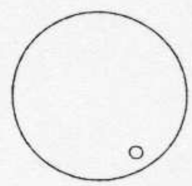
32 krystalograficzne grupy punktowe

Symbole grup podane są w notacji Hermanna-Mauguina (jest to tzw. symbolika międzynarodowa, zalecana przez Międzynarodową Unię Krystalograficzną) oraz (w nawiasach) w notacji Schönfliesa, stosowanej w spektroskopii molekularnej. Pod każdym symbolem podana jest projekcja sferyczna zawierająca elementy symetrii danej grupy oraz ogólny zbiór punktów symetrycznie równoważnych (liczebność tego zbioru równa jest rzędowi grupy).

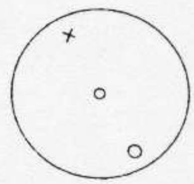
1. Rodzina grup wywodzących się z grupy 1 (układ trójskośny)

$1\ (C_1)$

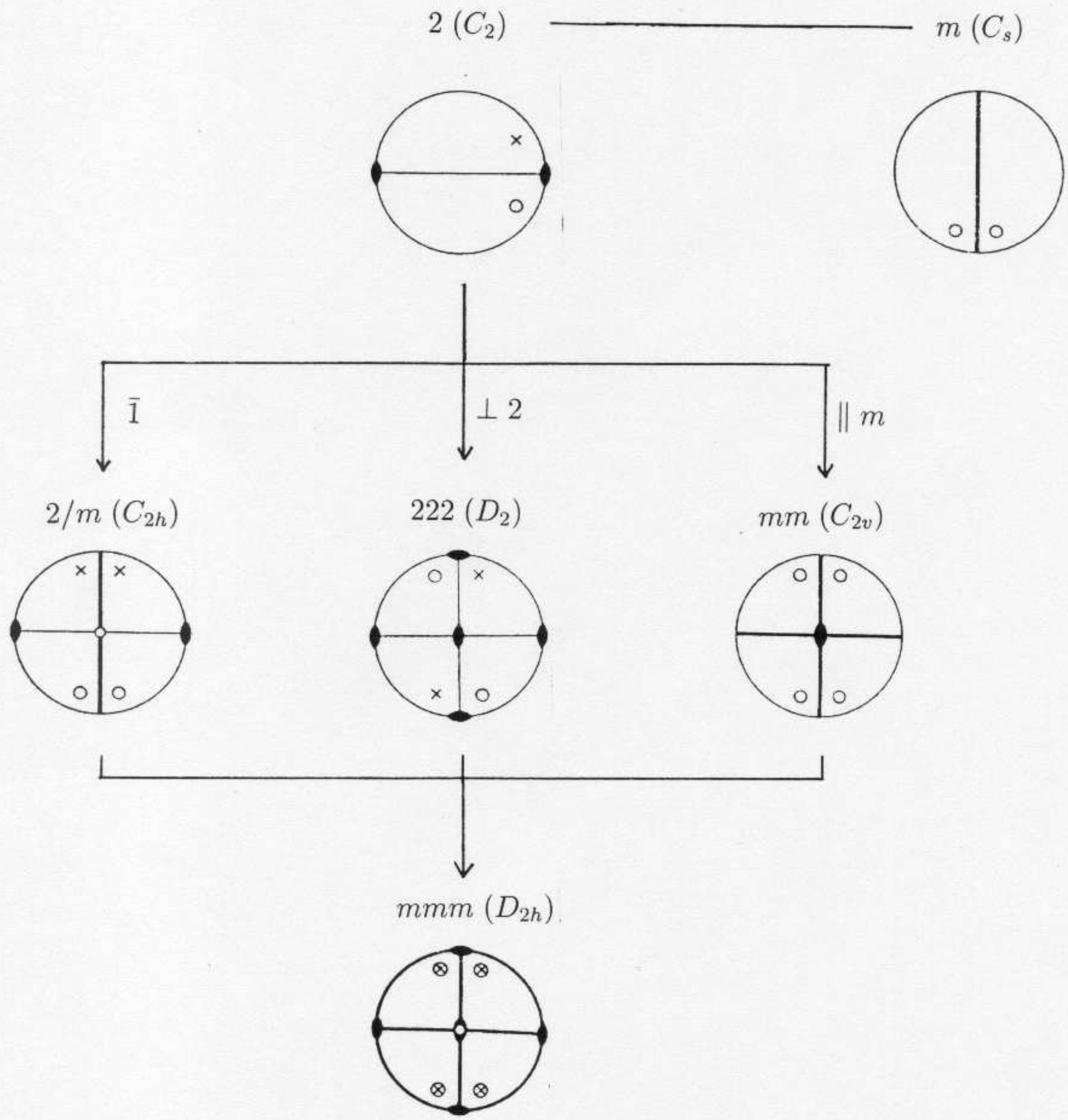


$$\downarrow \bar{1}$$

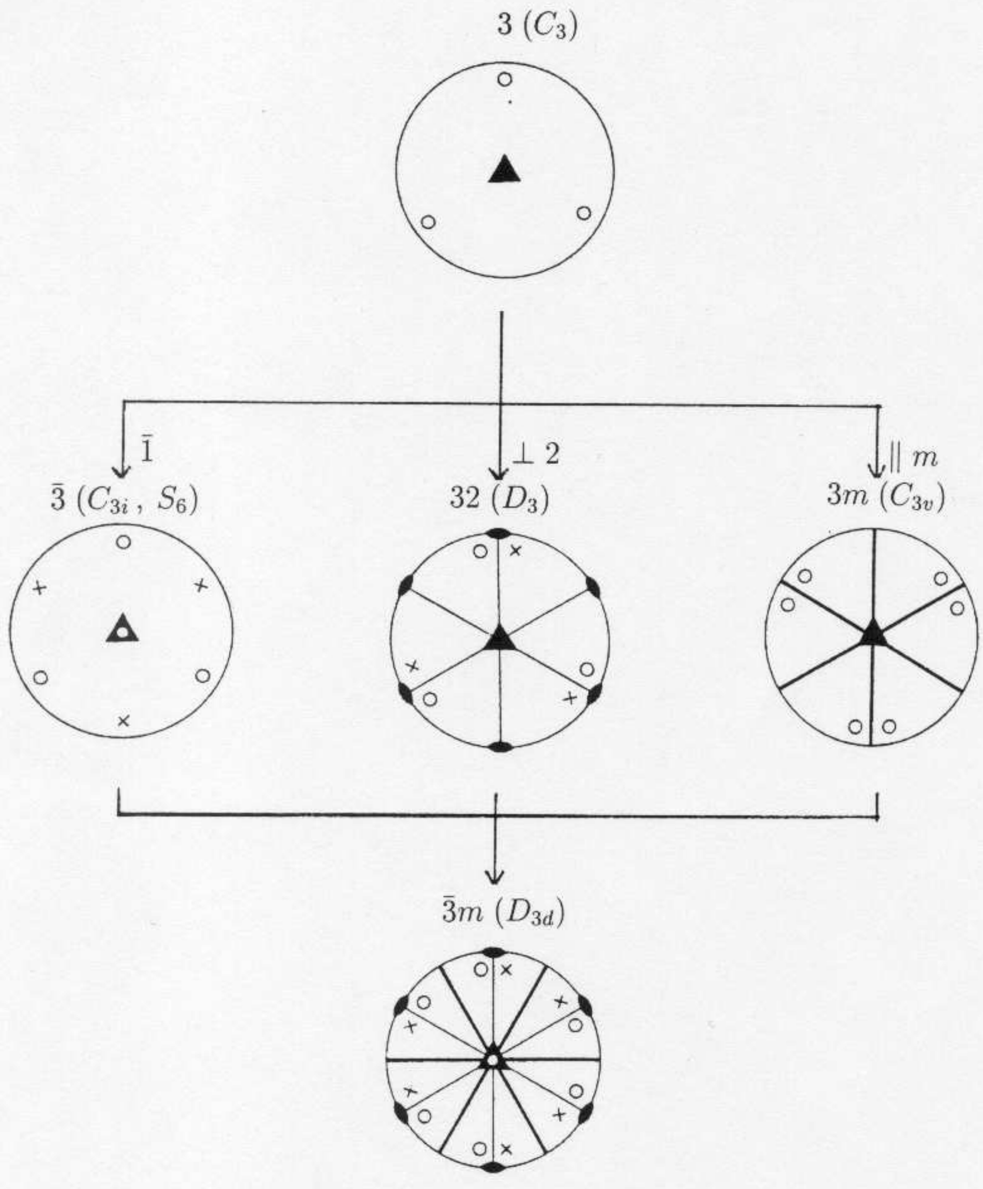
$\bar{1}\ (C_i\,,\ S_2)$



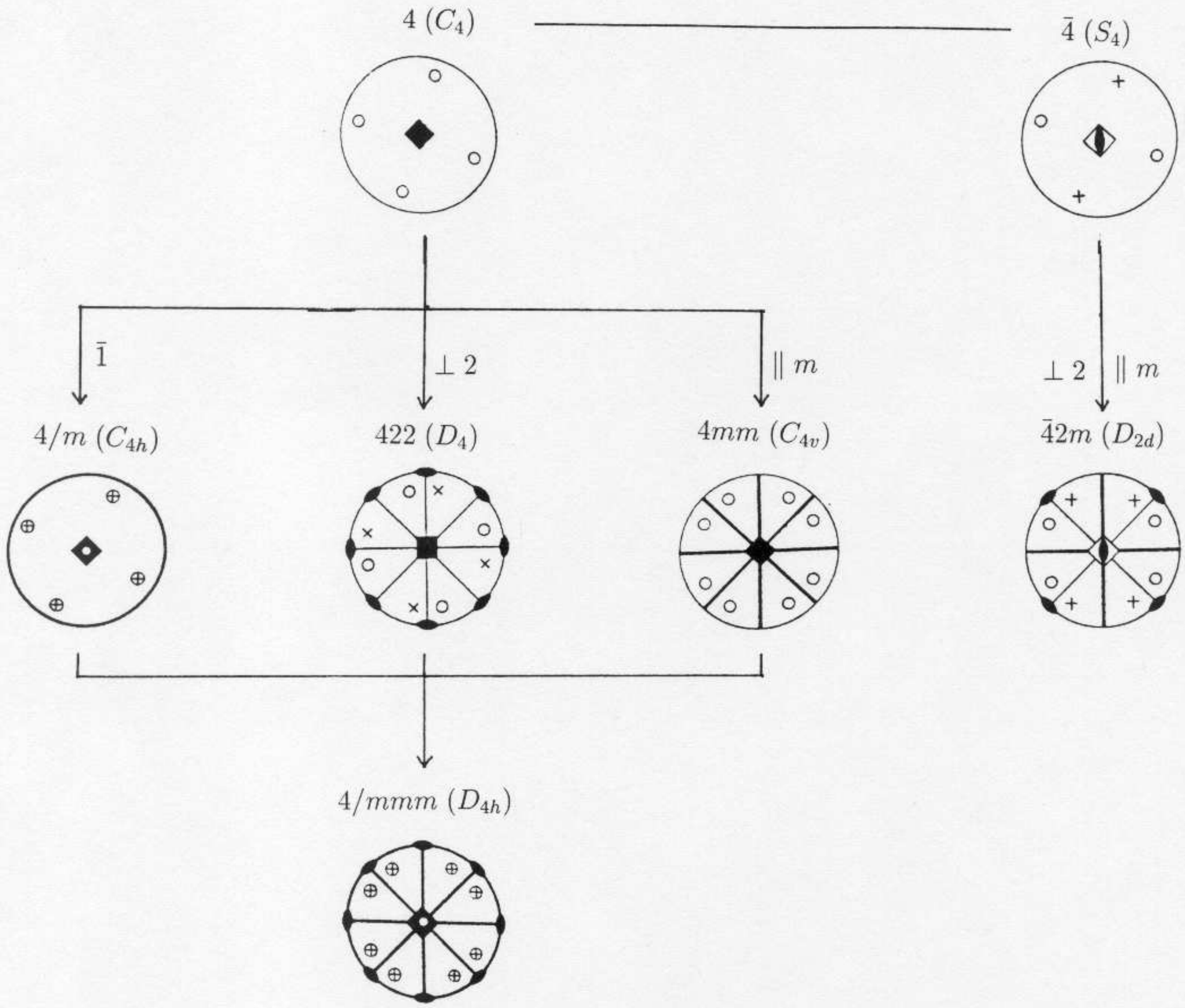
2. Rodzina grup wywodzących się z grupy 2 (układy: jednoskośny i rombowy)



