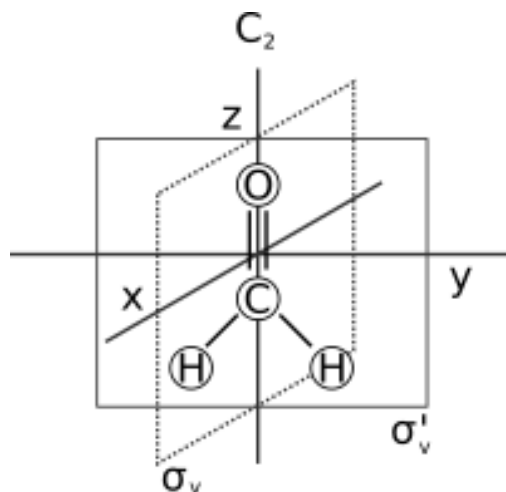
Część antysymetryczna: $(f(x) - f(-x)) / 2$

Funkcje zgodne z symetrią

- Grupa z 1 płaszczyzną symetrii (C_s):
 - Funkcje antysymetryczne: $f(x) = x$, (również x^3 , $\sin(x)$, ...)
 - Funkcje symetryczne: x^2

Funkcje zgodne z symetrią

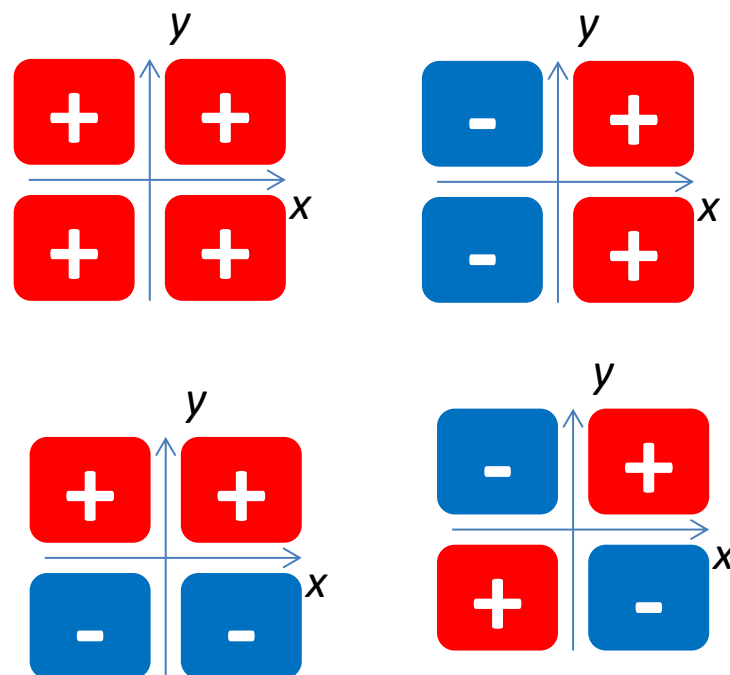
- Grupa z 2 płaszczyznami symetrii (C_{2v})



Funkcje zgodne z symetrią

- Grupa z 2 płaszczyznami symetrii (C_{2v})

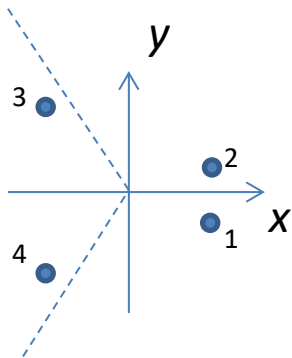
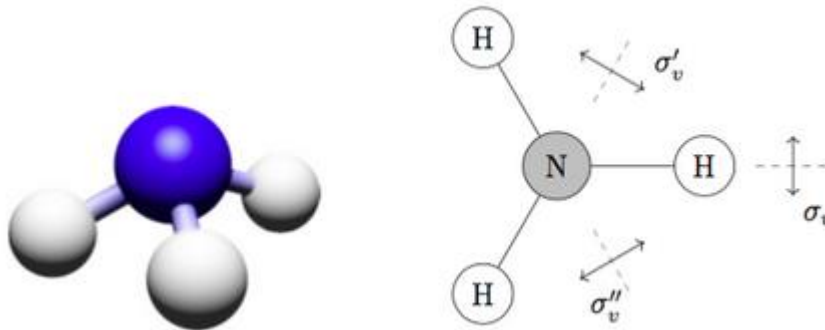
C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ_v		
A_1	+1	+1	+1	+1	z	x^2, y^2, z^2
A_2	+1	+1	-1	-1		xy
B_1	+1	-1	+1	-1	x	xz
B_2	+1	-1	-1	+1	y	yz



$$f(\vec{r}) = x$$

Funkcje zgodne z symetrią

- Grupa z 3-krotną osią symetrii (C_{3v})