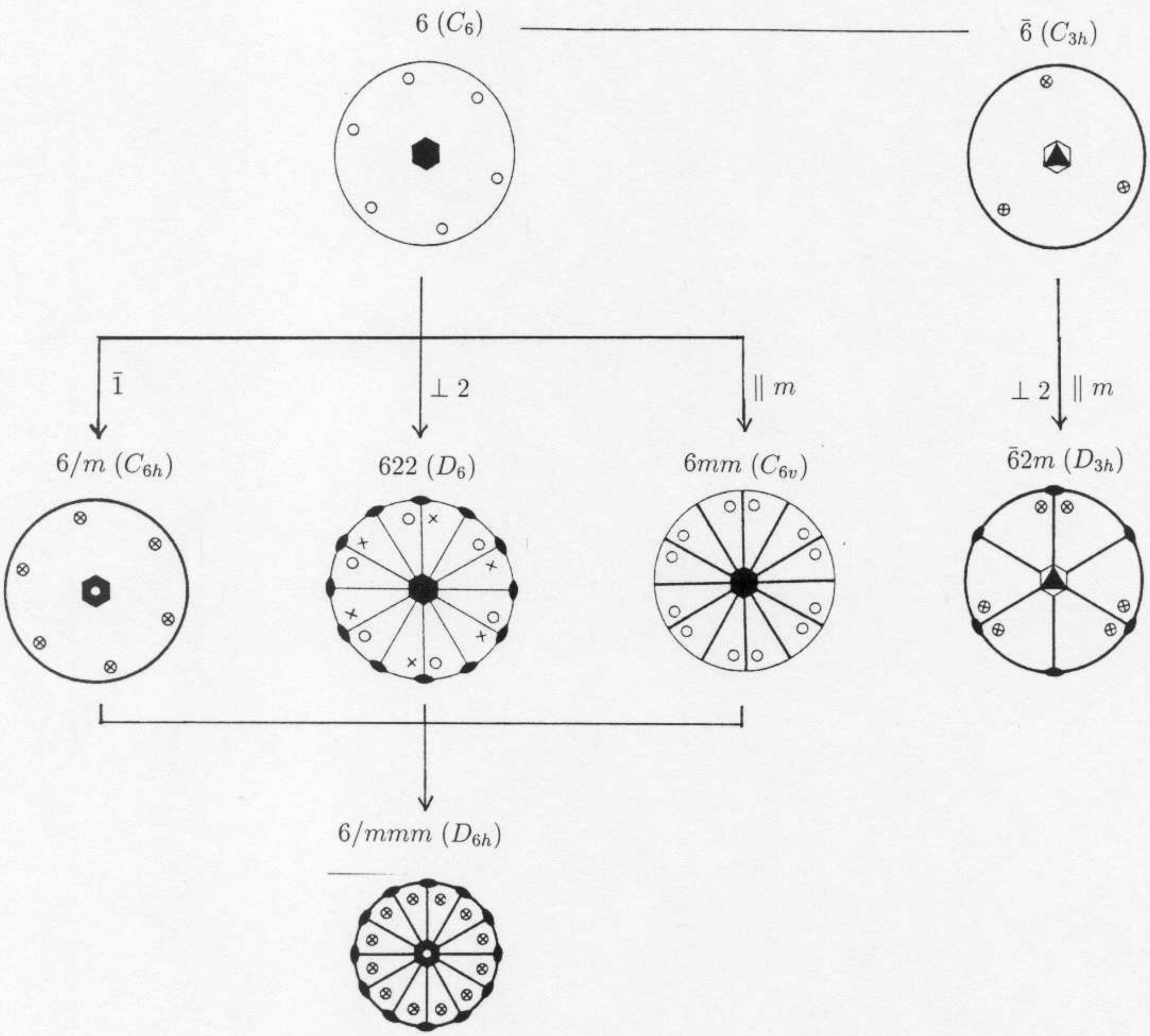
3. Rodzina grup wywodzących się z grupy 3 (układ trygonalny)



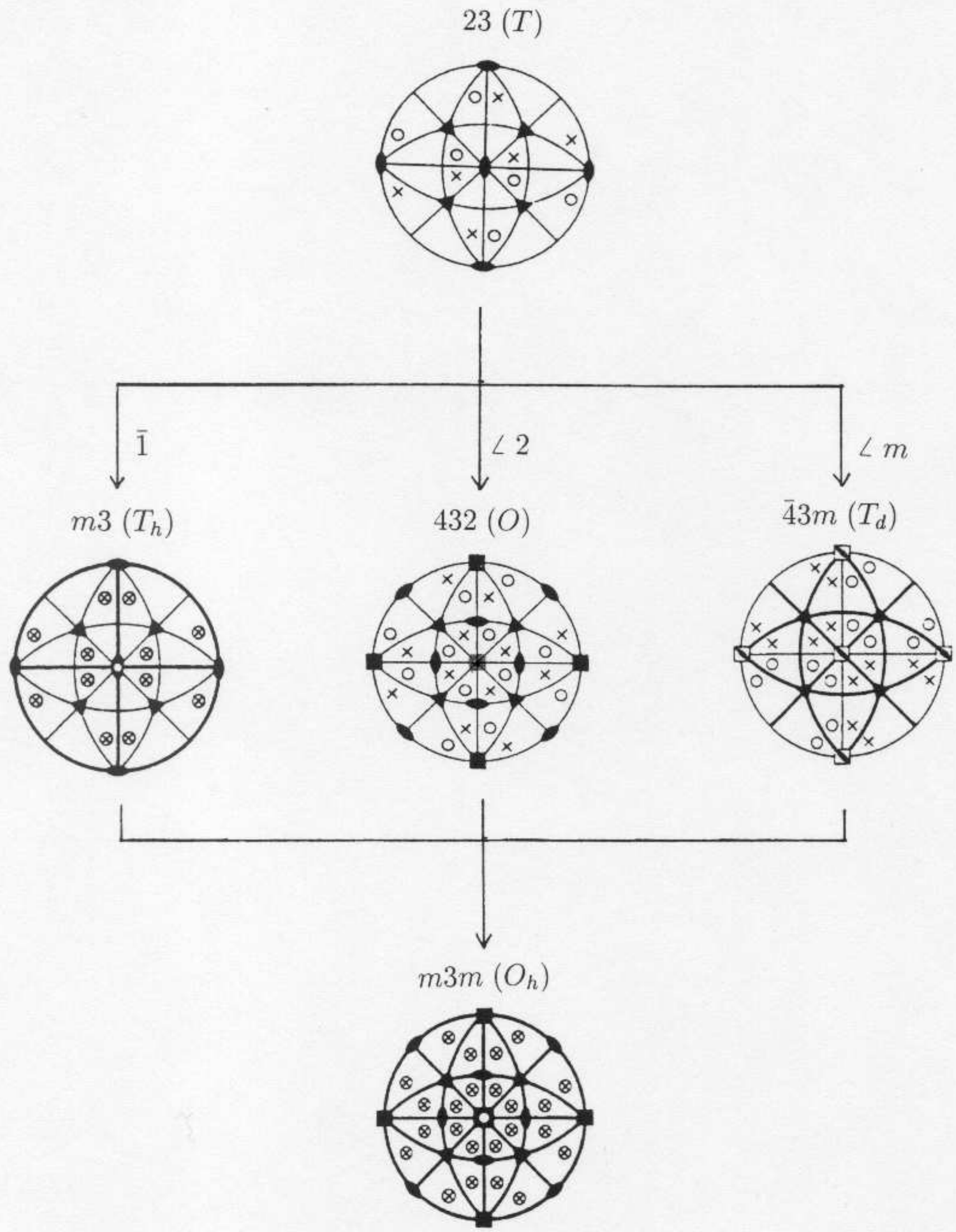
4. Rodzina grup wywodzących się z grupy 4 (układ tetragonalny)