Zakładając, że reprezentacja jest 1-wymiarowa

$$f(C_3(\vec{r})) = \chi(C_3) \cdot f(\vec{r})$$

$$\sigma \rightarrow C_3 \rightarrow \sigma \rightarrow C_3$$

$$\chi(\sigma) \cdot \chi(C_3) \cdot \chi(\sigma) \cdot \chi(C_3) = 1$$

$$[\chi(C_3)]^2 = 1$$

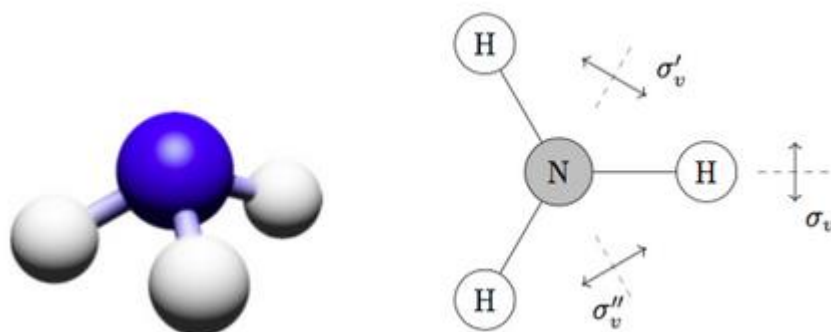
$$C_3 \rightarrow C_3 \rightarrow C_3$$

$$\chi(C_3) \cdot \chi(C_3) \cdot \chi(C_3) = 1$$

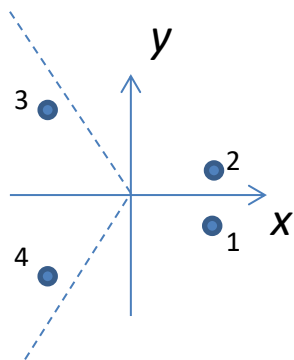
$$[\chi(C_3)]^3 = 1$$

Funkcje zgodne z symetrią

- Grupa z 3-krotną osią symetrii (C_{3v})



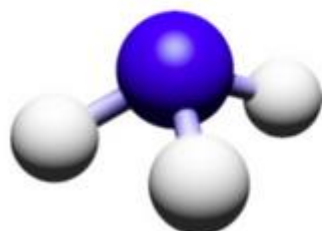
Zakładając, że reprezentacja jest 1-wymiarowa



$$\begin{bmatrix} f(C_3(\vec{r})) \\ g(C_3(\vec{r})) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f(\vec{r}) \\ g(\vec{r}) \end{bmatrix}$$

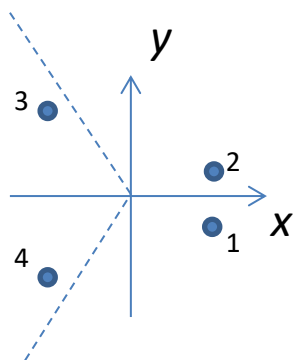
Funkcje zgodne z symetrią

- Grupa z 3-krotną osią symetrii (C_{3v})



C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$		
A_1	+1	+1	+1	z	x^2+y^2, z^2
A_2	+1	+1	-1		
E	+2	-1	0	(x, y)	(x^2-y^2, xy) (xz, yz)

Zakładając, że reprezentacja jest 1-wymiarowa



Dygresja:

Gdy charaktery są zespolone, często paruje się je w większą reprezentację (przywiedlną)

C_3	E	C_3	C_3^2
A	1	1	1
E	$\begin{Bmatrix} 1 & \epsilon & \epsilon^* \\ 1 & \epsilon^* & \epsilon \end{Bmatrix}$		

C_3	E	C_3	C_3^2
A	1	1	1
E	2	-1	1

$$\epsilon = \exp(2\pi i/3) = -\frac{1}{2} + \frac{i\sqrt{3}}{2}$$