5. Rodzina grup wywodzących się z grupy 6 (układ heksagonalny)



6. Rodzina grup wywodzących się z grupy 23 (układ regularny)

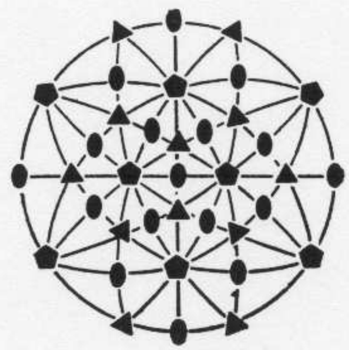


Niekrystalograficzne grupy punktowe skończonego rzędu

1. Rodziny grup wywodzących się:
   (a) z grupy 5 (7, 9, ...) — o strukturze analogicznej do rodziny grupy 3;
   (b) z grupy 8 (12, 16, ...) — o strukturze analogicznej do rodziny grupy 4;
   (c) z grupy 10 (14, 18, ...) — o strukturze analogicznej do rodziny grupy 6.

2. Grupy ikosaedryczne

532 (I)

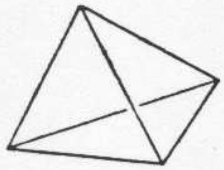


$$532\ (I) \xrightarrow{\bar{1}} \bar{5}3m\ (I_h)$$

Grupy punktowe nieskończonego rzędu

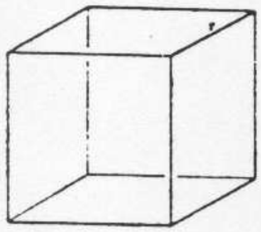
1. Grupa symetrii cząsteczki liniowej heterojądrowej $C_{\infty v}$
2. Grupa symetrii cząsteczki liniowej homojądrowej $D_{\infty h}$
3. Grupa symetrii atomu $O(3)$

Pięć wielościanów foremnych (bryły platońskie)



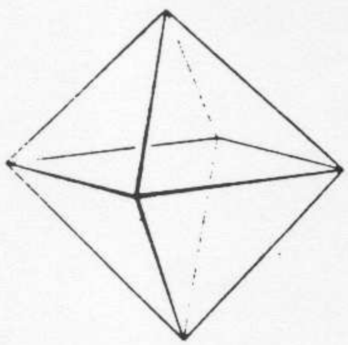
czworościan

ściany: 4 trójkąty równoboczne $\bar{4}3m$
wierzchołki: 4
krawędzie: 6



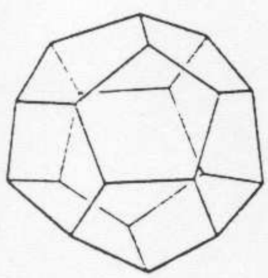
sześcian

ściany: 6 kwadratów $m3m$
wierzchołki: 8
krawędzie: 12



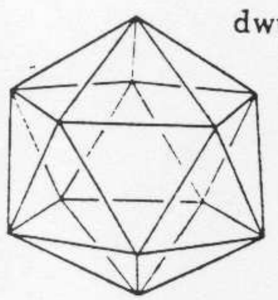
ośmiościan

ściany: 8 trójkątów równobocznych $m3m$
wierzchołki: 6
krawędzie: 12



dwunastościan

ściany: 12 pięciokątów foremnych $\bar{5}3m$
wierzchołki: 20
krawędzie: 30



dwudziestościan

ściany: 20 trójkątów równobocznych $\bar{5}3m$
wierzchołki: 12
krawędzie: 30

Wzór Eulera (1750): $W - K + S = 2$

Otrzymaliśmy zasadniczo charaktery wszystkich krystalicznych grup punktowych. Dane te zebrane są dla porównania, w zwartej formie, w tablicach 4.9-4.19.

Grupy (takie jak $\mathscr{C}_{5v}$ i $\mathscr{S}_8$), które występują niekiedy przy rozpatrywaniu problemów cząsteczkowych, lecz nie są w zasadzie zaliczane do grup krystalograficznych, mogą być równie łatwo zanalizowane za pomocą opisanych tu metod.

Nie zamieszczamy tu tablic charakterów tych grup, które dają się przedstawić w postaci iloczynów prostych, tzn. grup

$$\mathscr{C}_{3h}=\mathscr{C}_3\times\mathscr{C}_s,\qquad \mathscr{C}_{4h}=\mathscr{C}_4\times\mathscr{C}_i,\qquad \mathscr{C}_{6h}=\mathscr{C}_6\times\mathscr{C}_i,$$

$$D_{2h}=D_2\times\mathscr{C}_i,\qquad D_{4h}=D_4\times\mathscr{C}_i,\qquad \mathscr{S}_6=\mathscr{C}_3\times\mathscr{C}_i,$$

$$D_{3d}=D_3\times\mathscr{C}_i,\qquad D_{6h}=D_6\times\mathscr{C}_i,\qquad T_h=T\times\mathscr{C}_i,$$

$$O_h=O\times\mathscr{C}_i.$$

Powodem tego jest fakt, że, jak wykazano w poprzednim rozdziale, charaktery reprezentacji nieprzywiedlnych tych iloczynów prostych można otrzymać z reprezentacji poszczególnych czynników. Wszystkie grupy, które otrzymuje się przez tworzenie iloczynu prostego z grupą $\mathscr{C}_i$, posiadają podwójną ilość klas. Każda z reprezentacji grupy pierwotnej prowadzi do dwu reprezentacji iloczynu prostego, jednej symetrycznej i jednej antysymetrycznej względem inwersji I. Te same uwagi odnoszą się do iloczynów prostych zawierających $\mathscr{C}_s$. Jako przykład podajemy tablicę charakterów grupy $\mathscr{C}_{3h}$ (tabl. 4.8).

Tablica 4.8

$\mathscr{C}_{3h}$:	E	C_3	C_3^2	σ_h	$\sigma_h C_3$	$\sigma_h C_3^2$
A'	1	1	1	1	1	1
A''	1	1	1	-1	-1	-1
E'	1	ε	ε^2	1	ε	ε^2
	1	ε^2	ε	1	ε^2	ε
E''	1	ε	ε^2	-1	$-\varepsilon$	$-\varepsilon^2$
	1	ε^2	ε	-1	$-\varepsilon^2$	$-\varepsilon$

Zadanie. Zbudować tablicę charakterów dla grupy $\mathscr{S}_6$.

4.3. Tablice charakterów dla krystalicznych grup punktowych

Tablica 4.9

$\mathscr{C}_1$:	E
A	1

Tablica 4.10

$\mathscr{C}_i$:	$\mathscr{C}_2$:	$\mathscr{C}_s$:		
			E	I
			E	C_2
			E	σ
A_g	A; z	A'; x, y	1	1
A_u; x, y, z	B; x, y	A''; z	1	-1

Tablica 4.11

$\mathscr{C}_{2h}$:	$\mathscr{C}_{2v}$:	$V \equiv D_2$				
			E	C_2	σ_h	I
			E	C_2	σ_v	$\sigma_{v'}$
			E	C_z	C_y	C_x
A_g	A_1; z	A_1	1	1	1	1
B_g	B_2; y	B_3; x	1	-1	-1	1
A_u; z	A_2	B_1; z	1	1	-1	-1
B_u; x, y	B_1; x	B_2; y	1	-1	1	-1

Tablica 4.12

$\mathscr{C}_4$:	$\mathscr{S}_4$:				
		E	C_4	C_4^2	C_4^3
		E	S_4	S_4^2	S_4^3
A; z	A	1	1	1	1
B	B; z	1	-1	1	-1
E; $x \pm iy$	E; $x \pm iy$	1	i	-1	$-i$
		1	$-i$	-1	i

Tablica 4.13

$\mathscr{C}_3$:	E	C_3	C_3^2
A; z	1	1	1
E; $x \pm iy$	1	ε	ε^2
	1	ε^2	ε

$\varepsilon = e^{-2\pi i/3}$

Tablica 4.14

$\mathscr{C}_{3v}$:	D_3:			
		E	$C_3(2)$	$\sigma_v(3)$
		E	$C_3(2)$	$C_2(3)$
A_1; z	A_1	1	1	1
A_2	A_2; z	1	1	-1
E; x, y	E; x, y	2	-1	0

Tablica 4.15

$\mathscr{C}_6$	E	C_6	C_6^2	C_6^3	C_6^4	C_6^5
A; z	1	1	1	1	1	1
B	1	-1	1	-1	1	-1
E_1	1	ω^2	$-\omega$	1	ω^2	$-\omega$
	1	$-\omega$	ω^2	1	$-\omega$	ω^2
E_2; $x \pm iy$	1	ω	ω^2	-1	$-\omega$	$-\omega^2$
	1	$-\omega^2$	$-\omega$	-1	ω^2	ω

$\omega = e^{2\pi i/6}$

Tablica 4.16

$\mathscr{C}_{4v}$:			E	C_4^2	$C_4(2)$	$\sigma_v(2)$	$\sigma_{v'}(2)$
	D_4:		E	C_4^2	$C_4(2)$	$C_2(2)$	$C_{2'}(2)$
		D_{2d}:	E	C_2	$S_4(2)$	$C_2(2)$	$\sigma_d(2)$
A_1; z	A_1	A_1	1	1	1	1	1
A_2	A_2; z	A_2	1	1	1	−1	−1
B_1	B_1	B_1	1	1	−1	1	−1
B_2	B_2	B_2; z	1	1	−1	−1	1
E; x, y	E; x, y	E; x, y	2	−2	0	0	0

Tablica 4.17

D_6:			E	C_6^3	$C_6^2(2)$	$C_6(2)$	$C_2(3)$	$C_{2'}(3)$
	C_{6v}:		E	C_6^3	$C_6^2(2)$	$C_6(2)$	$\sigma_v(3)$	$\sigma_{v'}(3)$
		D_{3h}:	E	σ_h	$C_3(2)$	$S_3(2)$	$C_2(3)$	$\sigma_v(3)$
A_1	A_1; z	A_1'	1	1	1	1	1	1
A_2; z	A_2	A_2'	1	1	1	1	−1	−1
B_1	B_2	A_1''	1	−1	1	−1	1	−1
B_2	B_1	A_2''; z	1	−1	1	−1	−1	1
E_2	E_1	E'; x, y	2	2	−1	−1	0	0
E_1; x, y	E_2; x, y	E''	2	−2	−1	1	0	0

Tablica 4.18

T:	E	$C_2(3)$	$C_3(4)$	$C_3^2(4)$
A	1	1	1	1
E	1	1	ε	ε^2
	1	1	ε^2	ε
F; x, y, z	3	−1	0	0

Tablica 4.19

O:		E	$C_3(8)$	$C_4^2(3)$	$C_2(6)$	$C_4(6)$
	T_d:	E	$C_3(8)$	$S_4^2(3)$	$\sigma_d(6)$	$S_4(6)$
A_1	A_1	1	1	1	1	1
A_2	A_2	1	1	1	−1	−1
E	E	2	−1	2	0	0
F_2	F_2; x, y, z	3	0	−1	1	−1
F_1; x, y, z	F_1	3	0	−1	−1	1